

Koksnes pārstrādes blakusproduktu transformācija vērtīgos biopoliolos, izmantojot perspektīvus heterogēnas fāzes biokatalizatorus un raksturojot procesa kinētiku (FORinPOL)

Projekta Nr.: lzp-2018/2-0020

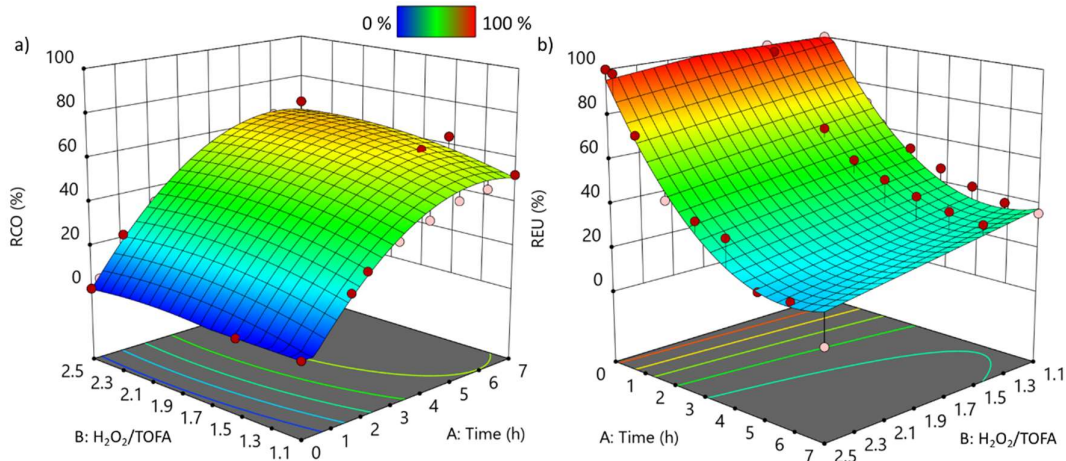
Uzsaukums, aktivitāte
LZP FLPP 2018/2

Projekta progressa pārskats par periodu 01.08.2019.-28.02.2020.

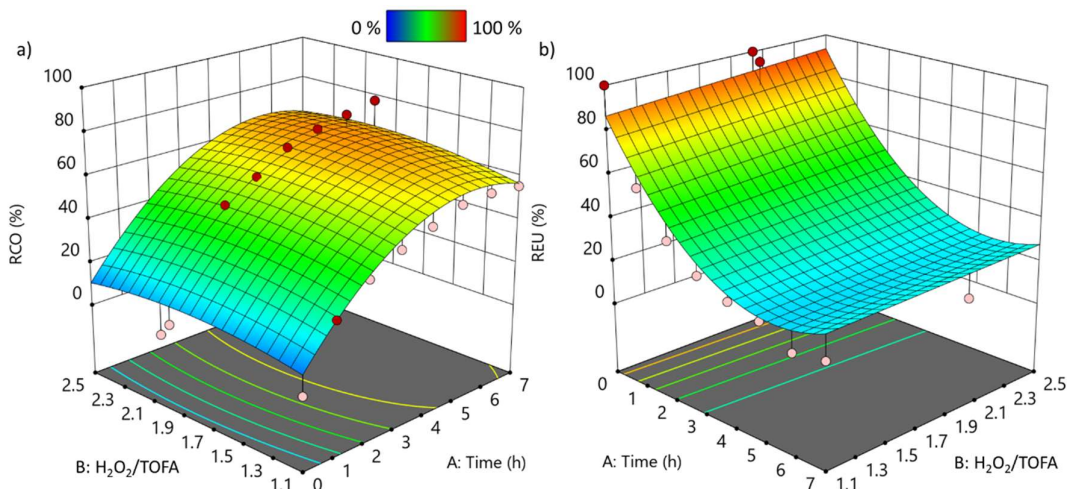
Projekta mērķis ir izstrādāt augsti efektīvu “zaļo poliolu” sintēzes metodi izmantojot heterogēnas fāzes enzīmu katalizatorus.

