

Obtenção de 1,2-dióis enantiomericamente puros por desracemização, empregando um único microrganismo

Tarcila Cazetta (PG)*, Fábio D. Nasário (PG), Paulo J. S. Moran (PQ), J. Augusto R. Rodrigues (PQ)

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

tarcila.cazetta@iqm.unicamp.br

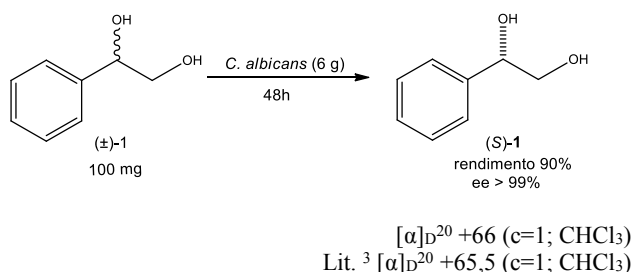
Palavras Chave: Desracemização, Estereoinversão, Biocatálise, *Candida albicans*.

Introdução

A utilização de células de microrganismos bem como de enzimas isoladas é uma ferramenta bastante reconhecida para o preparo de álcoois secundários quirais, importantes blocos construtores para a indústria farmacêutica.¹ Processos de desracemização utilizando um único microrganismo permitem a obtenção de apenas um dos enantiômeros de um determinado composto a partir de uma mistura racêmica, sem a necessidade de adição de cofatores NAD(P)H ou NAD(P)⁺, ou mesmo de agentes externos a fim de promover a regeneração de cofatores.²

Resultados e Discussão

A levedura *Candida albicans* CCT 5847 foi empregada no preparo do (S)-1-fenil-1,2-etanodiol (S)-1 a partir de uma mistura racêmica (Esquema 1).



Esquema 1

Não foi possível separar os dois enantiômeros do 1-fenil-1,2-etanodiol (1) utilizando as colunas cromatográficas disponíveis no laboratório, de modo que o progresso da reação foi acompanhado no polarímetro (Figura 1).

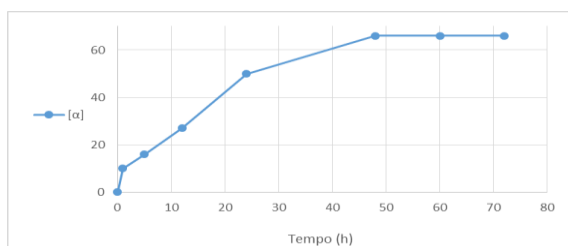


Figura 1. Acompanhamento da desracemização de (±)-1-fenil-1,2-etanodiol (1) pela medida de rotação óptica.

37ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Aumentou-se a escala para 500 mg de material de partida e foram isolados 400 mg de (S)-1 (80% de rendimento), com ee > 99%.

Diante dos excelentes resultados observados, substratos análogos à 1, contendo substituintes no anel aromático também foram testados, nas mesmas condições de reação.

Tabela 1. Álcoois secundários obtidos por desracemização com a levedura *C. albicans*.

| | Tempo (h) | ee (%) | Rendimento (%) |
|--|-----------|--------|----------------|
| | 72 | >99 | 71 |
| | 72 | >99 | 60 |
| | 26 | >99 | 69 |

Os rendimentos isolados apresentados na Tabela 1 foram apenas razoáveis pois, além dos álcoois, as respectivas cetonas também foram obtidas. Dentre os compostos preparados, (S)-3 foi obtido com o menor valor de rendimento, provavelmente devido à natureza fortemente doadora de elétrons do grupo metoxi, na posição para do anel aromático.

Conclusões

O emprego da levedura *C. albicans* permitiu o preparo de álcoois secundários com rendimentos razoáveis e excelentes excessos enantioméricos por um processo de desracemização por estereoinversão, utilizando um único micro-organismo como catalisador.

Agradecimentos

À FAPESP (Processo 2011/51861-0 e 2010/51711-6) pelo apoio financeiro.

¹ Paul, C. E.; Lavandera, I.; Fernández, V. G.; Kroutil, W.; Gotor, V. *ChemCatChem* **2013**, *5*, 3875-3881.

² Gruber, C. C.; Lavandera, I.; Faber, K.; Kroutil, W. *Adv. Synth. Catal.* **2006**, *348*, 1789 – 1805.

³ Cross, D. J.; Kenny, J. A.; Houson, I.; Campbell, L.; Walsgrove, T.; Wills, M. *Tetrahedron: Asymmetry* **2001**, *12*, 1801.