



Nombre de la actividad curricular: MODELIZACIÓN DEL EQUILIBRIO Y LA CINÉTICA DE LA EXTRACCIÓN CON SOLVENTES DE MATERIALES VEGETALES

Modalidad de la actividad: Curso teórico-práctico

Carácter: Optativa

Docentes responsables: Dr. Andrés R. Linares
Dr. José L. Herrera

Carga horaria teórica: 32 hs

Carga horaria práctica: 18 hs

Carga horaria total: 50 hs

Duración en semanas: a definir

Objetivos de la actividad curricular: Introducir a los participantes del curso en el modelado matemático del equilibrio y la cinética de procesos extractivos sobre matrices vegetales.

Objetivos particulares: Hacer conocer al alumno las metodologías aplicadas al análisis de los fenómenos de transferencia de masa en los procesos de extracción con solventes de materiales vegetales. Hacer conocer al alumno las metodologías aplicadas al análisis del equilibrio de extracción con solventes de materiales vegetales. Analizar, aplicar y comparar los diferentes modelos utilizados en el análisis del equilibrio sólido-líquido de los procesos de extracción con solventes. Analizar, aplicar y comparar los modelos derivados de las soluciones exactas de los balances de masa diferenciales (2ª ley de Fick) y de los diferentes modelos cinéticos aplicados en la bibliografía. Describir la tecnología aplicada a algunos ejemplos de extracción con solventes en materiales vegetales de la industria alimenticia, farmacéutica y biotecnológica.

Contenidos de la actividad curricular:

1. *Fundamentos termodinámicos del equilibrio.* Estado de equilibrio y transiciones de fase. Energía libre. Coeficiente de partición. Diagrama de fases: comportamiento ideal, comportamiento real. Influencia de la microestructura en el equilibrio.

2. *Modelos aplicados al análisis experimental del equilibrio en extracción con solventes de materiales vegetales.* Análisis de sistemas de multicomponentes. Partición. Método del balance de masa. Modelo de Spiro y Siddique. Definiciones de coeficientes de partición. Influencia de la temperatura en la partición de los componentes, partición de mezcla de componentes. Ecuación de van't Hoff. Entalpía de extracción.



3. *Cinética de la extracción con solventes de componentes de materiales vegetales.* Modelos basados en principios de transferencia de masa Mecanismos de transferencia de masa desde el interior de tejidos vegetales. Microestructura de los materiales celulares. Análisis de la difusión de solutos. Ley de Fick. Soluciones de la ley de Fick.

Condiciones de frontera. Coeficiente de difusión. El método microestructural: factores de corrección, introducción de los efectos de la arquitectura del tejido, Modelado matemático en una matriz bidimensional.

4. *Cinética de la extracción con solventes de componentes de materiales vegetales.* Modelos cinéticos empíricos y semiempíricos Aplicaciones de diferentes modelos cinéticos al modelado de la velocidad de extracción en materiales vegetales: modelo de pseudo primer orden, modelo de segundo orden. Aplicación de modelos cinéticos consecutivos: Modelo de Patriccelli, Modelo de Linares. Estimación de Parámetros. Análisis de Sensibilidad. Comparación de los ajustes.

5. *Cinética de la extracción con solventes de componentes de materiales vegetales.* Influencia de la temperatura y de la relación sólido-solvente. Variación de los parámetros cinéticos con la temperatura: ecuación de Arrhenius. Análisis de la variación de los parámetros cinéticos con la relación sólido-solvente. Técnicas experimentales para la determinación de parámetros cinéticos.

6. *Sistemas de extracción.* Sistemas de extracción convencionales: clasificación. Principales extractores industriales. Operaciones preliminares a la extracción. Selección del solvente. Principios de la extracción supercrítica. Fluidos supercríticos como disolventes. Densidad, coeficiente de difusión y viscosidad de los fluidos supercríticos. Solvatación. Modificadores. Extracción supercrítica. Condiciones del proceso. Extracción a escala de laboratorio e industrial. Preparación de muestras. Recogida del extracto. Modelos.

7. *Aplicaciones de extracción con solventes.* Extracción de grasas y aceites. Extracción de proteínas. Extracción de azúcares y carbohidratos. Extracción de alcaloides. Otros productos naturales bioactivos. Utilización de software para el modelado y estimación de parámetros.

Modalidad de evaluación: Evaluación en 2 (dos) etapas. 1ra. Etapa: Evaluación de Informe de Seminario. 2da. Etapa: Exposición Oral y Defensa de Informe de Seminario.



