

Príprava enantiomérne čistého S-(+)-1-(2-furyl)-pentan-3-olu

Erika Farkašová, Silvia Vlčková, Vladimír Mastihuba

Chemický Ústav, Centrum glykomiky SAV, Dúbravská cesta 9, SK-845 38 Bratislava
chemerfa@savba.sk

Chalkográn, 2-etyl-1,6-dioxaspiro(4,4)nonán, je zložkou agregáčného feromónu hrajúceho dôležitú úlohu v pohlavnom živote lykožrúta lesklého (*Pityogenes chalcographus*). Preto sa používa ako komponent feromónových pascí v boji s týmto škodcom. Ide o chirálnu zlúčeninu s dvoma stereogénnymi centrami. Zo štyroch možných enantiomérených variantov sa vo feromóne lykožrúta nachádza izomér (2*S*,5*R*) ako najúčinnější forma spolu s inaktívnym izomérom (2*S*,5*S*), vznikajúcim spontánnou racemizáciou [1]. Chemickými postupmi sa vyrába chalkográn ako zmes všetkých štyroch enantiomérov. Prírodne identický chalkográn – t.j. zmes jeho izomérov (2*S*,5*R*) a (2*S*,5*S*) možno pripraviť rovnakou reakciou vychádzajúcou z enantiomérne čistého S-(+)-1-(2-furyl)-pentan-3-olu. Jedným zo spôsobov prípravy tohto alkoholu je delenie racemickej zmesi prednostnou acyláciou jedného z enantiomérov pomocou lipáz. Podobné syntézy uskutočnené v minulosti poskytovali produkt s nevyhovujúcou optickou čistotou [2].

Úlohou tejto práce bolo preto nájsť vhodný enzým a reakčné podmienky, za ktorých je možné pripraviť čistý S-(+)-1-(2-furyl)-pentan-3-ol. Ako modelová reakcia bola zvolená acetylácia východiskového alkoholu vinyl acetátom. Z piatich testovaných lipáz všetky prednostne esterifikovali *R*-enantiomér, pričom najvyššia enantioselektivita bola pozorovaná u lipáz Lipozyme TL IM a Novozyme 435. Ako reakčné prostredie najlepšie vyhovovali dietyléter, metylterbutyléter a diizopropyléter. Po optimalizácii podmienok sa podarilo získať žiadaný enantiomér v enantiomérom prebytku vyššom ako 98 % (GC) po 64 %, resp. 71 % konverzii substrátu.

Práca bola finančne podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja ako projekt VMSP-P-0106-09

[1] Schurig, V., Weber, R., *J. Chromatogr.*, **1984**, 289, 321–332.

[2] Korblová, E., Koutek, B., Šaman, D., Svatoš, A., Maloň, P., Romaňuk, M, *Collect. Czech. Chem. Commun.*, **1990**, 55, 1234–1242.