

Azevedo, L. F. L.; de Paula, B. R. S.; Moran, P. J. S.
 Instituto de Química – Unicamp
 Agências financiadoras: SAE - UNICAMP

Palavras chave: Biotatalise, Líquido iônico, α -alquil- β -cetoésteres, (E)-2-benzilidenociclohexanona

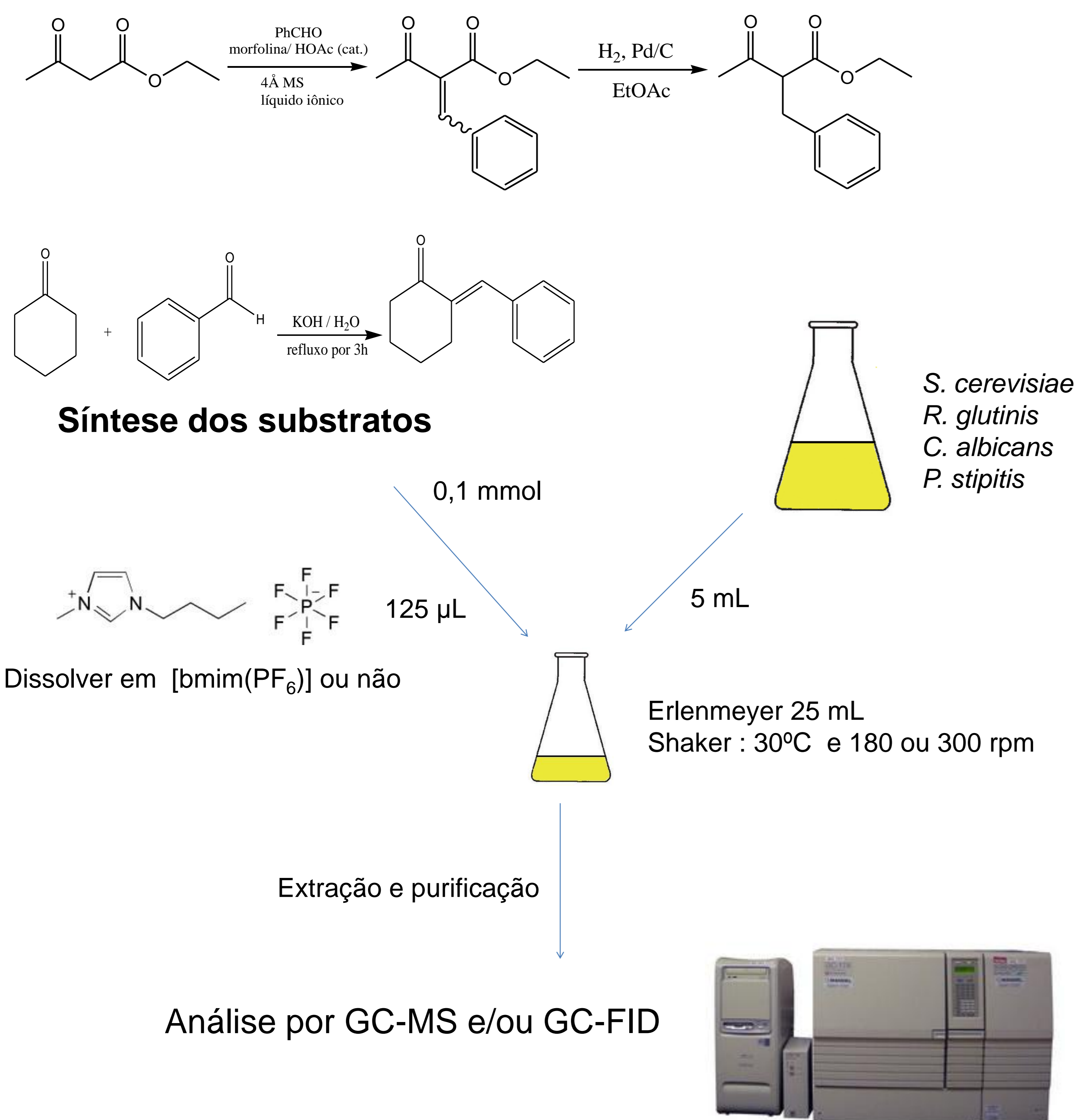
Introdução

Reações para obtenção de substâncias diastereo e enantiomericamente puras estão sendo cada vez mais estudadas. Sua importância se deve ao fato de que muitas substâncias possuem centros assimétricos e muitas vezes seus diferentes isômeros óticos possuem atividades diferentes, por exemplo, no caso de um fármaco, um enantiômero pode ter a ação desejada e o outro não. Deste modo é interessante para química orgânica estudar meios de conseguir *building blocks* enantiomericamente puros para síntese orgânica. Um desses meios é a biocatálise.

