

Desracemização por Estereoinversão com um Único Microorganismo.

Henrique C. de A. Venturelli (IC), Fábio D. Nasário (PG), J. Augusto R. Rodrigues (PQ), Paulo J. S. Moran (PQ).

Resumo

Desracemização por estereoinversão enantiosseletiva, empregando um único biocatalisador (microorganismo), de derivados do álcool secundário α -clorofeniletanol.

Palavras Chave: Desracemização, Estereoinversão, álcoois quirais.

Introdução

A desracemização de álcoois secundários através da estereoinversão enantiosseletiva de um enantiômero fornece o seu antípoda como único produto.¹ Todos os processos de estereoinversão descritos até o momento envolvem biocatalisadores.²

Neste estudo, sintetizaram-se derivados do álcool α -clorofeniletanol, com o objetivo de verificar o efeito da substituição do grupo Cl por outros retiradores de elétrons (azido e ciano) no processo de desracemização com um único microorganismo.

Resultados e Discussão

Os álcoois racêmicos 2-azido-1-feniletanol (**1**) e 2-ciano-1-feniletanol (**2**) foram sintetizados por meio da redução das cetonas α -azidoacetofenona (**3**) e 3-fenil-3-oxopropionitrila (**4**), respectivamente.

Para sintetizar **1**, reduziu-se 437,7 mg de **3** com NaBH_4 à temperatura ambiente em 50 mL de etanol. A reação foi tratada com $\text{HCl}_{(\text{aq})}$ e $\text{NaHCO}_{3(\text{aq})}$, e extraiu-se esta com acetato de etila (3x25 mL).

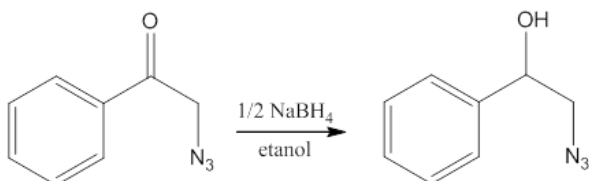


Figura 1. Síntese de 2-azido-1-feniletanol.

Similarmente ao método descrito para a síntese de **1**, o substrato **2** foi obtido a partir de 583 mg de **4** (em aproximadamente 150 mL de etanol).

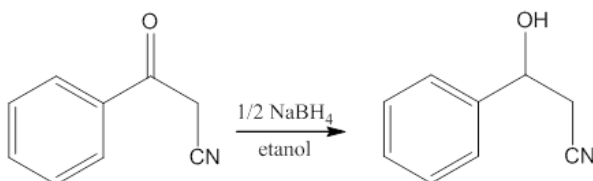


Figura 2. Síntese de 2-ciano-1-feniletanol.

50 mg de **1** e **2** foram postos a reagir com 3 g de *Candida Albicans* (CCT 5847) em 10 mL de água destilada. Esta biocatálise consiste em uma sequência de duas etapas redox, oxidação seguida de redução.

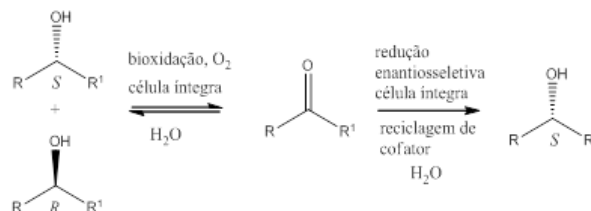


Figura 3. Esquema geral da desracemização por estereoinversão enantiosseletiva de um álcool racêmico.

As biocatálises de **1** e **2** foram acompanhadas em CG-EM e não se notou sucesso nessas sínteses. Acredita-se que isto se deve ao microorganismo não possuir enzima com sítio de ligação favorável aos álcoois em questão.

Conclusões

O microorganismo *C. Albicans* não é efetivo na desracemização dos álcoois racêmicos **3** e **4**. Assim sendo, é possível que os grupos retiradores de elétrons, como azido e ciano, dificultem o processo de biocatálise em estudo. Outras leveduras deverão ser estudadas para efetuar a transformação.

Agradecimentos

Ao CNPQ, ao PIBIC e ao Instituto de Química (UNICAMP).

¹Para uma revisão veja: Gruber, C. C.; Lavandera, I.; Faber, K.; Kroutil, W. *Adv. Synth. Catal.* **2006**, *348*, 1789.

²Schritwieser, J. H.; Sattler, J.; Resch, V.; Mutti, F. G.; Kroutil, W. *Curr. Opin. Chem. Biol.* **2011**, *15*, 249.