

## Resolução cinética de ésteres derivados da acetofenona via hidrólise mediada por *Musa paradisiaca* L.

Luiz Arthur Zampieri<sup>1</sup> (PG)\*, Bruno R.S. de Paula (PG), Luciana Hinoue (PG), Tarcila Cazetta (PG), Dávila S. Zampieri<sup>1</sup> (PQ), Marcos C. Mattos<sup>2</sup> (PQ), Paulo J.S. Moran<sup>1</sup> (PQ), José Augusto R. Rodrigues<sup>1</sup> (PQ) \* arthur@iqm.unicamp.br

<sup>1</sup> LaBioSin - Laboratório de Biocatálise e Síntese Orgânica - Instituto de Química - UNICAMP, Campinas, Brasil.

<sup>2</sup> Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, CP 6021, CEP 60455-760, Fortaleza, Brasil.

Palavras Chave: hidrólise enzimática, resolução cinética, *Musa paradisiaca*

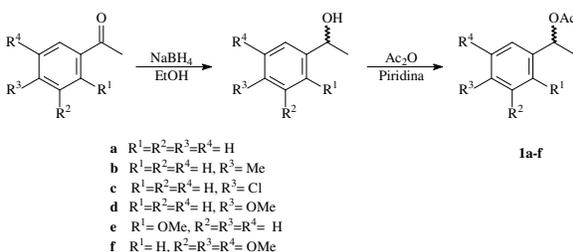
### Introdução

O uso de biocatalisadores em síntese orgânica vem sendo amplamente explorado nas últimas décadas.<sup>1</sup> Em particular, o uso de hidrolases é interessante devido à gama de substratos (naturais ou não) em cuja hidrólise podem ser aplicadas.<sup>1,2</sup>

Nesse trabalho, foi empregada *Musa paradisiaca* L. na resolução cinética de ésteres derivados da acetofenona por meio de hidrólise enzimática.

### Resultados e Discussão

Os ésteres **1a-f**, submetidos à reação de hidrólise mediada por *Musa paradisiaca* L. foram preparados por meio da redução da acetofenona e seus derivados com boridreto de sódio, seguida de acetilação com anidrido acético em piridina (Esquema 1).



#### Esquema 1

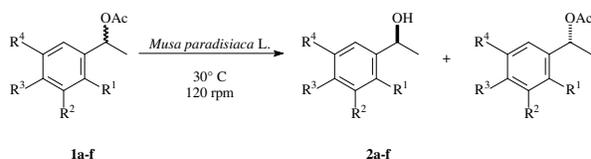
Em seguida, as reações de hidrólise foram feitas nas seguintes condições: 70 mL de solução tampão fosfato pH 7, 70 mg de substrato, 10 g de fruta, 30°C sob agitação de 120 rpm. Alíquotas periódicas foram retiradas da reação, sendo analisadas por CG/EM e CG/FID com coluna quiral para a determinação das conversões e excessos enantioméricos. Os melhores resultados foram obtidos para 4 horas de reação, sendo que para tempos superiores apenas o álcool **2** foi observado, com baixo excesso enantiomérico. Os resultados referentes a 4 horas podem ser vistos na Tabela 1.

Em particular, no caso de **1d**, observou-se um resultado atípico, uma vez que, apesar da conversão quase total, o álcool **2d** foi obtido com alto excesso enantiomérico. Isso pode ser devido a reações

34ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

paralelas, que levam à degradação de um ou mais compostos.

**Tabela 1.** Conversões e excessos enantioméricos das resoluções cinéticas dos compostos **1a-f** mediadas por *Musa paradisiaca* L.



- a R<sup>1</sup>=R<sup>2</sup>=R<sup>3</sup>=R<sup>4</sup>= H  
 b R<sup>1</sup>=R<sup>2</sup>=R<sup>4</sup>= H, R<sup>3</sup>= Me  
 c R<sup>1</sup>=R<sup>2</sup>=R<sup>4</sup>= H, R<sup>3</sup>= Cl  
 d R<sup>1</sup>=R<sup>2</sup>=R<sup>4</sup>= H, R<sup>3</sup>= OMe  
 e R<sup>1</sup>= OMe, R<sup>2</sup>=R<sup>3</sup>=R<sup>4</sup>= H  
 f R<sup>1</sup>= H, R<sup>2</sup>=R<sup>3</sup>=R<sup>4</sup>= OMe

Substrato	1		2	
	Conversão (%) <sup>a</sup>	e.e. (%) <sup>b</sup>	Conversão (%) <sup>a</sup>	e.e. (%) <sup>b</sup>
<b>1a</b>	44	60	56	31
<b>1b</b>	39	70	61	95
<b>1c</b>	19	47	81	13
<b>1d</b>	7	>99	93	87
<b>1e</b>	47	42	53	30
<b>1f</b>	43	0	57	35

<sup>a</sup> Determinadas pelas áreas relativas dos picos cromatográficos, por CG/EM.

<sup>b</sup> Determinados pelas áreas relativas dos picos cromatográficos, por CG/FID usando-se uma coluna quiral.

### Conclusões

Em geral, observou-se uma boa capacidade hidrolítica com relação aos substratos **1a-f**, com excessos enantioméricos de baixo a moderado. Em particular, no caso de **1d**, os valores atípicos podem ser racionalizados como resultado de reações paralelas.

### Agradecimentos

FAPESP, CNPq e FAEPEX-UNICAMP.

<sup>1</sup> *Biotransformation in Organic Chemistry*, Faber, K.; Eds.; Springer-Verlag: Berlin, 2000.

<sup>2</sup> Baumann, M., Hauer, B. H. and Bornscheuer, U. T. *Tetrahedron: asymmetry.*, **2000**, *11*, 4781.