Lai noteiktu dažādu sintēzes parametru (H_2O_2 daudzums, H_2O_2 koncentrācija, lipāzes katalizatora saturs un temperatūra) ietekmi uz taleļļas epoksidācijas procesu, tika pielietota reakcijas virsmas modelēšanas (RSM) metode. Ar šīs metodes palīdzību tika noteikta dažādu faktoru mijiedarbība. Uzstādītais modelis tika izmantots, lai prognozētu optimālākos taleļļas epoksidēšanas reakcijas apstākļus bezšķīdinātāja vidē, kuros var sasniegt augstāko oksirāna grupu konversiju. Lai iegūtu ievades datus modelim, tika veiktas vismaz 26 taleļļas epoksidēšanas kinētikas pētīšanas pie dažādiem reakciju parametriem.

Izstrādātais modelis samērā labi savietojās ar eksperimentālajiem datiem un ļāva orientēties piecdimensionālajā telpā, kas izveidota no taleļļas epoksidācijas ietekmējošajiem faktoriem. Iegūtais modelis sniedza risinājumus optimālajiem procesa apstākļiem. Prognozētās RCO (relatīvā oksirāna konversija) un RES (relatīvā nepiesātinātība) reakcijas virsmas ir attēlotas 1. un 2. attēlā. Eksperimentāli iegūtie rezultāti ir attēloti kā sarkani punkti virs reakcijas virsmas un rozā punkti zem reakcijas virsmas.



1. attēls a) RCO reakcijas virsma b) REU reakcijas virsma atšķirīgās H₂O₂ un taleļļas molārajās attiecībās ($T_{\text{ sint }} = 40\text{ }^{\circ}\text{C}$; Novozym® 435 wt.% = 3,0 %; H₂O₂ wt.% = 20 %)



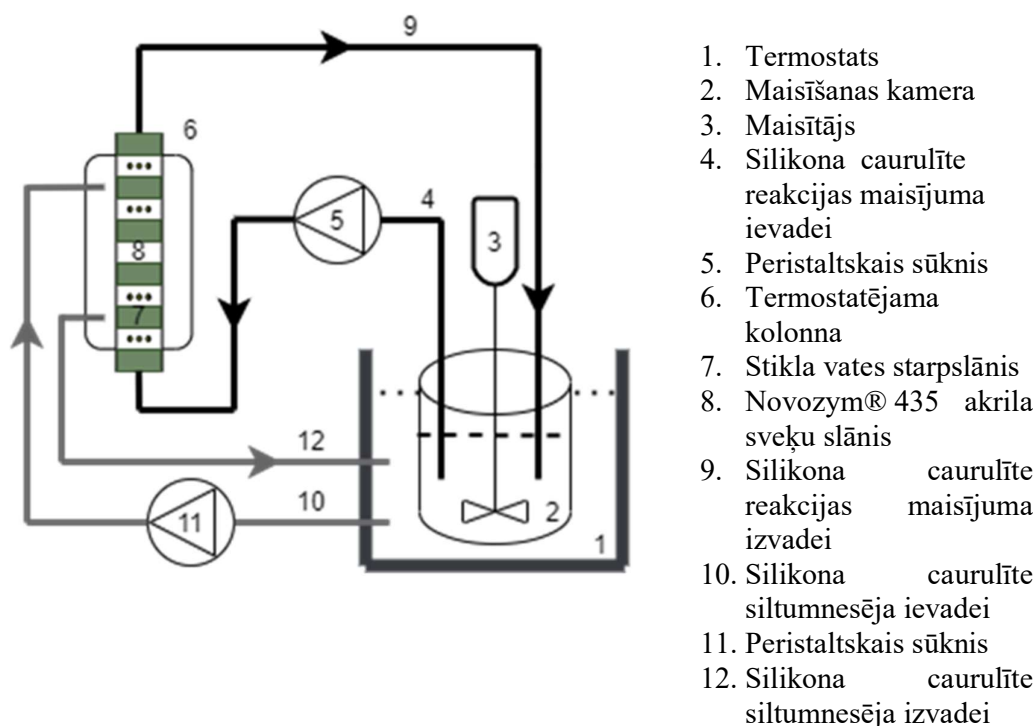
2. attēls a) RCO reakcijas virsma b) REU reakcijas virsma atšķirīgās H₂O₂ un taleļļas molārajās attiecībās ($T_{\text{ sint }} = 40\text{ }^{\circ}\text{C}$; Novozym® 435 wt.% = 3,0 %; H₂O₂ wt.% = 35 %)

