

Resolução cinética dinâmica do 1-feniletanol em fluxo contínuo utilizando lipase de *Candida antarctica* associada ao VOSO₄.

Amanda S. de Miranda¹(PG), Marcus V. M. Silva¹(PG), Stefania P. de Souza¹(PQ), Leandro S. M. Miranda¹(PQ), Rodrigo O. M. A. de Souza¹(PQ)*

¹BOSS Group, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro.

marcus.mattos@iq.ufrj.br

Palavras Chave: Lipases, Cal B, Fluxo contínuo, 1-feniletanol, Resolução dinâmica, VOSO₄

Abstract

Dynamic kinetic resolution of 1-phenylethanol in continuous flow using lipase from *Candida antarctica* associated with the VOSO₄.

Dynamic kinetic resolution of 1-phenylethanol was studied with the use of a continuous flow system with Novozymes 435 and VOSO₄.

Introdução

Álcoois enantiomericamente puros e seus ésteres são componentes chave para a síntese assimétrica. Uma via atrativa para a sua preparação é a resolução cinética dinâmica (DKR), que combina a resolução cinética com a racemização. Algumas resoluções cinéticas podem ser catalisadas por enzimas, a partir de uma mistura racêmica de álcoois. Já a racemização que pode ser associada in situ, ocorre com o enantiômero de reação lenta. Geralmente, a racemização requer condições térmicas ou fortemente ácidas ou básicas que são incompatíveis com uma estereo-transformação em um só recipiente ou em processos contínuos. Por outro lado, diversos complexos de metais de transição como o ródio, rutênio e irídio são conhecidos para catalisar a racemização de álcoois opticamente ativos em condições mais brandas¹. Em 2007 Wuyts e colaboradores estudaram a utilização de compostos de vanádio na racemização de diferentes álcoois secundários, demonstrando a possibilidade da racemização dos mesmos. Sendo assim, a proposta desse trabalho é a utilização do processo de fluxo contínuo para realizar a resolução cinética dinâmica do 1-feniletanol utilizando um leito fixo misto com camadas de Novozymes 435 e VOSO₄.

Resultados e Discussão

Para realizar a reação, foram montadas duas colunas de leito fixo com camadas de 0,5g de Novozymes 435 e de VOSO₄, sendo separadas por uma fina camada de algodão hidrofílico. A solução de reação foi preparada com o 1-feniletanol e como doador de acila foi utilizado o decanoato de etila (1:2), sendo o solvente utilizado o tolueno. A reação foi realizada a 70°C e o sistema foi descrito na figura 1.

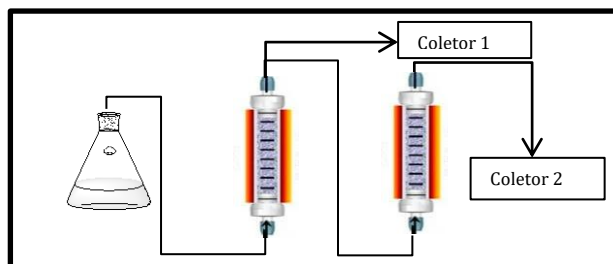


Figura 1. Esquema da reação em fluxo contínuo

As amostras foram coletadas após a passagem pelas colunas e foram analisadas em CG-MS para verificação da conversão em cada caso. Os resultados foram mostrados na tabela 1.

Tabela 1. Valores de conversão com diferentes vazões.

Nº de colunas	Vazão(mL/min)	Conversão(%)
2	0,1	80
2	0,3	84
2	0,5	--
1	0,1	79
1	0,3	88
1	0,5	81

Como foi possível verificar o ganho na utilização de duas colunas para a conversão foi praticamente nulo. Sendo assim optou-se por continuar os estudos com a utilização de apenas uma coluna de leito misto.

As perspectivas futuras do trabalho é a análise do excesso enantiomérico (e.e.) e a Razão enantiomérica (*E*) das reações realizadas. Sendo também previsto a utilização de um leito misto, porém não divididos em camadas e a utilização de outros solventes e doadores de acila.

Conclusões

Foi possível verificar que a utilização da segunda coluna não adicionou grandes ganhos na conversão. Foi possível verificar também que a resolução cinética dinâmica ocorreu, pois a conversão foi superior a 50%.

Agradecimentos

Capes, CNPQ, FAPERJ, Finep PGQu UFRJ

¹ Wuyts, S.; Wahlen, J.; Jacobs, P. a.; De Vos, D. E. Green Chem. 2007, 9, 1104.