

Simulation und Vorhersage von Salzeinflüssen auf biologische Systeme

14778 N

Dieses Projekt hatte die Beschreibung, Berechnung und insbesondere die Vorhersage von Salzeffekten in biologischen Systemen zum Ziel. Dazu zählen speziell die Berechnung von Grenzflächenspannungen, osmotischen Drücken, Dampfdrücken, Löslichkeiten etc. in Abhängigkeit des Salzgehaltes. Mit Hilfe solcher Vorhersagen können beispielsweise flüssige Medien zur Optimierung biotechnologisch relevanter Enzymreaktionen gezielt hergestellt werden oder auch neue Programme für industriell eingesetzte Prozesssimulatoren bei Industrierwässern entwickelt werden.

In diesem Forschungsvorhaben wurde ein Programm erstellt, mit dem die Salzeigenschaften in biologischen Systemen modelliert werden können. Es kann sowohl isoliert betrieben als auch in andere Programme eingebunden werden. Damit können Dichte und Aktivitätskoeffizienten in Salz-Aminosäure-Lösungen berechnet werden. Außerdem wurde ein Regelwerk erstellt, mit dem es möglich ist, spezifische Ioneneffekte in biologischen Medien vorherzusagen.

Sowohl die Programme als auch das Expertenwissen sind vor allem für Biotechnologie-Unternehmen aber auch ganz allgemein für die chemische Industrie von Relevanz. Dieses leistungsfähige und einfach zu bedienende Programm bietet sich auch für den Einsatz in KMUs an.

Bearbeitet wurde das Forschungsthema von 08/06 bis 07/09 an der **Universität Regensburg, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie** (Universitätsstraße 31, 93053 Regensburg, Tel.: 0941/943-4044) unter Leitung von Prof. Dr. W. Kunz (gleichzeitig Leiter der Forschungsstelle), bei der **DECHEMA e.V.** (Theodor-Heuss-Allee 25, 60486 Frankfurt am Main, Tel.: 069/7564-0) unter Leitung von Dr. R. Sass (Leiter der Forschungsstelle Prof. Dr. G. Kreysa), an der **TU Dortmund, Fachbereich Bio- und Chemieingenieurwesen, Lehrstuhl für Thermodynamik** (Emil-Figge-Straße 70, 44227 Dortmund, Tel.: 0231/755-2635) unter Leitung von Prof. Dr. G. Sadowski (gleichzeitig Leiterin der Forschungsstelle) und an der **TU München, Physik-Department, T 37 Lehrstuhl für Physik II** (James Franck Straße, 85748 Garching, Tel.: 089/289-12394) unter Leitung von Prof. Dr. R. Netz (gleichzeitig Leiter der Forschungsstelle).

[--> TIB](#)

Gefördert durch:



Das IGF-Vorhaben Nr. 14778 N der Forschungsvereinigung DECHEMA, Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V., Theodor-Heuss-Allee 25, 60486 Frankfurt am Main wurde über die AiF im Rahmen des Programms zur Förderung der industriellen Gemeinschaftsforschung (IGF) vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages gefördert.

aufgrund eines Beschlusses
des Deutschen Bundestages