



REAÇÃO DE IODAÇÃO DO INDOL BIOCATALISADA PELO SISTEMA REDOX LACASE-ABTS EMPREGANDO IODETO DE POTÁSSIO COMO FONTE DE IODO

PROBIC- FAPERGS

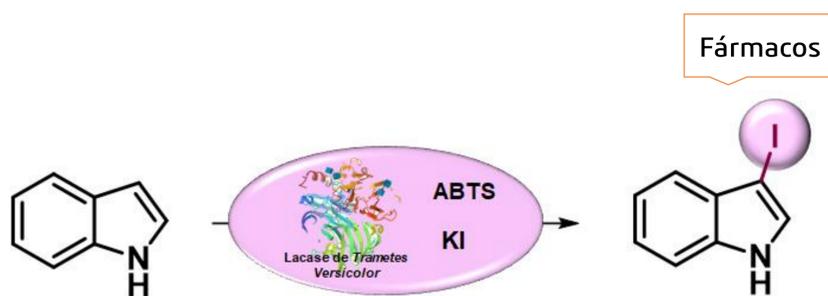
Bianca Stella Prigol (IC), Vinicius Bertoncello Molon (PG), Thiago Barcellos da Silva (PQ)

INTRODUÇÃO/OBJETIVOS

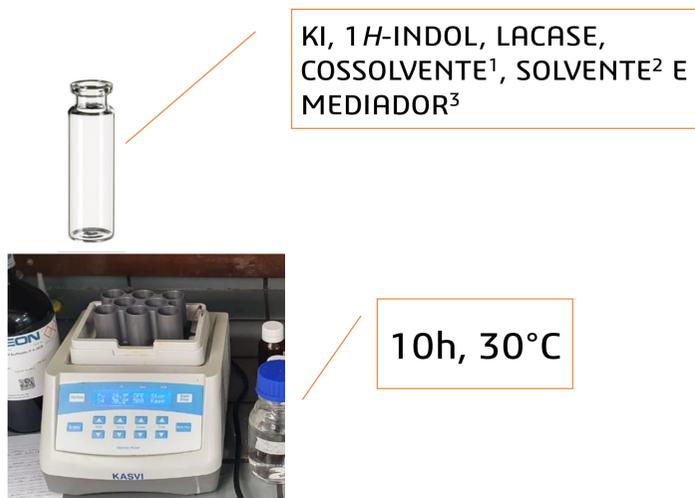
O 1*H*-indol é um composto aromático heterocíclico produzido por bactérias e fungos, que possui origem natural, tendo ele e seus derivados valia na química medicinal para tratamentos de câncer, HIV, malária, entre outros. Na obtenção de compostos derivados do 1*H*-indol, uma metodologia que atrai atenção é partindo de sua iodo-funcionalização, servindo de início para reações de acoplamento cruzado.

Lacases, por sua vez, surgem como uma alternativa por se destacarem como biocatalizadores para reações químicas mais eficientes.

Deste modo, o presente trabalho tem como objetivo iodo-funcionalizar o 1*H*-indol na posição C3 utilizando lacase de *Trametes versicolor*, o mediador ABTS e KI.



METODOLOGIA



¹ cossolventes: (DMSO, EtOAc, MeCN, Tolueno, DMF, i-PrOH, EtOH)

² solventes: tampão acetato (pH 3,6; 5; 5,6), citrato (pH 3; 5; 6,2) ou fosfato (pH 5,8; 7,4).

³ mediador: ABTS, TEMPO ou *ceto*-ABNO.

Os produtos obtidos foram analisados por GC-MS e RMN.

RESULTADOS

Após os testes de otimização, a reação que obteve melhor conversão e seletividade, superior a 99%, foi a utilizando cossolvente o EtOAc, tampão acetato pH 5,0, 0,1 mol.L⁻¹ e ABTS.

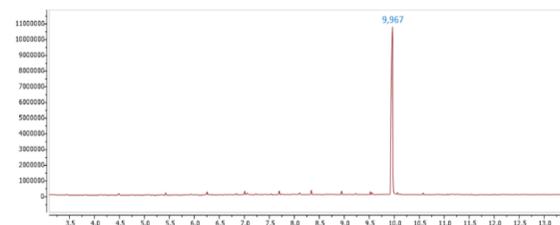


Figura 2: Cromatogramas obtidos por GC-MS da respectiva reação de iodação empregando o sistema redox lacase/ABTS.

Na figura 3 é representado o perfil de fragmentação do sinal obtido em tantos minutos pela cromatografia gasosa.

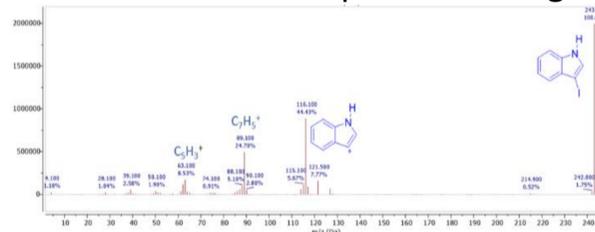


Figura 3: Espectro de massas obtido por GC-MS do 3-iodo1*H*-indol, obtido como produto da reação de iodação empregando o sistema redox lacase/ABTS

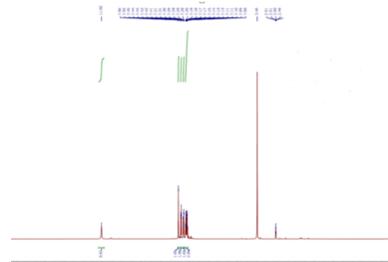


Figura 4: espectro de RMN de ¹H do 3-iodo-1*H*-indol

Na Figura 4 é representado o espectro de RMN de ¹H feito do extrato bruto logo após a extração da reação.

CONCLUSÃO

Analisando as metodologias empregadas e os resultados obtidos, conclui-se que a melhor condição reacional encontrada foi aquela em que foi empregado a solução tampão acetato (0,1 mol L⁻¹; pH 5,0) e EtOAc (10% v/v) como cossolvente, o mediador-redox ABTS (1 mol%) e 3,0 equivalentes de KI, obtendo conversão e seletividade superiores a 99%

ORDER, R. B. VAN; LINDWALL, H. G. Indole. Chemical Reviews, v. 30, n. 1, p.69–96, 1942.

RIVA, S.; MOLECOLARE, R.; BIANCO, V. M. Laccases : blue enzymes for green chemistry. v. 24, n. 5, 2006.

SDAHL, M.; BRAUNBERGER, C.; BEIFUSS, U. iodination of p -substituted phenols using KI as iodine source and aerial O₂ as oxidant. p. 19549–19559, 2019.