

Desracemização de 1-feniletanol catalisada por *Candida albicans*

Fábio D. Nasário¹(PG)*, Tarcila Cazetta¹(PG), J. Augusto R. Rodrigues¹(PQ), Paulo J. S. Moran¹(PQ)

¹Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), 13083-970 Campinas, SP, Brasil.

*fabio.nasario@iqm.unicamp.br

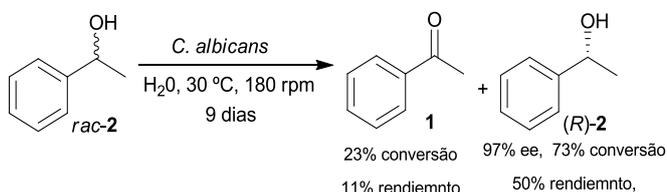
Palavras Chave: Desracemização, álcoois secundários, biocatálise, oxidação, redução.

Introdução

A desracemização foi um processo fundamental no estabelecimento da vida e trata-se de uma metodologia verde que atende aos princípios de sustentabilidade ambiental e que apresenta um baixo fator ambiental E¹. O método apresenta também 100% de economia de átomos, o que não ocorre com a maioria dos procedimentos químicos para obtenção de compostos quirais.

Resultados e Discussão

A partir da desracemização de *rac*-1-feniletanol (**2**) (200 mg) catalisada pela levedura *C. albicans* (CCT 5847) foi obtido o (*R*)-**2** (100 mg) ($[\alpha]_D^{20} = +55^\circ$, lit. $[\alpha]_D^{20} = +58^\circ$)² e acetofenona (24 mg) como apresentado no esquema 1.



Esquema 1

Para compreender o mecanismo reacional foi estudada a redução de **1** nas mesmas condições reacionais (Figura 1).

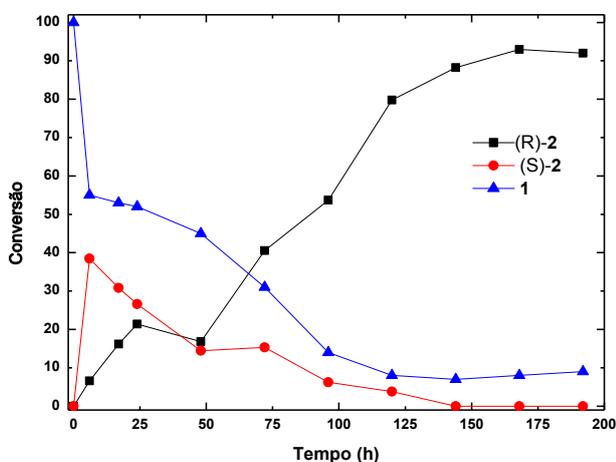
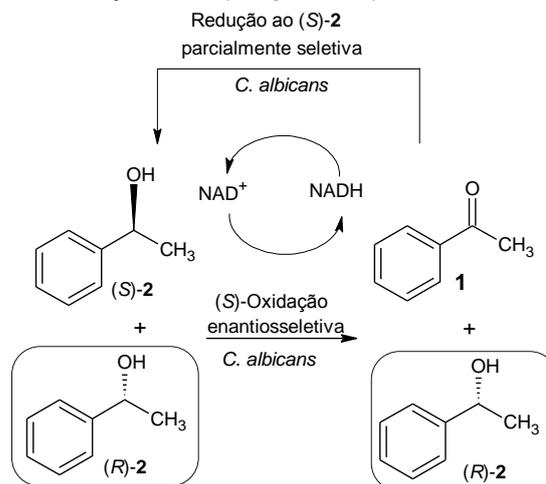


Figura 1. Estudo da redução de acetofenona catalisada por *C. albicans*.

Observou-se que a redução da acetofenona catalisada por *C. albicans* apresentou baixa seletividade formando ambos enantiômeros, predominando o (*S*)-**2** durante as primeiras horas reacionais, todavia, (*S*)-**2** formado foi oxidado totalmente para acetofenona esta reduzida para (*R*)-**2**. Ao final de 8 dias detectou-se (*R*)-**2** ee>99% com 92% de conversão. Baseado nos resultados apresentados pode-se propor o mecanismo da desracemização de **2** (Esquema 2).



Esquema 2

Nesse mecanismo, partindo-se do *rac*-**2**, ocorre uma oxidação enantiospecífica do (*S*)-**2** para acetofenona e esta, após vários ciclos de redução e oxidação, forma preferencialmente (*R*)-**2**.

Conclusões

Com a metodologia desenvolvida efetuou-se a desracemização de 1-feniletanol empregando-se um único microrganismo, *C. albicans*, obtendo-se (*R*)-1-feniletanol com 73% de conversão e 97% ee.

Agradecimentos

Ao CNPq e FAPESP (Processo 2011/51861-0)

¹ Sheldon, R. A. *Chem. Soc. Rev.* **2012**, 41, 1437.

²Nakamura, K.; Inoue, Y.; Matsuda, T.; Ohno, A. *Tetrahedron Lett.* **1995**, 36, 6263.