



Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu **VMSP-II-0005-09**

Výskum biokatalytickej prípravy tioesterov

Zodpovedný riešiteľ **Doc. Ing. Vladimír Štefuca, CSc.**

Príjemca **LiAxx Biotech, s.r.o.**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. LiAxx Biotech, s.r.o.
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

- 1.
- 2.
- 3.

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

- 1.
- 2.
- 3.

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. Sitkey, V., Bučko, M., Štefuca, V., Gemeiner, P., Vranková, K.: Biocatalytic preparation of thioesters, Editor: Markoš, J., In Proceedings of the 39th International Conference of Slovak Society of Chemical Engineering, Tatranské Matliare, Slovakia, 1389–1396, 2012
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Uplatnenie výsledkov projektu

Výsledky projektu budú uplatnené v praxi pri výrobe prírodných aromatických látok typu tioesterov a esterov mastných kyselín

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

-V rámci riešenia biokatalytickej prípravy aromatických látok zo skupiny prírodných (metyl) tioesterov sa realizoval skrining 25 komerčných prípravkov imobilizovaných lipáz pri tioesterifikáciách kyseliny n-butánovej, izovalérovej a n-hexánovej s tiolmi a boli vyselektované najefektívnejšie imobilizované preparáty.

-Na základe štúdia kinetík a priebehov reakcií bol navrhnutý a skonštruovaný enzýmový náplňový kolónový „packed-bed“ reaktor, ktorý umožnil sledovať a sofistikovane opisovať reakcie v reálnom čase.

-Pre komerčne najúčinnější imobilizovaný enzým - Novozyme 435 boli optimalizované procesné podmienky v enzýmovom reaktore posúvajúce rovnováhu v prospech tioesterifikácie. Rozsah tioesterifikácie sa podarilo zvýšiť úpravou pomeru kyselina:tiol na 1:5, a zvýšením reakčnej teploty na 60°C.

-V rámci overovacej prevádzky bola úspešne overená biokatalytická príprava prírodných aróm potrebných pre posúdenie ich senzoricých a kvalitatívnych ukazovateľov. Uvedeným spôsobom boli pripravené: 1-butylio-izovalerát, 1-butylio-butanoát, 1-butylio-hexanoát, 2-butylio-izovalerát, 2-butylio-butanoát, 2-butylio-hexanoát, hexyl-hexanoát.

-Nad rámec riešenia sa podarilo navrhnuť alternatívnu semi-syntetickú prípravu metylioesterov v kilogramových množstvách, v akceptovateľných výťažkoch a dobrej senzorickej kvalite (S-metyl tiohexanoát, S-metyl tio-3-metylbutanoát (tioizovalerát) a S-metyl tiobutanoát). Dosiahnuté výsledky dokazujú, že túto metódu je možné ďalej rozvíjať, až do priemyselných mierok, využívajúc nukleofilné správanie tiolov voči anhydridom kyselín.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)

During project solving, it was realized screening of 25 commercial preparations of immobilized lipases for biocatalytic preparation of thioesters of butanoic, isovaleric and hexanoic acid with thiols and selected the most effective enzyme preparations.

Based on the study of reaction kinetics was designed and constructed column packed-bed reactor, which allowed sophisticated description of reaction in real time.

For the most efficient commercially available immobilized enzyme - Novozyme 435 were optimized process conditions in enzyme reactor - shifting the balance in favor of thioesterification. The range of thioesterification was increased by adjustment of acid: thiol ratio to 1:5 and enhancement the reaction temperature to 60°C.

During the process verification was successfully verified preparation of biocatalytic natural flavors. Using these methods were prepared: 1-butyl (and 2-butyl)-thioisovalerate, thiobutanone, thiohexanoate.

In addition to planned schedule we succeeded to propose an alternative semi-synthetic method for methylthioesters preparation in kilogram quantities at acceptable yields and good sensory quality (S-methyl thiohexanoate, S-methyl thio-3-methylbutanoate (thioisovalerate) and S-methyl thiobutanoate). The obtained results show that this method can be further developed to industrial scales, using nucleophile behavior of thiols toward acid anhydrides.

Svojím podpisom potvrdzujem, že údaje uvedené v záverečnej karte sú pravdivé a úplné a súhlasím s ich zverejnením.

Zodpovedný riešiteľ

Doc. Ing. Vladimír Štefuca, CSc.

V Bratislave 19.12.2012

Štatutárny zástupca príjemcu

Ing. Martin Minárik

V Bratislave 19.12.2012

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu