

## Estudo das Condições de Síntese de Copolímeros de PCL e Isosorbídeo via Catálise Enzimática

Nathalia R. P. de Oliveira<sup>(1)</sup>(IC)\*, Alliny F. Naves<sup>(1)</sup> (PQ), Luiz Henrique Catalani<sup>(1)</sup> (PQ), [nathalia.oliveira.08@hotmail.com](mailto:nathalia.oliveira.08@hotmail.com)

<sup>(1)</sup> Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Av. Professor Lineu Prestes, 748 - 05508-900 - São Paulo – SP - Brasil

Palavras Chave: isosorbídeo, PCL, CAL-B, copolímeros.

### Introdução

A obtenção de copolímeros contendo segmentos rígidos e maleáveis fornece ao material caráter híbrido, tornando-o mais disponível para diferentes tipos de interações com outras interfaces. Esta característica possibilita sua utilização em diversas aplicações, como por exemplo, em biomateriais<sup>1,2</sup>.

Neste trabalho foi realizada a copolimerização de poli( $\epsilon$ -caprolactona) (PCL) com poliésteres derivados de isosorbídeo, catalisada pela enzima CALB em diferentes condições. O uso da CALB encontra o compromisso ideal entre altos rendimentos de reação e obtenção de produtos atóxicos devido a propriedades intrínsecas destas enzimas.

### Resultados e Discussão

A enzima CAL-B foi utilizada como catalisador da síntese de copolímeros a partir de poli(adipato de isosorbila) (PAIS) ou poli(sebacato de isosorbila) (PSIS) com PCL, conduzida a 85-95°C, durante 4 ou 7 dias. Diferentes quantidades de CAL-B (50% e 5% m/m) e composições dos solventes (Tabela 1) foram utilizadas para o estudo da síntese em questão. O nível do solvente foi mantido constante até o final da reação. Inicialmente, o PCL foi solubilizado em clorofórmio para facilitar a miscibilidade entre os reagentes, nas proporções de 1:1 (PCL:derivados de isosorbídeo). Com os copoliésteres purificados obteve-se os valores da massa molar ponderal média ( $M_w$ ) e de polidispersidade (PDI) (Tabela 1) por meio de cromatografia por permeação em gel (GPC)

Utilizando-se CAL-B 5% m/m, com os derivados de adipato ou sebacato de isosorbila, a síntese originou copolímeros de  $M_w$  intermediários entre os materiais de partida (Tabela 1). Nota-se que, com o aumento da quantidade para 50% m/m, os valores de  $M_w$  diminuíram consideravelmente, enquanto os valores de polidispersidade aumentaram ligeiramente. Esta evidência é decorrente de um processo de copolimerização mais eficiente, e tais observações mais pronunciadas nos derivados de sebacato. Já comparando-se a composição do solvente, nota-se que as reações onde foi utilizado apenas ciclohexano resultaram em maiores valores de  $M_w$ , confirmando que este é um melhor solvente para a

copolimerização e que possivelmente origina copolímeros em bloco com uma miscibilidade maior entre os blocos de PCL e derivados de isosorbídeo.

**Tabela 1.** Dados de  $M_w$  e PDI obtidos para os copoliésteres de PCL.

\* sínteses dos derivados 4 realizadas durante 7 dias. A % CALB é dada por massa de CALB/ massa total de poliésteres.

Amostra	Solvente	%CALB (m/m)*	$M_w$ (g/mol)	PDI
PCL <sup>(a)</sup>			82.480	1,2
PADIS <sup>(a)</sup>			38.400	1,6
PSEIS <sup>(a)</sup>			46.800	1,3
PCL-b-PAIS 1	CHx:tol	5	37.410	1,5
PCL-b-PAIS 2	CHx	5	47.100	1,5
PCL-b-PAIS 3	CHx	50	10.730	2,0
PCL-b-PAIS 4*	Tol	50	23.449	1,8
PCL-b-PSIS 1	CHx:tol	5	56.430	1,9
PCL-b-PSIS 2	CHx	5	64.150	1,3
PCL-b-PSIS 3	Tol	50	6.420	2,6
PCL-b-PSIS 4*	CHx	50	4.370	2,7

### Conclusões

Com base nos resultados obtidos pode-se concluir que o uso da CALB permitiu a produção de copolímeros em bloco contendo PCL, poliéster biodegradável, e derivados de isosorbídeo, resultando em materiais com as características híbridas desejadas. O estudo em questão ainda permitiu a identificação das melhores condições de sínteses apresentadas acima. A caracterização destes materiais está sendo complementada por análises de  $H^1$  e  $C^{13}$  RMNH, MALDI-TOF/MS e DSC. Além disso, outras condições de síntese estão sendo estudadas, como por exemplo, a utilização de  $CO_2$  supercrítico.

### Agradecimentos

À FAPESP e ao CNPq

<sup>1</sup> Dai, S., Xue, L., Zinn, M., Li, Z. Biomacromolecules 2009, 10, 3176-

<sup>2</sup> Juais, D., Naves, A. F., Li, C., Gross, R. A., Catalani, L.H., Macromolecules 2010, 43, 10.315-10.319.