

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