



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

Bianca Stella Prigol (PROBIC-FAPERGS), Vinicius Bertoncello Molon, Thiago Barcellos da Silva (Orientador(a))

O indol é um composto de origem natural o qual apresenta uma estrutura bicíclica constituída de um anel benzênico fundido a anel pirrólico. O indol é naturalmente produzido por bactérias e fungos, e está presente nas fezes humanas e apresenta um odor desagradável. Porém, em baixas concentrações apresenta um odor floral, e por isso é empregado na indústria de perfumaria. O indol faz parte da estrutura química de importantes moléculas naturais, como o aminoácido triptofano, o neurotransmissor serotonina e o hormônio melatonina. Além disso, o indol é um importante intermediário na química medicinal, na síntese de potenciais fármacos para tratamentos de câncer, HIV, malária, etc. As enzimas lacases, por sua vez, tem se destacado como um importante biocatalisador para reações químicas que não são naturais a estas enzimas, proporcionando o desenvolvimento de metodologias sintéticas que vão ao encontro dos princípios da química verde. Assim, neste trabalho foi avaliado o emprego de um sistema lacase-mediador redox para a reação de iodação do indol. O composto 3-iodo-1*H*-indol é um importante intermediário proporcionando a funcionalização da posição 3 e, portanto, a obtenção de compostos derivados do indol, principalmente a partir de reações de acoplamento cruzado. Inicialmente foi empregado a lacase comercial de *Trametes Versicolor* e iodeto de potássio como fonte de iodo. No processo de otimização das condições reacionais foram avaliados os meios reacionais constituído das soluções tampão acetato (pH 3,6; 5; 5,6), citrato (pH 3; 5; 6,2) ou fosfato (pH 5,8; 7,4), dos cossolventes (DMSO, EtOAc, MeCN, Tolueno, DMF, i-PrOH, EtOH) e dos mediadores ABTS, TEMPO ou *ceto*-ABNO. A melhor condição 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. Nestas condições, o indol foi convertido ao respectivo 3-iodo-1*H*-indol com 99% de conversão e seletividade após 10 horas de reação a temperatura de 30 °C. A metodologia desenvolvida neste trabalho é uma alternativa biocatalítica aos métodos conhecidos, que empregam condições como altas temperaturas, bases fortes ou catalisadores metálicos.

Palavras-chave: Indol, Iodação, Lacase

Apoio: UCS, FAPERGS