POSZTEREK ÖSSZEFOGLALÓI

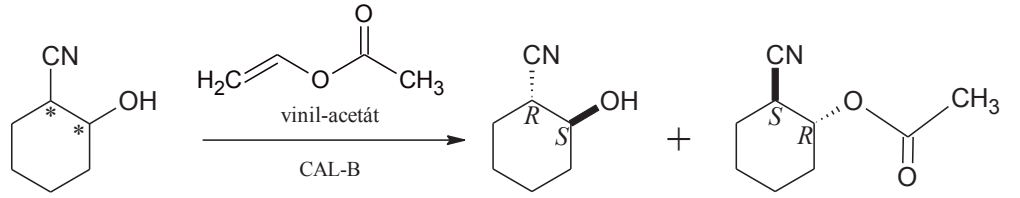
TRANSZ-2-HIDROXICIKLOHEXÁNKARBONITRIL LIPÁZKATALIZÁLT KINETIKUS RESZOLVÁLÁSA SZUPERKRITIKUS SZÉN-DIOXIDBAN

Alekszi N.[1], Utczás M.[1], Székely E.[1], Forró E.[2], Fülöp F.[2], Szőllősy Á.[3], Simándi B.[1]

[1] *BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék, Budapest*
[2] *Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszerkémiai Intézet, Szeged*
[3] *BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, Budapest*

Mivel a gyógyászatban széles körben alkalmaznak optikailag aktív vegyületeket, ezért a racém elegyek szétválasztása nagyon fontos. Napjainkban azonban minden új technológia kidolgozásánál előtérbe kerül annak környezetvédelmi vonatkozása is. A legnagyobb környezeti terhelést általában a nagy mennyiségben használt szerves oldószerek okozzák. Bizonyos területeken ezeket leválthatjuk környezetbarátabb oldószerekre. Munkánk során a zöld kémiai szempontoknak megfelelően szuperkritikus szén-dioxidot ($scCO_2$) használtunk.

Munkánk során a *transz*-2-hidroxiciklohexánkarbonitril, egy ígéretes androgén receptor antagonista intermedier vegyület enzimkatalizált kinetikus reszolválását vizsgáltuk szakaszos reaktorban (hasznos térfogat: 30,6 ml). Biokatalizátorként makropórusos gyantán rögzített *Candida antarctica* eredetű lipáz B (CAL-B) enzimet, acildonorként vinil-acetátot használtunk.



transz-2-hidroxiciklohexánkarbonitril (*1R,2S*)-2-hidroxiciklohexánkarbonitril [(*1R,2S*)-2-cianociklohexil]-acetát

Fő célkitűzésünk az acilezési reakció optimalizálása volt. Az optimális vinil-acetát:szubsztrát mólarányt már korábban meghatároztuk. Azt találtuk, hogy 2,5:1 mólarány fölött a végső konverzió már nem változik és a kezdeti reakciósebesség növekedés sem indokolja nagyobb mólarány alkalmazását. További kísérleteink során a nyomás (10-20 MPa), a hőmérséklet (40-70 °C) és a rendszer víztartalmának (0,007-0,983 mg/ml) hatását vizsgáltuk a reakció konverziójára és enantioszelektivitására. Elsőként egy 2^3-os kísérlettervvel, ahol a centrumpontban (15 MPa, 55 °C, 0,488 mg/ml) 3 ismétlést végeztünk. A vizsgálatokból kiderült, hogy a víz minőségi változást okoz az enzim működésében. A víztartalom növekedésének erősen negatív hatása van a konverzióra, azonban az enzim megfelelő működéséhez nem elegendő a saját maga által hordozott vízmennyiség. Optimális víztartalomnak az élelmiszeripari minőségű CO_2 egyszeri átdesztillálása után megmaradó víztartalom (~ 0,05 mg/ml) tűnik. Ez gyakorlati szempontból is kedvező, mert egy esetleges ipari alkalmazás során nem jelent többletköltséget a CO_2 előkezelése. Ezért a hőmérséklet és nyomás optimalizálását az egyszer desztillált CO_2, illetve az enzim által együttesen biztosított vízkoncentráció mellett végeztük egy 3^2 kísérlettervvel, a centrumpontban (15 MPa, 55 °C) szintén 3 ismétléssel. Az eredmények azt mutatják, hogy a hőmérsékletnek és a nyomásnak is jelentős hatása van a konverzióra.

A kutatómunkát az OTKA 72861 és a TÁMOP-4.2.1/B-09/1/KMR-2010-0002 támogatta.