

# Desracemização do $\alpha$ -tetralol via biocatálise extrativa com células íntegras

Bruna N. Rodrigues (IC), Dávila S. Zampieri (PG), Paulo José S. Moran (PQ), José Augusto R. Rodrigues\* (PQ).  
\*jaugusto@iqm.unicamp.br

LabioSin – Laboratório de Biocatálise e Síntese Orgânica, Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, CP 6154, CEP 13084-970, Campinas-SP, Brasil.

Palavras Chave: Biocatálise,  $\alpha$ -tetralol, desracemização, excesso enantiomérico, suporte, cofator.

## INTRODUÇÃO

Este resumo apresenta o estudo da desracemização do  $\alpha$ -tetralol utilizando células íntegras, testando diferentes parâmetros para a otimização do processo.

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

O composto estudado teve sua bioxidação mediada pelo *Saccharomyces cerevisiae*, visando diferentes cetona de sacrifício (para regeneração do cofator) e suportes para o analito, bem como a variação do tempo de pré-incubação do microorganismo e sua quantidade.

O esquema abaixo exemplifica os processos realizados e as tabelas 1-4 mostram os resultados obtidos para a resolução do  $\alpha$ -tetralol.

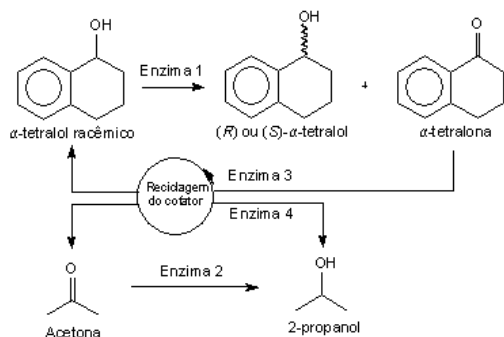


Figura 1. Visão geral do processo de desracemização do  $\alpha$ -tetralol operado por levedura.

Tabela 1. Variação do tempo de pré-incubação do fermento.

Tempo de pré-incubação	ee (R)
sem pré-incubação	0,8%
1 dia	1,0%
2 dias	7,9%
3 dias	2,0%

Reação por 24 h à 180 rpm e 30°C com 2 g de ferm. para 10 mg de substrato, com Amb. como suporte e Ac como cetona de sacrifício.

Tabela 2. Variação da quantidade de fermento empregada para a reação.

Quantidade de fermento	0,2 g	0,5 g	1,0 g	2,0 g
ee (R)	(S) 37%	5,0%	1,6%	7,9%

Reação por 24 h à 180 rpm e 30°C com 2 dias de pré-inc e 10 mg de substrato, com Amb. como suporte e Ac como cetona de sacrifício.

Tabela 3. Testes para o suporte e para a cetona de sacrifício (sem cetona, com AcMe ou com Ac).

	Sem cetona	Com AcMe	Com Ac
	Sem suporte		
ee (R)	6,9%	0,7%	7,8%
Com Amberlite (XAD-7)			
ee (R)	3,1%	0,6%	7,9%
Com papel de filtro			
ee (R)	1,4%	0,2%	1,4%

Reação por 24 h à 180 rpm e 30°C com 2 dias de pré-inc e 2 g de ferm para 10 mg de substrato.

Tabela 4. Variação do tempo de reação.

Tempo de reação	(S)- $\alpha$ -tetralol	(R)- $\alpha$ -tetralol	$\alpha$ -tetralona	ee (%)
18 h	41,8%	47,8%	10,3%	(R) 6,8
24 h	47,4%	49,1%	3,5%	(R) 1,8
32 h	45,3%	49,7%	5,0%	(R) 4,6
36 h	49,1%	50,9%	0,0%	(R) 1,8
46 h	43,9%	48,1%	8,0%	(R) 4,6
52 h	40,4%	29,1%	30,5%	(S) 16,2
120 h	37,8%	5,0%	57,2%	(S) 76,4
144 h	25,0%	0,0%	75,0%	(S) >99
168 h	22,6%	0,0%	77,4%	(S) >99

Reação à 180 rpm e 30°C com 0,4g de ferm., 2 dias de pré-inc, 20mg de substrato, suporte Amb. e Ac como cetona de sacrifício

Síglas utilizadas: AcMe: Acetoacetato de metila; Ac: Acetona; ferm.: fermento liofilizado; Amb.: Amberlite (XAD-7); pré-inc: pré-incubação

## CONCLUSÕES

Com os resultados obtidos, vê-se que as condições ideais para o processo estudado encontram-se nas reações utilizando-se Amberlite (XAD-7) como suporte e acetona como cetona de sacrifício com tempo de 2 dias de pré-incubação. Por análises posteriores, admitiu-se como quantidade ideal de ferm. 0,4 g para 20 mg de substrato.

Para estas condições, chegou-se a 99% de ee do enantiômero S, contudo, com baixos rendimentos. A combinação da metodologia utilizada com diferentes formas de redução, enantiosseletivas ou não, pode levar a maiores rendimentos e alto grau de pureza ótica.

## AGRADECIMENTOS

CNPq, SAE e Fapesp

Bisogno, F. R.; Lavandera, I; Kroutil, W.; Gotor, V. J. Org. Chem. 2009, 74,1730.