



## **Modellbasierte systematische Auslegung der Extraktion und Aufreinigung von 10-Deacetylbaecatin III aus *Taxus baccata***

*I. Koudous, M. Sixt, J. Strube*

Institute for Separation and Process Technology,  
Clausthal University of Technology, 38678 Clausthal-Zellerfeld, Germany

Der Bedarf an natürlichen, aus Pflanzen gewonnenen Produkten in den Bereichen Lebensmittel, Duft- und Aromastoffe sowie der Pharmazie ist seit vielen Jahren stetig im Wachstum [1]. Um diesen Bedarf auch in Zukunft decken zu können, sind Verbesserungen in der Extraktion und der anschließenden Verarbeitung der wertgebenden Komponenten unabdingbar. So stellt beispielsweise 10-Deacetylbaecatin III, welches aus der Europäischen Eibe (*Taxus baccata* L.) gewonnen wird, einen wichtigen Rohstoff zur halbsynthetischen Herstellung des Krebsmedikaments Paclitaxel dar.

In dieser Arbeit soll im Rahmen einer Prozessauslegung ein methodisches Vorgehen zur Extraktion und Aufreinigung von 10-Deacetylbaecatin III als typisches Beispielsystem dargestellt werden. Hierzu hat sich die Kombination aus Stoffdatenbestimmung und der modellbasierten Auslegung der Apparate als optimal herausgestellt. Der Ansatz beinhaltet quantenchemische Berechnungsmethoden mittels COSMO-RS [2] zur Bestimmung relevanter Stoffdaten [3], wie beispielsweise der Löslichkeit. Die ermittelten Daten zur Löslichkeit fließen ebenfalls in die Auslegung des Aufreinigungsprozesses ein. Ein valides physikochemisches Modell der Feststoffextraktion beruhend auf dem DPF-Modell (Distributed Plug Flow) [4] und einem modifizierten Porendiffusionsmodell, wird zur Optimierung der Extraktion eingesetzt.

Die experimentelle und modellbasierte Prozessentwicklung soll dargestellt und diskutiert werden. Durch eine Kostenabschätzung erfolgt der Vergleich zwischen bereits vorhandenen und dem in dieser Arbeit neu entwickelten Prozess.

### Literatur

- [1] Kaßing, M. et al.: *Chem. Eng. Technol.* 2012, 35 (1), 109-132
- [2] Klamt, A. et al.: *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2.* 1993, 799-805
- [3] Koudous, I. et al. : *C. R. Chimie* 2014, 17 (3), 218-231
- [4] Both, S. et al.: *Chem. Eng. Technol.* 2013, 36 (12), 1-13