

RESOLUÇÃO ENZIMÁTICA DA (±) MANDELONITRILA COM A LIPASE *CANDIDA ANTARCTICA*

Julietta R. de Oliveira (PG), André L. M. Porto (PQ)*.
julietarangel@iqsc.usp.br

Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, Av. Trabalhador São-carlense, 400, 13560-970, São Carlos, SP

Palavras Chave: mandelonitrila, enantiosseletividade, resolução enzimática, *Candida antarctica*

Introdução

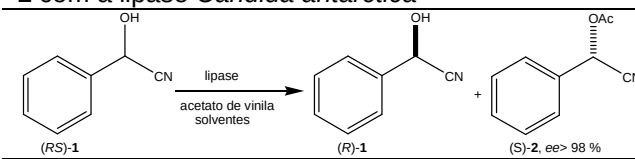
Dentre as enzimas hidrolíticas, as lipases são de maior interesse, pois catalisam diferentes tipos de reações, como esterificação/transesterificação de alcoóis secundários, especialmente em meio orgânico¹. A reação de esterificação enantiosseletiva catalisada por lipases tem sido usada com sucesso na resolução de álcoois secundários¹.

Neste trabalho, realizou-se a esterificação enantiosseletiva da (±)-mandelonitrila pela lipase *Candida antarctica*.

Resultados e Discussão

A resolução enzimática da (±)-mandelonitrila **1** foi realizada com a lipase de *Candida antarctica*. A lipase mostrou eficiência na resolução enzimática da (±)-mandelonitrila **1** fornecendo como produtos a (*R*)-mandelonitrila **1** e seu correspondente (*S*)-acetato **2** (Tabela 1). A (*S*)-acetato mandelonitrila **2** foi obtida com excesso enantiomérico > 98 % em hexano, éter etílico e tolueno. Entretanto, em éter etílico a reação de transesterificação foi mais lenta e após 96 ocorreu decréscimo no ee 96 % do acetato **2**. O ee do (*R*)-álcool será determinado após reação de esterificação, uma vez que não houve enantioresolução na coluna quiral. A configuração absoluta dos produtos foi sugerida pela regra empírica de Kazlauskas e será confirmada pela medida da rotação óptica após a purificação dos enantiômeros.

Tabela 1. Resolução enzimática da (±) mandelonitrila **1** com a lipase *Candida antarctica*



t (h)	c (%) 1	c (%) 2	ee (%) 2
Hexano			
48	65	35	> 98
72	69	38	> 98
Et ₂ O			
48	77	23	> 98
72	70	30	> 98
Tolueno			
48	67	33	> 98
72	65	35	> 98
120	63	37	> 98
168	54	46	> 98
184	52	48	> 98

c (%) = concentração determinado por cromatografia gasosa; ee = excesso enantiomérico.

Conclusões

A resolução da (±)-mandelonitrila **1** com a lipase *Candida antarctica* foi atingida em uma condição ideal, quando o solvente utilizado foi o tolueno ou hexano, onde obteve-se >98% ee para o (*S*)-acetato da mandelonitrila **2**.

Agradecimentos

À FAPESP e ao CNPq pelo financiamento dos projetos do laboratório. À FAPESP pela bolsa concedida de doutorado.

¹Carvalho, P. O.; Calafatti, S. A.; Marassi, M.; Silva, D. M.; Contesini, F. J. e Bizaco, R. *Quim. Nova*, **2005**, 28, 614.

Hanefeld, U.; Straathof, A. J. J.; Heijnen, J. J. *J. Mol. Catal. B-Enzym.*, **2001**, 11, 213.