

Redução de cetonas pró quirais utilizando *Arracacia xanthorrhiza* (mandioquinha) como fonte de biocatalisador

Nicolly Kelly Ribeiro Souza

Lara Gimenez Borges

Leandro Helgueira de Andrade

Instituto de Química, Universidade de São Paulo

nicollysouza@usp.br

Objetivos

O projeto teve como objetivo central desenvolver uma metodologia para a redução de cetonas aromáticas a álcoois utilizando *Arracacia xanthorrhiza* como biocatalisador, comparando seu desempenho ao agente redutor NaBH_4 . Buscou-se verificar a eficiência da mandioquinha na conversão de cetonas pró-quirais, avaliando o rendimento e a seletividade enantiomérica dos produtos. A pesquisa também teve como meta comparar a abordagem biocatalítica com a química convencional, destacando vantagens e limitações de cada método. Outro objetivo importante foi caracterizar os compostos formados por meio de RMN (^1H e ^{13}C) e CG-EM, assegurando a confirmação estrutural e a pureza dos produtos. O estudo incluiu a proposta de otimização das condições experimentais para melhorar a conversão e a enantiosseletividade. Além disso, visou explorar o potencial da biocatálise vegetal como alternativa sustentável, alinhada aos princípios da química verde, reduzindo o uso de reagentes agressivos e favorecendo processos mais limpos.

Métodos e Procedimentos

Foram utilizadas vidrarias e equipamentos comuns de laboratório de química orgânica, reagentes da Sigma-Aldrich e solventes de grau analítico. A caracterização das reações foi realizada por CG-EM, CCD e RMN (^1H e ^{13}C), utilizando instrumentos adequados para cada técnica. Para a redução com NaBH_4 , dissolveu-se acetofenona em metanol, adicionou-se gradualmente o agente redutor sob resfriamento, e a mistura foi mantida à temperatura ambiente antes de extração e purificação. Na rota biocatalítica, a mandioquinha e a cenoura foram lavadas, fatiadas e incubadas em tampão fosfato (pH 7) com acetofenona sob agitação controlada por 24h, seguida de extração e análise por CG-EM.

Resultados

Nas reações com NaBH_4 , as três variantes de acetofenona foram reduzidas com altos rendimentos, todos com 92% e taxas de conversão satisfatórias, comprovadas por análises de RMN e CG-EM. A caracterização enantiomérica revelou diferenças de interação entre os enantiômeros e a fase estacionária quiral. Apesar disso, em algumas reações com o NaBH_4 , observaram-se impurezas e

subprodutos, sugerindo a necessidade de ajustes no método. Já no experimento com a mandioquinha como biocatalisador, não foi detectada conversão no tempo de reação aplicado, indicando que condições experimentais mais adequadas são necessárias para explorar seu potencial. Entretanto, o teste com a cenoura como biocatalisador resultou em uma conversão total (100%), confirmada por CG-MS.

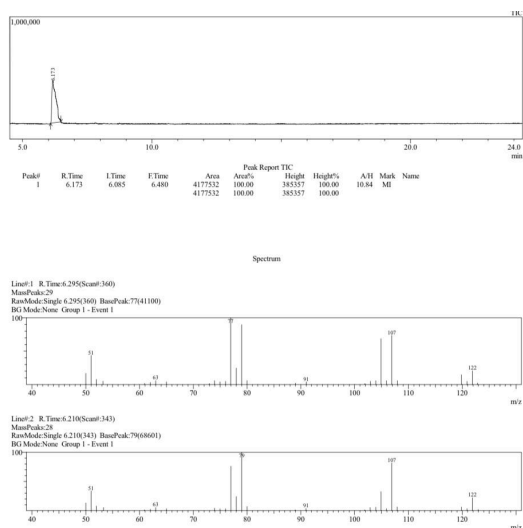


Figura 1: Cromatograma utilizando a cenoura como biocatalisador

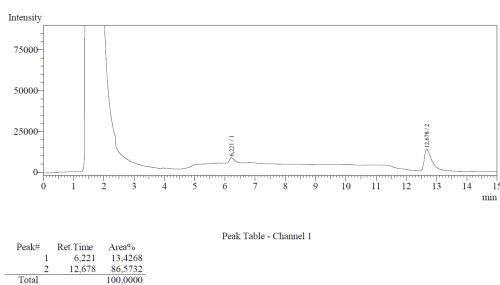


Figura 2: Cromatograma do álcool utilizando fase estacionária quiral de β -ciclodextrina.

O estudo revelou que o boroidreto de sódio (NaBH_4) foi altamente eficaz na redução de acetofenonas, entregando altos rendimentos e conversões e permitindo a análise enantiomérica dos produtos. No campo da biocatálise vegetal, a mandioquinha não demonstrou atividade no tempo testado. Em contraste, a cenoura se destacou ao exibir atividade catalítica e enantiosseletividade, produzindo predominantemente o isômero (S). Conclui-se, assim, que ajustes nas condições experimentais são cruciais para otimizar o potencial da biocatálise com vegetais, reforçando o foco em metodologias sustentáveis na síntese orgânica.

Agradecimentos

Agradeço ao Laboratório de Química Fina e Biocatálise pelo suporte técnico e científico durante o desenvolvimento deste trabalho. Sou grata ao Programa Unificado de Bolsas (PUB) pelo apoio financeiro.

Referências

- Alves LA et al. *Quim. Nova*, 38(4):483-487, 2015.
- Andrade LH et al. *J. Mol. Catal. B: Enzym.*, 38(2):84-90, 2006.
- Birilli WG et al. *Biotechnol. Adv.*, 33(5):481-510, 2015.
- Varadarajan S, Ladage S. *J. Chem. Educ.*, 101(8):3027-3038, 2024.
- Zeynizadeh B, Behyar T. *J. Braz. Chem. Soc.*, 16(6A):1200-1209, 2005.

Conclusões