

### Esterificación enzimática de n-octanol con ácido acético.

Carlos López-Jiménez, Eduardo Bárzana, Miquel Gimeno

Departamento de Alimentos y Biotecnología. L-314. Facultad de Química-Edificio E, Universidad Nacional Autónoma de México. Ciudad universitaria, C.P. 04510 México D.F.  
e-mail: cjuvlopez@gmail.com

Palabras clave: *n*-octanol, ácido acético, lipasa.

**Introducción.** Trasladar las enzimas a disolventes no acuosos permite extender su poder catalítico y especificidad hacia la química sintética usando nuevos sustratos en novedosos sistemas de reacción. El sistema más estudiado consiste de enzimas suspendidas en solventes orgánicos con bajo o casi nulo contenido de agua (< 5% v/v).<sup>1</sup> En un solvente orgánico, como hexano, las lipasas son capaces de llevar a cabo reacciones reversas a la hidrólisis, como esterificaciones y transesterificaciones. Los ésteres orgánicos son usados industrialmente como aromas, sabores, farmacéuticos, etc. Los métodos más usados para su producción son la extracción de plantas y su biosíntesis fermentativa, pero estos métodos exhiben altos costos y bajos rendimientos. La síntesis química no es favorecida, por problemas tales como baja selectividad, bajo rendimiento y toxicidad,<sup>2</sup> por lo que su síntesis enzimática en solvente orgánico puede ser atractiva por su alta selectividad y sus suaves condiciones de reacción.

En este proyecto se está sintetizando octil acetato enzimáticamente en hexano.

**Metodología.** El biocatalizador utilizado fue la Lipasa B de *Candida antarctica* inmovilizada (Novozyme 435). Las reacciones se llevaron a cabo en matraces erlenmeyer roscados de 100 mL, bajo las siguientes condiciones: 30 mL de volumen de reacción, concentración equimolar inicial (0.5, 0.75, 1 y 1.25 M) de reactivos (octanol y ácido acético) en hexano; se agregaron tres diferentes cantidades de enzima (1, 5 y 20 mg/mL) y 75 mg de tamiz molecular por mL de solución, a 60 °C y 200 rpm. Se tomaron muestras a intervalos 5 o 10 minutos, que fueron analizadas por cromatografía de gases.

**Resultados y discusión.** En la Fig. 1 se presenta la reacción general para la síntesis enzimática de octil acetato en hexano.

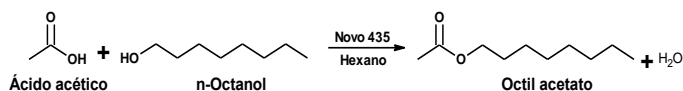


Figura 1. Síntesis enzimática de octil acetato en hexano.

En la Fig. 2 puede verse que al agregar 20 mg/mL de enzima, se alcanza una conversión cercana al 90 % en poco más de 10 minutos, muy superior a las otras concentraciones de enzima probadas; esto se debió probablemente a un efecto inhibitorio del ácido acético a bajas concentraciones de enzima, como ha sido

reportado en otros sistemas.<sup>3</sup> Esta cantidad fue utilizada en los ensayos posteriores.

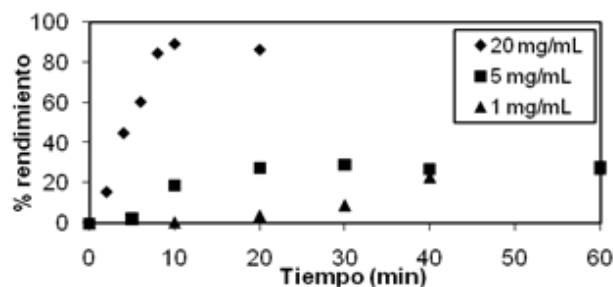


Figura 2. Rendimiento de octil acetato a diferentes concentraciones de biocatalizador. [Oct0] = [AcAc0] = 0.5 M

En la Fig. 3 puede verse el efecto de aumentar la concentración inicial de reactivos. A una mayor concentración, se observó que la reacción tardaba más en completarse, pero hasta la mayor concentración probada (1.25 M) se alcanzaron conversiones finales similares, sin una inhibición apreciable.

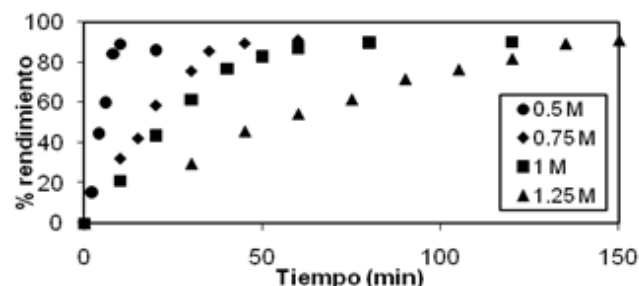


Figura 3. Rendimiento de octil acetato a diferentes concentraciones iniciales de reactivos. [Enzima] = 20 mg/mL

**Conclusiones.** Mediante la reacción enzimática en hexano es posible obtener octil acetato.

**Agradecimiento.** CONACyT Beca de maestría (LJ).

#### Bibliografía.

- Hudson, E., Eppler, R. y Clark, D. (2005). Biocatalysis in semi-aqueous and nearly anhydrous conditions. *Current opinion in biotechnology*, 16(6):637-643.
- Yadav, G. y Trivedi, A. (2003). Kinetic modeling of immobilized-lipase catalyzed transesterification of n-octanol with vinyl acetate in non-aqueous media. *Enzyme and Microbial Technology*, 32(7):783-789.
- Hari, S., Divakar, S., Prapulla, S., y Karanth, N. (2001). Enzymatic synthesis of isoamyl acetate using immobilized lipase from *Rhizomucor miehei*. *Journal of Biotechnology*, 87(3): 193-20.