

## 1-FENILETANOL KINETIKUS RESZOLVÁLÁSÁNAK VIZSGÁLATA OLDÓSZERMENTES ÉS SZUPERKRITIKUS SZÉN-DIOXID KÖZEGBEN

Varga Zs., Szécsényi Á., Kmecz I., Székely E.

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Kémiai és Környezeti  
Folyamatmérnöki Tanszék, Budapest*

Enantiomertiszta vagy adott enantiomerben feldúsított alapanyagok iránt rendkívül nagy kereslet mutatkozik a gyógyszer-, élelmiszer-, kozmetikai- és a növényvédőszeriparban is, melynek háttérében az enantiomerpárok eltérő biológiai aktivitása áll. Szekunder alkoholok racém elegyből kiindulva lipáz-katalizált kinetikus reszolválással tiszta alkohol-enantiomerek állíthatóak elő. Hagyományosan az elválasztást enantioszelektív észterezési reakciókkal valósítják meg, melyhez észterezőszerként szintetikus vegyületeket használnak.

Kutatásunk célja, hogy a kinetikus reszolválást szintetikus észterezőszer helyett környezetkímélőbb anyagokkal valósítsuk meg, így például természetes olajokkal. Első lépésként modell észterezőszerként triglicerideket, köztük glicerin-triacetátot és glicerin-tributirátot alkalmaztunk 1-feniletanol kinetikus reszolválásához. A reakciókhoz katalizátorként *Candida antarctica* lipáz B enzimet használtunk immobilizált formában. A hagyományos léghőmérsékleten végzett reszolválási reakciókkal ellentétben szerves oldószer nélkül, az észterezőszer reakcióközegként alkalmazva végeztünk kísérleteket 30-70 °C hőmérséklettartományban. Továbbá vizsgálatokat végeztünk szuperkritikus szén-dioxid közegben 100-200 bar nyomástartományban.

Az enantiomer-elválasztás tekintetében az észterezőszer hatékonyak bizonyultak: atmoszférikus körülmények között 99 %-os alkohol enantiomerfelesleg értékeket értünk el. Az észterezőszer nagy feleslegben alkalmaztuk, ezáltal a reakció egyetlen limitáló komponense a szekunder alkohol volt, így a reakció kinetikai leírására a Michaelis-Menten modellt alkalmaztuk. Az alkalmazott észterező ágensek közül léghőmérsékleten glicerin-tributirát esetén nagyobb kezdeti reakciósebességet tapasztaltunk, mint glicerin-triacetát esetén. Szuperkritikus szén-dioxidban a termék enantiomertisztasága meghaladta a 99 %-ot 90-99 % (*R*)-alkoholra számított hozam mellett. A reszolválási reakció kezdeti sebességét szuperkritikus szén-dioxidban az alkalmazott nyomás jelentősen befolyásolta. A szuperkritikus szén-dioxid lehetőséget teremt a reakció lejátszódása után a nyomáscsökkentéssel alapuló frakcionált termék-elválasztásra.

A kutatómunkát az OTKA (K108979) támogatta. Sz.E. köszöni az MTA Bolyai János Kutatási Ösztöndíjat.