

## Biotransformação da (2E)-6-(4-nitrobenziledene)-2-metilciclo-hexen-1-ona mediada por fermento de pão em sistema bifásico

Vanessa D. Silva (PG)<sup>1\*</sup>, Boris U. Stambuk (PQ)<sup>2</sup> e Maria G. Nascimento (PQ)<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Química, <sup>2</sup>Departamento de Bioquímica, Universidade Federal de Santa Catarina - 88040-900 Florianópolis - SC

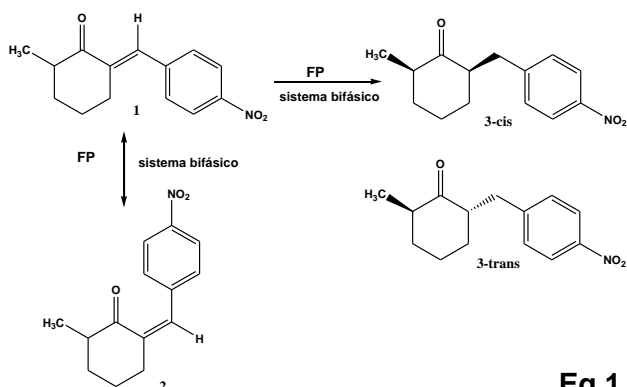
Tel./Fax: +55-48-37219968; e-mail: vanessadutraqmc@yahoo.com.br

Palavras Chave: Fermento de pão, sistema bifásico, olefinas ativadas

### Introdução

Está bem documentado na literatura que a levedura *Saccharomyces cerevisiae* popularmente conhecida por fermento de pão (FP) atua como um biocatalisador eficiente não apenas nas reações de redução de cetonas e aldeídos, mas também na hidrogenação de ligações duplas C=C fortemente ativadas com grupos polarizantes tais como nitro, carbonila e hidroxila.<sup>1,2,3</sup>

O objetivo deste trabalho é realizar a biotransformação da (2E)-6-(4-nitrobenziledene)-2-metilciclo-hexen-1-ona (**1**) que é uma olefina ativada mediada por FP (Fleischmann) em sistema bifásico. (Eq. 1)



Eq. 1.

### Resultados e Discussão

Em erlenmeyers contendo 30 mL de solução tampão ácido cítrico/K<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub> (pH = 5,5) e 30 mL de solvente orgânico, onde 120 mg (0,5 mmol) do substrato **1** foi previamente solubilizado, foram adicionadas 3,0 g de FP. Os frascos foram submetidos à agitação magnética no período de 24 h à 35 °C. Foram retiradas alíquotas das fases aquosa e orgânica e extraídas com diclorometano (2 X 15 mL). A formação do produto foi analisada por CG-quiral (CHROMPACK Chirasil - DEX), CG-MS (Restek Rtx-5MS) e por RMN-<sup>1</sup>H (Varian 400MHz, CDCl<sub>3</sub>).

As análises de CG-quiral e CG-MS mostraram 4 picos distintos, referentes ao substrato **1** (23,9 min, m<sub>z</sub> = 245), aos diastereoisômeros obtidos a partir da hidrogenação da ligação dupla

C=C, cis e trans-2-metil-6-(4-nitrofenilmetil)-ciclo-hexanona (**3**) (20,5 e 20,6 min, m<sub>z</sub> = 247) e ao isômero (2Z)-6-(4-nitrobenziledene)-2-metilciclo-hexen-1-ona (**2**) (20,9 min, m<sub>z</sub> = 245).

Tabela 1. Influência do sistema biocatalítico na biotransformação de **1** mediada por FP.

Sistema biocatalítico	<b>3</b>		<b>2</b>
	Conv (%)	e.d. (%)	Conv (%)
hexano/tampão <sup>(a)</sup>	50	24	2
hexano/CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> /tampão <sup>(b)</sup>	11	9	13
hexano/acetona/tampão <sup>(c)</sup>	29	12	1
tolueno/tampão <sup>(a)</sup>	2	22	14

FP (3 g), **1** (120 mg 0,5 mmol), 35 °C (a) 30 mL de solvente orgânico e 30 mL de tampão, (b) 30 mL de uma mistura *n*-hexano:CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 80:20 v:v, (c) 27 mL de *n*-hexano e 3 mL de acetona.

Observa-se na Tabela 1 que quando o *n*-hexano puro foi utilizado como solvente no sistema bifásico, obteve-se os diastereoisômeros **3-cis** e **3-trans** com conversão de 50% e excesso diastereoisomérico de 24%. Quando o tolueno foi utilizado, obteve-se o produto da isomerização de **1** como majoritário (**2**), com conversão de 14%. Com os outros sistemas utilizados, as conversões em **3** variaram de 11-29% e com e.d. de 9-12%, sendo que com *n*-hexano/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> o produto **2** foi obtido com conversão similar a obtida com tolueno (13%).

### Conclusões

O produto majoritariamente obtido na biotransformação de **1** foi dependente do solvente utilizado no sistema bifásico. A maior conversão em **3** (50%) foi obtida com *n*-hexano como solvente, e a maior conversão em **2** (14%) em tolueno.

### Agradecimentos

UFSC, CNPq, CAPES, INCT-Catálise e FAPESP

- Matsuda, T.; Yamanaka, R.; Nakamura, K., *Tetrahedron: Asymmetry*, **2009**, 20, 513-557.
- Barkakaty, B., Takaguchi, Y., Tsuboi, S., *Tetrahedron*, **2007**, 63., 970-976.
- Chu, Y.; Zhang, B. L.; Silvestre, V.; Cheng, J. P., *Bioorg. Chem.*, **2006**, 34, 159-166.