Bibliografía de la actividad curricular:

1. Aguilera, J. M. & Stanley, D. W. (1999). Microstructural Principles of Food Processing and Engineering (2nd Ed., 325-372). Chapman & Hall Food Science Book, Aspen Publishers, Inc.,
2. Bai, Y., Nikolov, Z. L. & Glatz, C. E. (2002). Aqueous Extraction of α -glucuronidase from transgenic canola: kinetics and microstructure. *Biotechnology Progress*, 18(6), 1301-1305.
3. Bucić-Kojić A., Planinić M., Tomas, S., Bilis M. & Velić D. (2007). Study of solid liquid extraction kinetics of total polyphenols from grape seeds. *Journal of Food Engineering*, 81(1), 236 – 242.
4. Cacace J. E. & Mazza G. (2003). Mass transfer process during extraction of phenolics compounds from milled berries. *Journal of Food Engineering*, 59(4), 379 – 389.
5. Franco D., Sineiro J., Pinelo M. & Nuñez M. J. (2007). Ethanolic extraction of *Rosa rubiginosa* soluble substances: oil solubility equilibria and kinetics studies. *Journal of Food Engineering*, 79(1), 150-157.
6. Herodež, S. Š. Hadolin, M., Škerget, M. & Knez, Ž. (2003). Solvent extraction study of antioxidants from Balm (*Melissa officinalis* L.) leaves. *Food Chemistry*, 80(2), 275 – 282.
7. Ho, Y., Harouna-Oumarou, H.A., Fauduet, H. & Porte, C. (2005). Kinetics and model building of leaching of water-soluble compounds of *Tilia* sapwood. *Separation and Purification Technology*, 45(3), 169–173.
8. Jaganyi, D. & Madlala, S. P., (2000). Kinetics of coffee infusion: a comparative study on the extraction kinetics of mineral ions and caffeine from several types of medium roasted coffees. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 80(1), 85 – 90.
9. Jaganyi, D. & Price, R. D. (1999). Kinetics of tea infusion: effect of the manufacturing process on the rate of extraction of caffeine. *Food Chemistry*, 64(1), 27 – 31.
10. Jaganyi, D. & Wheeler, P. J. (2003). Rooibos tea: equilibrium and extraction kinetics of aspalathin. *Food Chemistry*, 83(1), 121 – 126.
11. Kashyap, M. C., Agrawal, Y. C., Ghosh, P. K., Jayas, D.S., Sarkar, B. C. & Sing, B. P. N. (2007). Oil extraction rates of enzymatically hydrolyzed soybeans. *Journal of Food Engineering*, 81(3), 611-617.
12. Kiran, E., Debenedetti, P.G., Peters, J. (Editores) (2000). *Supercritical Fluids. Fundamentals and applications*, NATO-ASI Serie E: Applied Sciences, Vol 366, Kluwe Academic Publisher,.
13. Linares, A. R. (2007). Study of equilibrium and kinetics of aqueous extraction of soluble components of processed yerba mate. Doctoral Thesis, Chemical Sciences, University of Buenos Aires (Argentina).



14. Peleg, M. (1988). An empirical – model for the description of moisture sorption curves. *Journal of Food Science*, 53(4), 1216-1219.
15. Price, W. E. & Spitzer, J. C. (1993). The temperature dependence of the rate of extraction of soluble constituents of black tea. *Food Chemistry*, 46(2), 133 – 136.
16. Price, W. E. & Spitzer, J. C. (1994). The kinetics of extraction of individual flavanols and caffeine from Japanese green tea (Sen Cha Uji Tsuyu) as a function of temperature. *Food Chemistry*, 50(1), 19- 23.
17. Rakotondramasy-Rabesiaka, L., Havet J. L., Porte, C. & Fauduet, H. (2007). Solid-Liquid extraction of protopina from *Fumaria officinalis* L. – Analysis determination, kinetics reaction and model building. *Separation and Purification Technology*, 54(2), 253 – 261.
18. Reverchon, E., De Marco, I.J. (2006). Supercritical Fluid Extraction and Fractionation of Natural Matter. *Supercritical Fluids*, 38, 146-166
19. Spiro, M. & Jago, D. S. (1982). Kinetics and equilibria of tea infusion. Part 3. Rotating-disc experiments interpreted by a steady-state model. *Journal of Chemical Society, Faraday Transaction*, 78(1), 295-305.
20. Spiro, M. & Selwood, R.M. (1984). The kinetics and mechanism of caffeine infusion from coffee: the effect of particle size. *Journal of Science of Food and Agriculture*, 35(8), 915-924.
21. Spiro, M. & Chong, Y. Y. (1997). The kinetics and mechanism of caffeine infusion from coffee: the temperature variation of hindrance factor. *Journal of Science of Food and Agriculture*, 74(3), 416 - 420.
22. Stapley, A. G. F. (2002). Modelling the kinetics of tea and coffee infusion. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 82(14), 1661 – 1671.
23. Taylor, L.T.; (1996). *Supercritical Fluid Extraction*, J.Wiley & Sons, Nueva York.
24. Tzia, C. & Liadakis G., (2003). *Extraction optimization in Food Engineering*. Marcel Dekker Inc.
25. Wongkittipong, R., Prat L., Damronglerd, S. & Gourdon, C. (2004). Solid-Liquid extraction of andrographolide from plants-experimental study, kinetics reaction model, *Separation and Purification Technology*, 40(2), 147-154.
26. Zaroni, B., Pagliarini, E., & Peri, C. (1992). Modelling the aqueous extraction substances from ground roasted coffee. *Journal of Science of Food and Agriculture*.