

TRABALHOS APRESENTADOS EM EVENTOS

SOUSA, R. R. et al. Síntese Enzimática do Caprilato de Octila em Sistema Livre de Solventes. In: ENCONTRO DA ESCOLA BRASILEIRA DE QUÍMICA VERDE, 7.; 2017, Rio de Janeiro. **Anais...** Rio de Janeiro: [s.n.], 2017. 1 p.

RESUMO: O éster caprilato de octila, sintetizado a partir do ácido caprílico e do octanol, pode ser utilizado como aromatizante e flavorizante na formulação de produtos para higiene pessoal, perfumaria, cosméticos, fármacos e alimentos. A esterificação de ácidos graxos por via enzimática, utilizando lipases, ocorre em condições brandas de reação, o que pode simplificar os processos e reduzir os impactos ambientais das sínteses convencionais de ésteres. O objetivo deste trabalho foi avaliar diferentes condições reacionais para a síntese do caprilato de octila, visando o máximo rendimento. A síntese do caprilato de octila foi realizada utilizando a lipase B de *Candida antarctica* imobilizada (Novozym® 435), na ausência de solventes. O acompanhamento da reação foi feito através da avaliação da redução do índice de acidez e das concentrações de reagentes e produtos ao término da reação por HPLC. Através de metodologias de planejamento experimental, foram avaliadas diferentes temperaturas (35°C, 50°C e 65°C), razões molares ácido:álcool (1:1, 1:2 e 1:3) e cargas enzimáticas (1%, 2,5% e 4% relativas à massa de ácido). Os resultados obtidos nesta fase apontaram rendimento máximo de $93,2 \pm 0,2\%$ para uma reação conduzida a 65°C, com carga enzimática de 4% e razão molar 1:3. Foi observado que o rendimento da reação está diretamente correlacionado ao aumento da temperatura e da carga enzimática. Verificou-se, todavia, que o aumento da razão molar, reduziu o rendimento na reação com carga enzimática até 4%. Fixando-se a temperatura em 65°C e variando a carga enzimática e a razão molar, foi obtido um rendimento de $95,3 \pm 0,2\%$ com carga enzimática de 4,61% e razão molar 1:2. Adotando-se uma relação (R) entre as massas dos reagentes (álcool – ácido) e a massa de enzima, visando reduzir a carga enzimática e o excesso de octanol, foi avaliado um novo conjunto de condições reacionais. Os valores de R entre 12 e 83 resultaram em rendimentos superiores a 90%. O rendimento máximo obtido foi de $95,6 \pm 0,9\%$ de caprilato de octila, para R igual a 12, utilizando uma carga enzimática de 1,5% em relação à massa de ácido caprílico, razão molar ácido:álcool de 1:1,3, temperatura de 65°C, em 3hs de reação. O rendimento da síntese do caprilato de octila obtido neste trabalho é 5% superior ao máximo reportado por outros estudos de síntese enzimática do caprilato de octila na ausência de solvente e tempo de reação 85% menor.

Mais informações em: <http://biblioteca.int.gov.br/>.