Ar modelēšanas palīdzību tika izskaitļoti taleļļas epoksidēšanas reakcijas parametri bezšķīdinātāja vidē, pie kuriem ir iespējams visīsākajā laikā sasniegt visaugstāko oksirāna saturu, tai pat laikā izmantojot vismazāko iespējamo *Candida antarctica* lipāzes B daudzumu.

Sekojoši tika pētīta maisīšanas tehnikas un ātruma ietekme uz taleļļas pašepoksidāciju bezšķīdinātāja vidē, kinētikas gaitai sekojot līdzti trimetriski nosakot RCO izmaiņas. Vislabākos rezultātus sniedza mehāniskais maisītājs ar teflona uzgali 400-600 apgriezienu diapazonā. Kā alternatīvs maisīšanas veids tika izmantots arī ultraskaņas sonotrods, kura pielietotā jauda no vienas puses bija pārāk vāja, lai atbilstoši

homogenizētu 3 fāžu (eļļa/ūdens/akrila sveķi) maisījumu, bet no otras puses pielietotā jauda bija pārāk stipra, jo veicināja akrila sveķu (uz kuriem ir imobilizēta lipāze) strauju noārdīšanos.

Turpinājumā pētījuma ietvaros tika radīts maza mēroga nepārtrauktas darbības reaktora prototips taleļlas epoksidēšanai nepārtrauktas plūsmas apstākļos. Reaktora prototips ir attēlots 3. attēlā.



3. attēls Maza mēroga nepārtrauktas darbības reaktora prototipa shēma

Diemžēl taleļlas nepiesātināto taukskābju epoksidācija bezšķīdinātāja nepārtrauktas plūsmas apstākļos, kas tiek uzskatīta par piemērotākiem apstākļiem Novozym® 435 atkārtotai lietošanai, bezšķīdinātāja vidē radīja sarežģījumus. Reakcijas gaitā, palielinoties epoksidētās taleļlas viskozitātei, pieauga spiediens nepārtrauktās plūsmas sistēmā, kas neļāva sasniegt tik pat augstus rezultātus, kādi tika sasniegti cikliskās uzpildes reaktorā.

Tika novērots, ka pievienojot 20 % toluola attiecībā pret taleļļu, reakcijas vides viskozitāte ievērojami samazinājās, kā arī enzīma atkārtota izmantojamība ievērojami uzlabojās. No pētījumā iegūtajiem rezultātiem ir secināms, ka šķīdinātājs taleļlas

pašepoksidēšanai ar lipāzi ir nepieciešams galvenokārt, lai saudzētu lipāzi pret ūdeņraža peroksīda oksidatīvo ietekmi, kā arī uzlabotu reakcijas vides plūstamību.

**Projekta īstenošanas vieta –
Latvijas Valsts Koksnes Ķīmijas Institūts (LV KĶI),
Dzērbenes iela 27, Rīga, LV-1006 (<http://www.kki.lv>, koks@edi.lv).**

**Plānotais kopējais projekta īstenošanas ilgums – 24 mēneši.
Projekta zinātniskais vadītājs: Dr.Sc.Ing. Uģis Cābulis (cabulis@edi.lv).
Projekts uzsākts: 01.12.2018.**