

密闭式微波系统的微波辅助萃取动力学模型^{*}

李 核, 张展霞, 李攻科

(中山大学化学与化学工程学院, 广东 广州 510275)

摘 要: 从 Fick 扩散定律出发, 利用电磁场增强扩散的理论, 建立了微波辅助萃取 (MAE) 动力学模型, 对影响 MAE 的温度、萃取时间、颗粒大小、微波功率等因素进行了模拟研究。除功率有些偏差外, 其它参数的模拟结果与实验结果十分接近。实验和模型结果还表明, MAE 条件下的白藜芦醇 (Res) 的扩散系数与模拟条件下的扩散系数比普通加热回流的扩散系数提高了 20 倍。这更进一步说明了 MAE 是通过增强目标化合物在基体内扩散速度的一个萃取过程。

关键词: 微波辅助萃取; 动力学模型; 白藜芦醇

中图分类号: O657; O658 **文献标识码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2004) 03-0040-05

利用微波辅助技术作样品前处理国内外已有不少文献报道^[1-3]。微波辅助技术处理样品的最突出特点是反应速度极快, 节时和节能, 产率高, 而且环境友好。其中微波辅助萃取 (MAE) 作为一种有机成分提取的新技术, 在环境、食品、制药等领域中得到了广泛的应用^[4]。它已经成为有机物提取领域中发展最快、研究最为活跃的技术之一, 其中草药有效成分提取的应用也得到了重要的发展。

由于 MAE 是微波场与化学介质之间一个很复杂的过程, 而且影响微波萃取速率的因素较复杂, 能精确实时监控微波萃取热力学数据 (尤其是温度的实时监控) 的仪器还不能普及, 所以, 目前有关微波萃取的研究多数是停留在应用及实验事实积累阶段。有关 MAE 的研究主要包括其应用对象和应用条件, 虽然对微波萃取的影响因素如溶剂用量、微波功率、时间多寡等有文献报道, 但关于 MAE 过程机制和动力学特性的研究报道却极少。迄今为止, 还未见到有 MAE 过程的动力学数学模型的报道。

本文针对 MAE 的特点, 在扩散理论的基础上, 提出微波萃取机理的一些假设。以萃取虎杖中白藜芦醇 (Res) 为实验对象, 考察了基体颗粒大小和微波功率、温度、萃取时间等参数对 Res 提取量的影响, 并结合电磁场和化学介质流场理论, 初步建立了一种可以预测样品进行 MAE 的最佳参数以及

MAE 过程的机制的动力学模型并探讨了微波萃取增强扩散迁移的机理。

1 材料与方法

1.1 材料和仪器

1.1.1 材 料 虎杖 (购于广州市北京路采芝林药材商场), 经过组织捣碎机捣碎后, 网筛分成不同粒径的颗粒物。

1.1.2 试 剂 白藜芦醇 (resveratrol, Res) 标准样品 (美国 Sigma 公司); 双 (三甲基硅基) 三氟乙酰氨 (BSTFA) (美国 Sigma 公司); 甲醇、乙醇、乙酸乙酯、丙酮均为分析纯 (广州化学试剂厂产品)。

1.1.3 仪 器 密闭式的 MARS X 微波炉 (简称为 MX 炉) 为美国 CEM 公司产品。该体系可容纳 14 个萃取罐, 可同时进行萃取。本仪器的特点是通过微机进行萃取参数如功率和温度的设定和控制, 同时可准确地显示和控制萃取过程中萃取体系温度的变化。HP6890GC 气相色谱仪和 HP5973 质谱联用仪和熔融石英毛细管柱 HP 5MS (30 m × 0.25 mm id × 0.25 μm) 均为美国 Agilent (原 HP) 公司产品, 电子湿度测定器, 组织捣碎机 (上海模型标本厂产品); 减压旋转蒸发仪 (上海申科科学仪器研究所产品)。

1.2 样品处理方法——微波辅助萃取 (MAE) 法
准确称取 0.55 g 样品于微波萃取罐中, 加入

* 收稿日期: 2003-09-03

基金项目: 国家重点基础研究发展资助项目 (G2000026302); 国家自然科学基金资助项目 (20375050); 广东省科技计划资助项目 (A301020301)

作者简介: 李 核 (1973 年生), 男, 博士生, 现在华南师范大学化学系工作; 通讯联系人: 张展霞;

E-mail: ceszxx@zsu.edu.cn

适量的水和萃取溶剂, 最后放入可控温的 MARS-X 微波炉中按优化条件 (微波辐射功率 900 W, 萃取温度 60 °C, 萃取时间 15 min) 进行萃取, 冷却后过滤、减压浓缩干, 再用乙酸乙酯溶解、取一定量乙酸乙酯溶液定容、衍生化, 进样 1 μ L, 进行分析测定。详细分析条件可参考文献 [5]。

