

TC-Schriftenreihe

Band 8

Melanie Wiebe

**Zur Kinetik der chemo-enzymatischen Epoxidation
von ungesättigten Fettsäuren**

D 466 (Diss. Universität-GH Paderborn)

Shaker Verlag
Aachen 2000

Die Deutsche Bibliothek - CIP-Einheitsaufnahme

Wiebe, Melanie:

Zur Kinetik der chemo-enzymatischen Epoxidation von ungesättigten Fettsäuren / Melanie Wiebe.

Aachen : Shaker, 2000

(TC-Schriftenreihe ; Bd. 8)

Zugl.: Paderborn, Univ., Diss., 2000

ISBN 3-8265-8070-2

Copyright Shaker Verlag 2000

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 3-8265-8070-2

ISSN 1433-6499

Shaker Verlag GmbH • Postfach 1290 • 52013 Aachen
Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9
Internet: www.shaker.de • eMail: info@shaker.de

Melanie Wiebe, geb. Lohmann 1968, studierte von 1988 bis 1994 an der Universität-Gesamthochschule Paderborn Chemie. Im Zeitraum von 1994 bis 2000 war sie als wissenschaftliche Mitarbeiterin im Fachgebiet Technische Chemie und Chemische Verfahrenstechnik an der Universität-Gesamthochschule Paderborn tätig.

Inhalt: In dieser Arbeit wird die Makrokinetik der chemo-enzymatischen Epoxidation - Persäurebildung mittels immobilisierter Lipase aus *Candida antarctica* mit nachfolgender Prileshaev-Reaktion - erfaßt und mathematisch-mechanistisch modelliert. Die Erfassung dieser Vorgänge im Reaktionssystem wird verglichen mit der Behandlung der Reaktion nach Michaelis-Menten und der Beschreibung mit einem rein formalen kinetischen Ansatz. Zudem wird das Modell hinsichtlich einer Anwendung zur Verfahrensoptimierung untersucht.

Zur Aufnahme der Kinetiken (Konzentrations-Zeit-Kurven) werden verschiedene Substrate eingesetzt, die entweder nur die Enzymreaktion (Stearinsäure, epoxidierte Ölsäure) oder nur die Prileshaev-Reaktion (Perstearinsäure und tert.-Butylester) eingehen können. Die Gesamtreaktion wird mit Ölsäure durchgeführt. Neben den Substraten werden Temperatur und Rührgeschwindigkeit variiert.

Das Reaktionssystem, bestehend aus festen Enzympartikeln und der in der organischen Phase dispergierten wäßrigen Phase, wird mit einem System gekoppelter Differentialgleichungen erster Ordnung beschrieben. Anhand von Simulationen mit variierten Parametern wie Diffusionskoeffizienten, Verteilungskoeffizienten, Grenzfilmdicken und Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten wird die Plausibilität des Modells und die Sensitivität der Parameter überprüft. Die kinetischen Konstanten werden mit Hilfe des Modells durch Anpassung an die experimentellen Daten ermittelt.

Der Vergleich mit den aus rein formalen Kinetikmodellen ermittelten Parameterwerten zeigt den Einfluß des Stofftransports zwischen Partikel- und Bulkphase. Die Temperaturabhängigkeit der Diffusion ist gegenüber der Temperaturabhängigkeit der kinetischen Parameter vernachlässigbar. Die Anpassungsrechnungen zeigen, daß ab einer Rührerdrehzahl von 300U/min die Grenzfilmdicke konstant ist und sich das System im Kinetikbereich befindet. Die Substratspezifität des Enzyms beschränkt sich nicht auf die an der Enzymreaktion teilnehmende funktionelle Gruppe. Das Enzym ist in der Lage, zwischen Stearinsäure und epoxidiertem Ölsäure zu unterscheiden. Das Temperaturoptimum des Enzyms zeigt sich bei allen Substraten durch die bei 70°C stark abfallenden Umsätze.

Für den Einsatz eines bestimmten Substrats sind vor allem die Optima für Temperatur, Lösungsmittel, Löslichkeiten und Wassergehalt neben der Substratspezifität des Enzyms zu berücksichtigen.

Suchbegriffe: Enzym, Lipase, *Candida antarctica*, Epoxidation, Mehrphasensystem, Modellierung, Reaktionskinetik, Substratspezifität