



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE LA PLATA



VI Jornadas en Ciencias Aplicadas “Dr. Jorge J. Ronco”

## ESTUDIOS CATALÍTICOS Y MOLECULARES DE LA ESTERIFICACIÓN DE IBUPROFENO Y KETOPROFENO CON GLICEROL

María Victoria Toledo<sup>1</sup>, Carla José<sup>1</sup>, Carlos R. Llerena Suster<sup>2</sup>, Sebastián E. Collins<sup>3</sup>,  
Laura E. Briand<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas – Dr. Jorge J. Ronco CINDECA-CCT La Plata  
– CONICET- CICIPBA. Calle 47 N°257, 1900, La Plata, Buenos Aires, Argentina.

<sup>2</sup>Centro de Investigación de Proteínas Vegetales (CIPROVE), Departamento de Ciencias Biológicas,  
Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata – Centro Asociado CIC, La Plata,  
Argentina

<sup>3</sup> Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química INTEC, Universidad Nacional del Litoral,  
CONICET, Güemes 3450, 3000, Santa Fe, Santa Fe, Argentina.  
toledovictoria@gmail.com

Palabras claves: CALB, FTIR c-MES, MONOGLICERIDOS, PROFENOS

### RESUMEN

---

Se investigó la esterificación de ibuprofeno y ketoprofeno racémicos con glicerol catalizada por el biocatalizador comercial Novozym® 435. Las reacciones tipo “batch” se llevaron a cabo a una temperatura de 45°C, usando 2-propanol como solvente. Se estudiaron varias relaciones molares profeno:glicerol.

La conversión de ibuprofeno racémico alcanzó un 46%, con un exceso enantiomérico hacia el enantiómero S de 42%. Cuando se analizó la relación molar ibuprofeno:glicerol 1:4, un 75% del R-ibuprofeno reaccionó con glicerol hacia el monoglicérido con un 99% de selectividad, lo cual es de gran importancia en el campo de la síntesis de prodrogas. La conversión de ketoprofeno racémico fue menor (17% vs. 46% obtenido para ibuprofeno racémico), y la esterificación



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE LA PLATA



## VI Jornadas en Ciencias Aplicadas “Dr. Jorge J. Ronco”

proporcionó tanto el monoglicérido (70%) como el diglicérido (30%) independientemente de la relación molar ketoprofeno:glicerol empleada.

Se analizaron las reacciones de esterificación a nivel molecular mediante espectroscopia infrarroja de concentración modulada (FTIR c-MES), ATR-FTIR estático y espectroscopia Raman *in situ*. Los resultados probaron la disminución de las especies pertenecientes al ibuprofeno racémico y al glicerol, otorgando más evidencias del progreso de la reacción. Por otro lado, el análisis de la estructura secundaria de la enzima demostró que la interacción de ibuprofeno con CALB modifica la contribución de estructuras ordenadas de la lipasa, lo cual podría estar relacionado con el aumento del rendimiento catalítico en la esterificación de este profeno.