2 理论部分

2.1 MAE 过程

MAE 是利用微波能使与固体样品接触的溶剂致热, 并同时目标化合物 (以下简称 TC) 从样品中分离出至溶剂中的过程。样品和溶剂一般是置于密闭的或敞开的对微波透明的萃取罐中, 然后在微波炉中接受微波均匀照射一定时间。所用的溶剂 (单个或混合) 一般具有较高的介电损失因子 ϵ'' 和正弦介电损耗因子 $\tan \delta$ 在 MAE 过程中, 化合物的分离主要包括以下几个过程:

(1) 在基体—溶剂界面发生解吸, 接着 TC 扩散至溶剂中。

(2) 所用的溶剂在微波照射下与电磁场耦合, 然后通过介电松弛机制^[6]将热传输到溶剂中致溶剂升温, 从而提高了 TC 在溶剂中的溶解度, 以及从基体解吸的动力学。

(3) 在高温中, TC 扩散至溶剂中的速度加快, 从而提高了微波致热萃取的速率。

微波致热的主要优点是能量迅速地、有效地传到溶剂中。在 MAE 中, 溶剂不断的与溶质和基体表面接触, 即基体不断地浸泡在热的溶剂中, 当溶剂沸腾时, 在过热处, 样品—溶剂混合物将不停地处于搅动中, 这一现象也导致了基体温度升高。

当用密闭系统时, 高温萃取会导致容器内气压升高至 200 psi (约 14 bar) 左右, 溶剂的温度均比大气压沸点高 2~3 倍, 例如丙酮从 56.2 °C 提高到 164 °C^[7], 且几分钟内就可以达到。高温提高了萃取效率, 节省了萃取时间。

2.2 数学模型假设

整个 MAE 过程可以理解为相当于一个解吸和扩散迁移的过程。本文将 MAE 的整个过程细分为 4 步: ① 溶剂向基体内部渗透, 此步主要受基体的亲、疏水性及溶剂的性质等影响; ② 在基体—溶剂界面发生解吸; ③ TC 从基体内部扩散迁移到虎杖基体表面, 即内扩散过程; ④ 固液界面的 TC 扩散迁移到溶剂主体中。由于溶剂化和扩散受到温度、溶剂、基体颗粒、外场等外界因素的影响, MAE 的过程是一个解吸、扩散传质的串联控制过程。为简化起见, 提出如下假设: ① 溶剂向基体内

部渗透速度很快, 可以忽略其对萃取速率的影响; ② 萃取过程中溶剂体积无变化; ③ 初始状态时 TC 在基体中是均匀分布的; ④ 溶剂向基体内部扩散/渗透是均匀的; ⑤ 溶剂及目标萃取物向基体表面的扩散是均匀的; ⑥ TC 的溶解速率远大于扩散速率; ⑦ 颗粒大小均匀一致。

根据以上的假设, 整个萃取过程存在解吸和扩散的过程, 因此, 将整个萃取过程作为一个解吸扩散串联过程处理。但在实际的萃取过程中, 物质从基体内部扩散至基体表面是整个萃取过程的控制步^[8], 所以只考虑该基体内部扩散过程的影响。

2.3 数学模型

根据 Fick 扩散定律, 在无外场作用时, 扩散速率方程可表示为:

$$\frac{dn_s}{dt} = -DS \left(\frac{dc_s}{dx} \right) \quad (1)$$

其中 $\frac{dn_s}{dt}$ 为通过扩散面进入溶剂中物质质量的萃取时间变化率, 即扩散速率; D 为扩散系数; S 为扩散面面积; $-\frac{dc_s}{dx}$ 为扩散面处的浓度梯度, 负号表示扩散沿浓度下降方向进行, 或扩散源中物质质量随时间减少。

假设外场 (电磁场) 的存在增强了内扩散作用, 扩散方程可修改为

$$\frac{dn_s}{dt} = -(1 + \gamma) D_s S \left(\frac{dc_s}{dx} \right) \quad (2)$$

其中, γ 为由于电磁场引起的扩散增强系数。 D_s 为虎杖基体内扩散系数, 与物质的性质如内摩擦、温度等以及扩散处的物质浓度有关; 而在实际过程中, D_s 不仅与物质的性质有关, 而且与基体内微孔空隙率有关。空隙率越大, 扩散速率越大; 此外, 它还与基体内所含分析物的浓度大小有关。所以, 综合考虑各因素的作用, 实际内扩散系数, 亦即有效内扩散系数 D_s 与固有内扩散系数有如下关系

$$D_s = f c_s^b D_0$$

其中, D_0 是一个仅与扩散体系的物质性质、温度等有关的常数, 称固有扩散系数, 浓度项 c_s^b 可代表浓度对扩散系数的影响, b 、 f 均为常数。

$$\frac{dn_s}{dt} = -D_s S \frac{dc_s}{dx} = -f(1 + \gamma) c_s^b D_0 S \frac{dc_s}{dx} \quad (3)$$

