

Chemical Reaction Engineering: Difusão com Biotransformação

D. R. M. Vieira¹, S. A. Cardoso¹, A. S. Santos¹

1. Universidade Federal do Pará - UFPA, Pará, Brasil

Introdução: A biotransformação de substratos utilizando enzimas imobilizadas em nano partículas presentes num meio fluido (substrato), contido num biorreator operando em modo batelada foi investigada. O substrato presente no meio fluido é biotransformado em produto pelas enzimas imobilizadas nas nano partículas. Simulando teoricamente através do uso das equações de difusão de espécies apropriadas para o consumo do substrato.

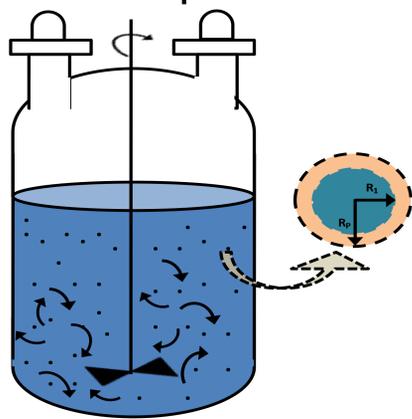


Figura 1. Esquema de um reator batelada agitado com enzimas imobilizadas em nano partículas esféricas.

Métodos Computacionais: A difusão na superfície da nano partícula, onde ocorre a biotransformação foi investigada. A relação utilizada para o coeficiente de difusão do substrato para a nano partícula seguiu a equação de Stokes-Einstein apresentada no estudo de Kleinstreuer et al (2008). A equação cinética de biotransformação do substrato pela enzima seguiu o modelo de Michaelis-Mentes. Foi utilizada a interface física a física **General Form PDE** do software COMSOL Multiphysics para a solução das equações do modelo de difusão.

As equações (1-6) foram as utilizadas.

$$\frac{\partial C(r,t)}{\partial t} = D \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial C(r,t)}{\partial r} \right] \quad t > 0 \quad 0 < r < R_p$$

$$C(r,t=0) = C_0 \quad t = 0 \quad R_1 < r < R_p$$

$$\frac{\partial C(r=R_1,t)}{\partial r} = 0 \quad r = R_1 \quad t > 0$$

$$\frac{\partial C(r=R_p,t)}{\partial r} = -R_c \times \left(\frac{2 R_p}{3 D} \right) \quad r = R_p \quad t > 0$$

$$R_c = \frac{\mu^* C(r=R_p,t)}{K_m + C(r=R_p,t)} \quad (\text{Eq. Michaelis-Mentes})$$

$$D = \frac{K_B \times T}{3\pi\mu R_p} \quad (\text{Eq. de Stokes-Einstein})$$

Resultados: Foram simulados eventos em sistemas (nano partícula mais camada de enzima) de diferentes R_p , e em diferentes concentrações iniciais de substrato no meio fluido. Os resultados estão presentes na Figura 2 e a Tabela 1 apresenta os parâmetros usados na simulação.

Tabela 1. Parâmetros utilizados na simulação.

Temperatura	T	298 K
Constante de Michaelis-Mentes	K_m	1.7 kg/mol
Velocidade máxima de Michaelis-Mentes	μ^*	$9.1 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$
Viscosidade	μ	$8.91 \times 10^{-4} \text{ kg/ms}$
Constante de Boltzmann	K_B	$1.3806488 \times 10^{-23} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1}$

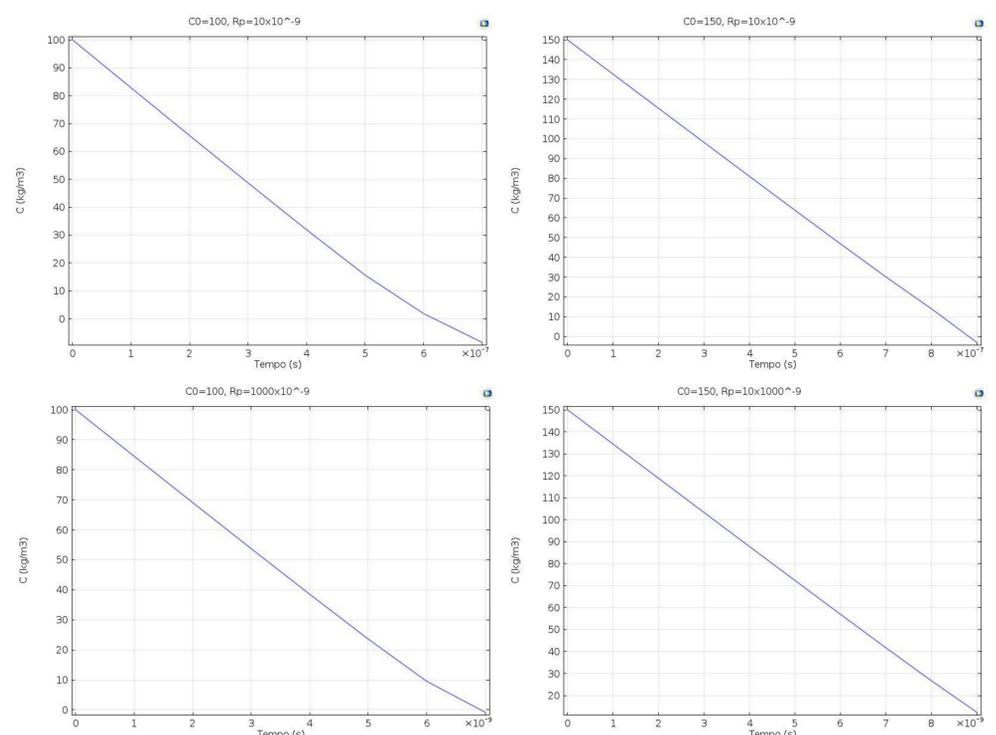


Figura 2. Perfil de concentração de substrato ao longo da superfície sistema (nano partícula mais camada de enzima) ao decorrer do tempo num sistema com raio R_p .

Conclusões: Da Figura 2 foi constatado que o perfil de concentração do substrato na parede da superfície do sistema não difere conforme a concentração inicial C_0 de substrato no meio fluido, e quanto ao tamanho do sistema ocorre diminuição do tempo de reação para sistema maiores.

Referências:

1. Kleinstreuer, C.; Li, J.; Koo, J. **Microfluidics of nano-drug delivery**, International Journal of Heat and Mass Transfer, 51, 5590-5597 (2008).