Objetivos

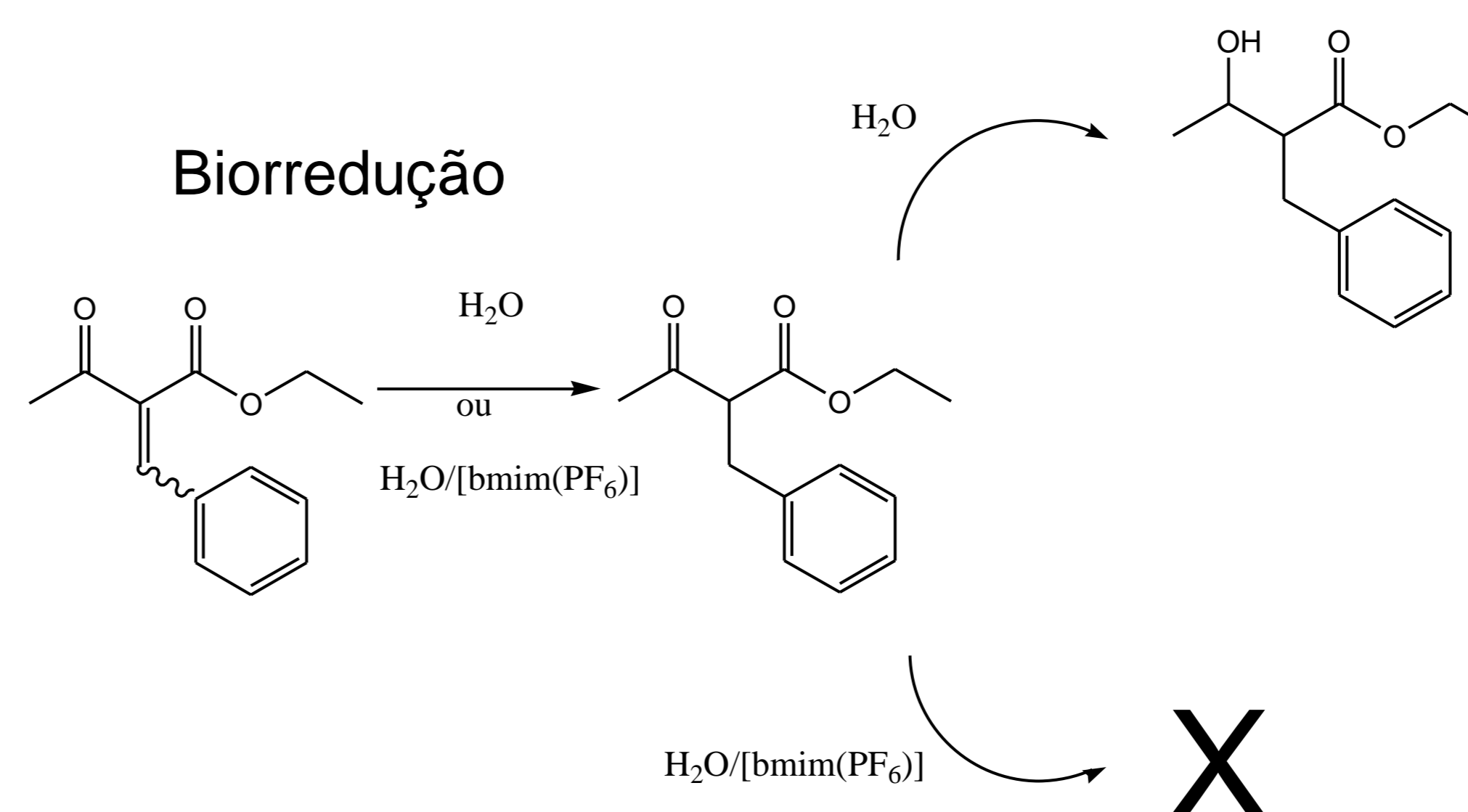
Estudar a quimiosseletividade, diastereosseletividade e enantiosseletividade da biorredução de α -alquil- β -cetoésteres e ciclohexanona α -substituída, intermediada por leveduras.

