

Desracemização do α -tetralol via biocatálise extrativa com células íntegras

Bruna N. Rodrigues* (IC), Dávila S. Zampieri (PG), Paulo José S. Moran (PQ), José Augusto R. Rodrigues (PQ). *brunanicolosi@hotmail.com

LabioSin – Laboratório de Biocatálise e Síntese Orgânica, Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, CP 6154, CEP 13084-970, Campinas-SP, Brasil.

Palavras Chave: *Saccharomices cerevisiae*, α -tetralol, biocatálise, desracemização, excesso enantiomérico, pré-incubação.

Introdução

Produzir compostos enantiomericamente puros é uma tarefa cada vez mais visada devido à grande utilidade destes, principalmente no ramo farmacêutico. Este trabalho traz o estudo da desracemização do α -tetralol via biocatálise operada por leveduras, que é um método eficiente, limpo e barato. Neste, serão comparados dois tipos do *Saccharomices cerevisiae* que são atualmente comercializados pela Sigma-Aldrich classificados como Tipo I e Tipo II.

Resultados e Discussão

A desracemização do α -tetralol, é feita utilizando-se Amberlite XAD-7 como suporte para o substrato e acetona como cetona de sacrifício num meio com 0,4 g do fermento de pão em 4mL de água destilada, fatores estes anteriormente otimizados. Os resultados são interpretados de acordo com o esquema ilustrado abaixo na Figura 1.

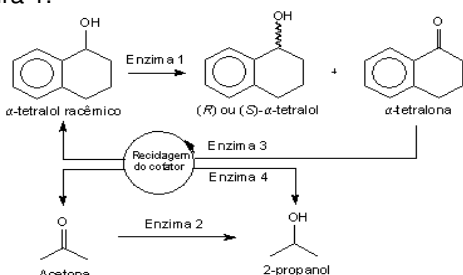


Figura 1. Visão geral do processo de desracemização do α -tetralol operado por levedura.

Entretanto, de acordo com os resultados, a redução da α -tetralona não é observada no sistema estudado.

O fermento do Tipo I foi inicialmente testado sem o tempo de pré-incubação, sendo obtidos os resultados apresentados na Tabela 1 abaixo:

Tabela 1. *Saccharomices cerevisiae* Tipo I sem pré-incubação.

Tempo de reação	(<i>S</i>)- α -tetralol (%)	(<i>R</i>)- α -tetralol (%)	α -tetralona (%)	ee (%)
24 h	47,6	44,8	7,6	(<i>S</i>) 3,0

Reação a 180 rpm e 30°C.

Após resultado obtido acima, a reação com este fermento foi feita deixando inicialmente em dois dias de pré-incubação antes de colocar o substrato e a acetona no meio. Sendo assim, os resultados apresentados na tabela dois foram obtidos:

Tabela 2. *Saccharomices cerevisiae* Tipo I com pré-incubação de dois dias.

Tempo de reação	(<i>S</i>)- α -tetralol (%)	(<i>R</i>)- α -tetralol (%)	α -tetralona (%)	ee (%)
24 h	7,9	48,9	43,2	(<i>R</i>) 72,2
48 h	---	44,9	55,1	(<i>R</i>) > 99

Reação a 180 rpm e 30°C

Utilizando resultados encontrados em reações anteriormente realizadas com o fermento de pão do Tipo II, a comparação apresentada na Tabela 3 pode ser feita.

Tabela 3. Comparação entre resultados de excesso enantiomérico (ee) obtidos para o *Saccharomices cerevisiae* Tipo II e Tipo I.

Tempo de reação	Fermento Tipo II	Fermento Tipo I
	ee (%)	ee (%)
1 dia	(<i>R</i>) 1,8	(<i>R</i>) 72,2
2 dias	(<i>R</i>) 0,6	(<i>R</i>) > 99
5 dias	(<i>S</i>) 76,4	---
6 dias	(<i>S</i>) > 99	---

Reação a 180 rpm e 30°C com 2 dias de pré-incubação.

Conclusões

A comparação entre a Tabela 1 e a Tabela 2 mostra a necessidade de deixar o microorganismo em pré-incubação antes da reação para a obtenção de resultados satisfatórios.

Como se pode ver na Tabela 3, a mudança do tipo do fermento acarreta tanto na diminuição de cerca de três vezes no tempo necessário para se obter excesso enantiomérico maior do que 99% quanto na inversão da antípoda obtida em grande excesso. Sendo que, para o Tipo II, em 6 dias, tem-se 25% do enantiômero (*S*) puro e 75% da cetona correspondente, enquanto que para o Tipo I, em apenas 2 dias, tem-se 45% do enantiômero (*R*) e 55% de cetona.

Agradecimentos

CNPq, SAE e Fapesp