

Resolução cinética da (\pm)-2,2,2-trifluor-1-feniletanol por lipase de *Candida antarctica*

Sandra S. Ribeiro¹ (PG)*, André L. M. Porto¹ (PQ)

Instituto de Química de São Carlos¹, Universidade de São Paulo, Av. Trabalhador São-carlense, 400, 13560-970, São Carlos, SP, Brazil, e-mail: sandrinhasr@iqsc.usp.br

Palavras Chave: Resolução cinética, trifluor-cetona, irradiação microondas.

Introdução

Compostos organofluorados apresentam grande atividade biológica, além de serem precursores na síntese de inseticidas e fármacos^{1,2}. As estruturas, modos de ação e síntese de produtos farmacêuticos desta classe de compostos tem atraído grande atenção de pesquisadores². Esse trabalho teve como objetivo investigar a resolução cinética da (\pm)-2,2,2-trifluor-1-feniletanol (**1**) usando a lipase de *Candida antarctica* frente a irradiação microondas e em condições convencionais.

Resultados e Discussão

A resolução cinética da (\pm)-2,2,2-trifluor-1-feniletanol (**1**) foi realizada sob três condições: (a) por irradiação microondas; (b) por agitador orbital; (c) em banho de óleo com agitação magnética. Em todas as condições adicionaram-se a lipase de *C. antarctica* (160 mg), 2,2,2-trifluor-1-feniletanol (40 μ L, 0,292 mmol), tolueno (10 mL) e acetato de vinila (500 μ L). As reações foram conduzidas em reator microondas (Discover, CEM em diferentes intervalos de tempo na temperatura de 35°C e potência máxima de 200 W). As reações em agitador orbital foram realizadas a 27°C e 130 rpm. Em banho de óleo as reações foram realizadas à temperatura de 35°C. O progresso das reações foi monitorado coletando-se as amostras (20 μ L) em diferentes intervalos de tempo e em seguida diluídas com acetato de etila (1,5 mL) e analisadas em CG-FID com coluna capilar de fase estacionária quiral. Os resultados estão resumidos na tabela 1.

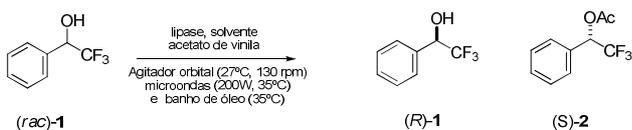


Figura 1. Resolução enzimática da (\pm)-2,2,2-trifluor-1-feniletanol.

Tabela 1. Resolução cinética da (\pm)-2,2,2-trifluor-1-feniletanol (**1**) com lipase de *C. antarctica* sob diferentes condições.

Tempo (h)	c (%) 1	c (%) 2
Irradiação microondas		
1	100	-
2	97	3
4	96	4
5	94	6
Agitador Orbital		
2	100	-
4	100	-
24	87	13
48	75	24
72	67	33
Banho de Óleo		
2	100	-
4	95	5
24	86	14
48	79	21

De acordo com os dados da tabela 1 pode-se observar que em geral ocorreram baixas conversões das reações ($c < 33\%$) para todas as condições avaliadas. Em agitador orbital e banho de óleo os resultados foram similares com conversões de 21 e 24% após 48 h, respectivamente. Sob irradiação microondas não ocorreu conversões significativas. Os compostos foram identificados por CG-EM e CG-FID pelas injeções dos padrões.

Conclusões

A resolução cinética da (\pm)-2,2,2-trifluor-1-feniletanol (**1**) pela lipase *Candida antarctica* foi verificada, porém com baixa conversão para as três técnicas utilizadas.

Agradecimentos

À FAPESP, CNPq e a Novo Nordisk pela doação da enzima CALB (Novozym 435®).

¹ Nenajdenko, V. G.; Konstantin, I. S.; Balenkova, E. S., *Tetrahedron: Asymmetry* **2001**, 12, 1259.

² Hagan, D. O.; *J. Fluor. Chem.* **2010**, 131, 11, 1071.