Metodologia

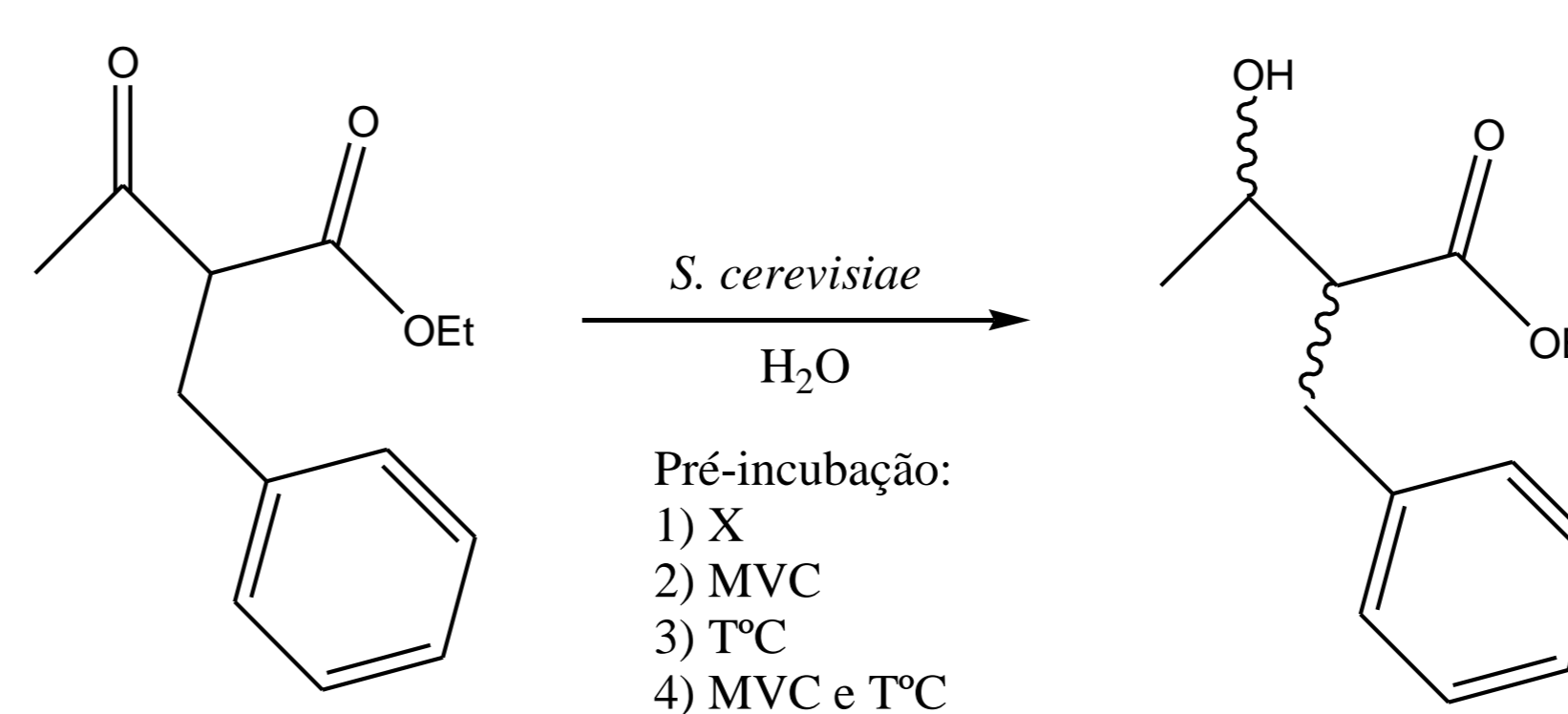


Resultados e Discussão

2-benzilideno-3-oxobutanoato de etila



2-benzil-3-oxobutanoato de etila



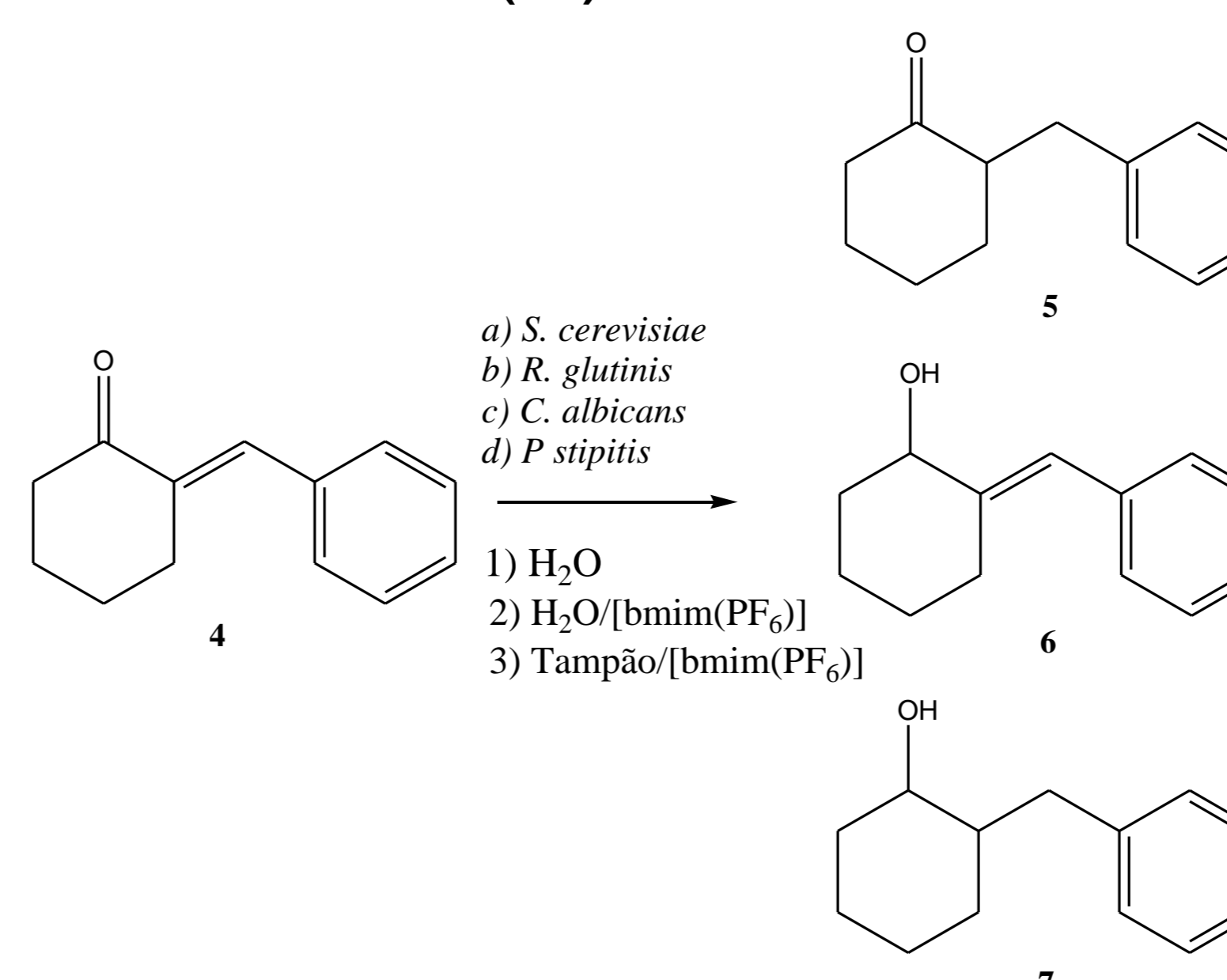
Tempo (h)	Conversão (%)	Razão Syn/Anti
6	67,76	38,4/61,6
24	78,23	40,8/59,2
48	92,83	37,9/62,1
72	89,74	37,8/62,2

Concentração de MVC (mM)	Conversão (%)	Razão Syn/Anti
0	68,76	30,8/69,2
60	64,72	33,9/66,1
80	77,07	36,3/63,7
100	73,36	41,6/58,4

Temperatura de incubação (°C)	Conversão (%)	Razão Syn/Anti
40	81,5	38,9/61,1
45	65,9	41,1/58,9
50	0	0
55	0	0

4 Conversão: 49,87% | Razão Syn/Anti: 44,3/55,7

(E)-2-benzilidenociclohexanona



- a-1) Formação de todos os produtos
- a-2) Sem formação de 7 | e.e.: 8%
- a-3) pH 5: L.I. degradado | pH 7: e.e.: 5%
- b-2) Bom rendimento | e.e.: 34,1%
- c-2) Bom rendimento | e.e.: 2,4%
- d-2) Rendimento muito baixo

Conclusão

Em geral as biorreduções realizadas em sistema bifásico água/líquido iônico melhoraram a quimiosseletividade.
 2-benzilideno-3-oxobutanoato de etila \rightarrow quimiosseletiva em sistema bifásico;
 2-benzil-3-oxobutanoato de etila \rightarrow conversão: 49% a 93%
 razão Syn/Anti: 30/70 a 44/56;
 (E)-2-benzilidenociclohexanona \rightarrow e.e.: 5% a 34,1%.

Agradecimentos