

# Inhaltsverzeichnis

Symbole und Abkürzungen.....	VIII
1 Einleitung und Problemstellung.....	1
2 Grundlagen und Stand des Wissens .....	5
2.1 Fette und Öle.....	5
2.2 Enzyme.....	7
2.2.1 Einführung .....	7
2.2.2 Freie Enzyme .....	9
2.2.3 Immobilisierte Enzyme.....	10
2.2.4 Enzymkinetik .....	11
2.2.5 Chemo-enzymatische Epoxidation von Fettsäuren mit Lipase.....	14
2.2.6 Reaktionsmechanismus der chemo-enzymatischen Epoxidation.....	16
2.3 Stofftransportvorgänge.....	19
2.3.1 Stoffaustausch .....	19
2.3.2 Porendiffusion und chemische Reaktion .....	21
3 Experimentelles.....	25
3.1 Allgemeines .....	25
3.2 Analytik zur Reaktionsverfolgung .....	25
3.3 Durchführung der Versuche.....	28
4 Modellierung.....	31
4.1 Michaelis-Menten-Modell .....	31
4.2 Kinetische Modelle .....	34
4.3 Mathematisch-mechanistisches Modell.....	37
5 Simulationen .....	47
5.1 Parameterwerte .....	47
5.2 Variation der Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten.....	50
5.3 Variation der Diffusionskoeffizienten.....	55

5.4	Variation der Verteilungskoeffizienten .....	55
5.5	Variation der Grenzfilmdicke .....	55
6	Ergebnisse und Diskussion .....	55
6.1	Experimentelles.....	55
6.2	Auswertung.....	55
6.2.1	Michaelis-Menten-Modell .....	55
6.2.2	Kinetische Modelle.....	55
6.2.3	Mathematisch-mechanistisches Modell.....	55
6.3	Vergleich des kinetischen und des mathematisch-mechanistischen Modells.....	55
7	Zusammenfassung.....	55
8	Literaturverzeichnis.....	55
9	Anhang.....	55
9.1	Titrimetrische Methoden .....	55
9.1.1	Bestimmung der Wasserstoffperoxidkonzentration .....	55
9.1.2	Bestimmung der Persäurekonzentration .....	55
9.1.3	Bestimmung der Epoxidkonzentration .....	55
9.1.4	Bestimmung der Doppelbindungskonzentration.....	55
9.2	Entwicklung der Michaelis-Menten-Gleichung für eine reversible Zwei-Substrat-Enzymreaktion .....	55
9.3	Gleichungen des mathematisch-mechanistischen Modells .....	55
9.4	Simulationsparameter .....	55
9.4.1	Abgeschätzte Simulationsparameter der Gesamtreaktion .....	55
9.4.2	Variation der Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten.....	55
9.4.3	Variation der Diffusionskoeffizienten .....	55
9.4.4	Variation der Verteilungskoeffizienten .....	55
9.4.5	Variation der Grenzfilmdicke .....	55
9.5	Ermittelte Parameterwerte .....	55