

Wiele aspektów życia w XX i XXI wieku było zdominowanych przez kwestie związane z katalizą. Ponadto współczesny przemysł dąży do produkcji związków chemicznych zgodnie z zasadami zielonej chemii. W tym kontekście szczególnym zainteresowaniem cieszy się synteza związków chiralnych, takich jak cyjanohydryny i alkohole β -nitrowe, które są wykorzystywane do syntezy α -hydroksyaldehydów, ketonów i β -aminoalkoholi wykorzystywanych jako prekursory do uzyskiwania bardzo ważnych substancji w sektorach współczesnego przemysłu farmaceutycznego, kosmetycznego i spożywczego. Związki te można uzyskać ze stosunkowo niedrogich i powszechnie dostępnych substancji chemicznych, takich jak toluen i alkohol benzylowy, poprzez procesy kaskadowe łączące fotokatalizę i biokatalizę. Integracja katalizy enzymatycznej i fotokatalizy w tych procesach pozwala na synergiczne wykorzystanie ich zalet. Jednak jednym z najważniejszych wyzwań związanych z wdrożeniem tych procesów jest zapewnienie kompatybilności enzymów z warunkami procesu fotokatalitycznego, takimi jak obecność reaktywnych form tlenu, intensywne promieniowanie UV lub zmiany pH. Dlatego w ramach obecnego projektu zamierzamy podjąć oryginalne prace badawcze, zarówno eksperymentalne, jak i teoretyczne (modelowanie), przede wszystkim w celu zdobycia nowej wiedzy na temat podstaw obserwowanych zjawisk w nowo opracowanej konstrukcji systemu reaktorów. W szczególności zamierzamy sprostać zidentyfikowanym wyzwaniom poprzez opracowanie skutecznego procesu kaskadowego do syntezy chiralnych cyjanohydryn i alkoholi β -nitrowych przy użyciu fotokatalizatorów, takich jak antrachinony lub TiO_2 , oraz unieruchomionych enzymów z grupy liaz hydroksynitrylowych. Monolity i powłoki krzemionkowe zostaną uzyskane metodą zol-żel, a następnie zmodyfikowane w procedurze posyntezy. Enzymy zostaną unieruchomione poprzez wiązanie kowalencyjne lub wiązanie z udziałem metali przejściowych. Przeprowadzona zostanie szczegółowa charakterystyka wszystkich przygotowanych materiałów/katalizatorów, aby umożliwić określenie zależności między strukturą a aktywnością/wydajnością. Aktywność unieruchomionych fotokatalizatorów i enzymów zostanie sprawdzona w reakcjach testowych z wykorzystaniem reaktorów przepływowych. Hydrodynamiczne aspekty reaktorów przepływowych enzymatycznych i fotokatalitycznych zostaną również zbadane na podstawie wyników pomiarów eksperymentalnych w połączeniu z analizą numeryczną. Do symulacji zostanie wykorzystany solver CFD ANSYS Fluent działający na specjalnie dedykowanym serwerze obliczeniowym. Z punktu widzenia chemii i inżynierii procesowej badania w dziedzinie układów reakcji wielokatalitycznych/kaskadowych koncentrują się głównie na reakcjach okresowych w układach jednorodnych lub dwufazowych. Doniesienia na temat zastosowania katalizatorów heterogenicznych (unieruchomionych) są nieliczne, a nie ma żadnych poświęconych pracy w trybie ciągłym. Zastosowanie katalizatorów unieruchomionych umożliwia zatrzymanie reakcji w dowolnym momencie, co pozwala na ponowne wykorzystanie katalizatora. W przypadku katalizatorów biologicznych zazwyczaj skutkuje to również poprawą stabilności enzymów podczas reakcji. Większość katalizatorów heterogenicznych jest stosowana w procesach okresowych z wykorzystaniem reaktorów zbiornikowych z mieszadłem mechanicznym. Jednak jedną z wad tej metody jest stopniowa degradacja ziaren katalizatora. Ponadto konieczność zapewnienia intensywnego transferu masy w zawiesinie ogranicza ilość katalizatora heterogenicznego, który można zastosować, co bezpośrednio wpływa na wydajność procesu. Dodatkowo, zwiększenie skali w zastosowaniach wsadowych powoduje problemy związane z transferem ciepła i masy, a także mieszaniem. Problemy związane z przenoszeniem skali w reaktorach zbiornikowych są szczególnie istotne w przypadku procesów fotokatalitycznych, biorąc pod uwagę ograniczoną głębokość penetracji światła padającego przy zwiększonej ilości katalizatora i objętości reaktora. Prowadzi to do gwałtownego spadku wydajności napromieniowania i zmniejszenia wykorzystania katalizatora, co skutkuje niezadowalającą wydajnością i selektywnością produktu docelowego. Ograniczenia systemów wsadowych omówiono tutaj w celu podkreślenia potrzeby opracowania specjalistycznego systemu przepływowego o wysokim stosunku powierzchni do objętości i skutecznej strategii dystrybucji heterogenicznego fotokatalizatora, torując drogę do praktycznych zastosowań. Reaktor mikroprzepływowy może zapewnić równomierne i skuteczne naświetlanie światłem przy użyciu rur o małej średnicy. Inne zalety reaktorów mikroprzepływowych obejmują lepszy transfer masy i ciepła, zwiększone bezpieczeństwo, precyzyjną kontrolę parametrów reakcji, doskonałą powtarzalność i łatwość skalowania. Równie ważne dla osiągnięcia optymalnych parametrów procesu jest opracowanie odpowiednio zaprojektowanych katalizatorów i specjalistycznych systemów reakcyjnych (reaktorów). Dlatego jesteśmy przekonani, że obie wyżej wymienione modyfikacje mogą znacznie poprawić skuteczność systemów reakcyjnych, czyniąc je bardziej opłacalnymi i biomimetycznymi (łącząc efekty kolokalizacji i ograniczenia przestrzeni, które są typowe dla komórek). Prace badawcze podjęte w ramach tego projektu przyczynią się do znacznego poszerzenia wiedzy na temat innowacyjnych systemów reaktorowych, umożliwiając określenie parametrów kinetycznych i procesowych pozwalających na integrację modułu biokatalitycznego z modułem fotokatalitycznym. W konsekwencji modyfikacje te mogą doprowadzić do zidentyfikowania możliwości poprawy skuteczności systemów katalitycznych w przyszłości, czyniąc je bardziej opłacalnymi i biomimetycznymi.