

## Povzetek

V doktorski disertaciji sem se ukvarjala z načrtovanjem, razvojem in karakterizacijo procesov v mikroreaktorskih sistemih, pri čemer sem si pomagala z uporabo matematičnega modeliranja. Cilj raziskovalnega dela je bil razvoj mikroreaktorja s površinsko imobiliziranimi  $\omega$ -transaminazami z namenom študija in določitve površinske kinetike encimsko katalizirane transaminacije v mikroreaktorju.

V prvem delu sem izvedla analizo toka tekočine v mikrokanalu in razvila matematični model za določanje vrednosti difuzijskih koeficientov z uporabo mikrofluidne naprave. Prvotno razviti matematični model sem v nadaljevanju poenostavila, primerjava rešitev obeh modelov pa je upravičila vpeljavo izbranih poenostavitev in uporabo manj zahtevnih numeričnih tehnik. V nadaljevanju sem se posvetila razvoju mikroreaktorjev s površinsko imobiliziranimi  $\omega$ -transaminazami. Poleg kovalentne metode imobilizacije sem za pritrditev encimov prvič uporabila ionske interakcije, na podlagi katerih deluje imobilizacija z uporabo označevalca  $Z_{basic2}$ . Razvite encimske mikroreaktorje sem nato primerjala in izbrala optimalni sistem, ki sem ga v nadaljevanju uporabila za študij površinske encimske kinetike. Razvila sem matematične modele za opis procesov v šaržnem reaktorju s prostimi encimi in kontinuirnem mikroreaktorju z imobiliziranimi encimi. Kinetične parametre izbrane encimsko katalizirane transaminacije sem določila na podlagi eksperimentalnih podatkov, pridobljenih v šaržnih poskusih, in jih nato uporabila za modeliranje mikroreaktorskih sistemov s površinsko imobiliziranimi encimi. Izvedla sem analizo karakterističnih procesnih časov in model mikroreaktorja v nadaljevanju poenostavila. Izkazalo se je, da je obravnavani proces v mikroreaktorju omejen s hitrostjo encimsko katalizirane reakcije, poenostavitev pa je ustrezna, saj omogoča dovolj natančno določitev površinske encimske kinetike in koncentracije encimov na površini. Izvedla sem tudi validacijo modela, kjer sem izbrano encimsko katalizirano transaminacijo vodila v dveh zaporedno povezanih mikroreaktorjih s površinsko imobiliziranimi  $\omega$ -transaminazami.

Ključne besede: mikroreaktor, modeliranje, encimsko katalizirana transaminacija,  $\omega$ -transaminaza, površinska encimska kinetika.