由于扩散面的浓度不仅与时间有关, 而且与空间也有关, 即是时间和空间的函数^[9]。而且, 扩散面的浓度梯度越大, 扩散速度越快, 浓度梯度变化越

大。因而扩散面浓度梯度的变化可以表示为

$$\frac{d(d c_s / d x)}{d t}=m \frac{d c_s}{d x} \quad (4)$$

m 为浓度梯度的时间变化常数, $m<0, m=0, m>0$ 分别反映浓度梯度随时间衰减、恒定和增加的情况。假定原始虎杖样品中 Res 的物质的量为 n_0 mol, 浓度为 $c_{s, 0} \text{ mol} / \text{m}^3$ 。则初始条件为:

$$\begin{aligned} c_s \mid_{t=0} &=c_{s, 0} \\ n_1 \mid_{t=0} &=0 \end{aligned} \quad (5)$$

根据初始条件, 由 (4) 式可得到,

$$\frac{d c_s}{d t}=c_{s, 0} \exp (m t) \quad (6)$$

将 (5)、(6) 式代入 (3), 得

$$\frac{d n_s}{d t}=-f(1+\gamma) c_s^b D_0 S c_{s, 0} \exp (m t) \quad (7)$$

$$n_1=n_0-n_s=n_0-c_s V_s \quad (8)$$

$$c_s=\frac{n_0-n_1}{V_s} \quad (9)$$

$$S=\pi \phi^2$$

$$\frac{V_s^b d n_s}{\left(n_s\right)^b}=-g(1+\gamma) c_s^b \phi^2 D_0 c_{s, 0} \exp (m t) d t \quad (10)$$

此为 MAE 固体样品 (虎杖) 的动力学模型。该模型考虑了颗粒粒径、微波场、浓度、时间等因素对萃取效率的影响。

其中, n_s 为时间 t 时虎杖基体中残留 Res 的物质的量; V_s 为虎杖样品的体积; S 为扩散面积; ϕ 为颗粒粒径; g 为常数。

$$\frac{V_s^b}{b-1} \cdot \frac{1}{n_s^{b-1}}=-\frac{g(1+\gamma) \phi^2 D_0 c_{s, 0}}{m} \exp (m t) \quad (11)$$

$$n_s^{1-b}=-\frac{(b-1) g(1+\gamma) \phi^2 D_0 c_{s, 0}}{m V_s^b} \exp (m t) \quad (12)$$

根据质量平衡, 溶液中被萃取物质的量 (n_1) 等于总的物质的量 (n_0) 减去基体残留的物质的量 (n_s), 即 $n_1=n_0-n_s$, 因此

$$\begin{aligned} \left(n_0-n_1\right)^{1-b} &= \\ &-\frac{(b-1) g(1+\gamma) \phi^2 D_0 c_{s, 0}}{m V_s^b} \exp (m t) \end{aligned} \quad (13)$$

3 结果与讨论

3.1 萃取时间与萃取效率关系

当其它条件不变而只考虑萃取时间对萃取量影响的情况下, 此时萃取的物质的量与时间的关系:

$$\begin{aligned} \ln \left(n_0-n_1\right) &= \\ \frac{1}{1-b} \ln \left[\frac{(1-b) g(1+\gamma) \phi^2 D_0 c_{s, 0}}{m V_s^b}\right] &+\frac{m}{1-b} t \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \text { 令 } \alpha_1 &=\frac{1}{1-b} \ln \left[\frac{(1-b) g(1+\gamma) \phi^2 D_0 c_{s, 0}}{m V_s^b}\right], \\ \beta_1 &=\frac{m}{1-b} \end{aligned}$$

所以, $\ln \left(n_0-n_1\right)=\alpha_1+\beta_1 t \quad (15)$

通过初始条件和给参数赋予初始值, 然后利用非线性最小二乘法优化, 最后得到模型中未知参数 m, b 的值。由 (15) 式可知 α_1, β_1 值分别由 $n_0, \phi, c_{s, 0}, D_0, V_s, m, b$ 等参数确定。在 $T=303 \text{ K}$ 时, α_1, β_1 分别为 $-11.1699, -0.001189$; 在 $T=313 \text{ K}$ 时, α_1, β_1 分别为 $-11.3394, -0.001411$; 在 $T=323 \text{ K}$ 时, α_1, β_1 分别为 $-11.4976, -0.001738$; 在 $T=333 \text{ K}$ 时, α_1, β_1 分别为 $-11.6434, -0.002693$ 。然后以虎杖中 Res 残留量的对数对时间作图, 得图 1。从图中可见, 实验值和理论值较吻合。虎杖中 Res 的量 (物质的量) 随着萃取时间的增加而下降, 并且温度越高, 其下降的速度越快, 说明在高温条件下萃取的速度越快, 即达到萃取平衡的时间缩短。所以, 在实验条件允许的情况下, 应该尽量选择较高的温度。图 1 表明, MAE 的过程是一级动力学的过程, 与实验结果一致, 说明了该萃取模型符合 MAE 的特点。

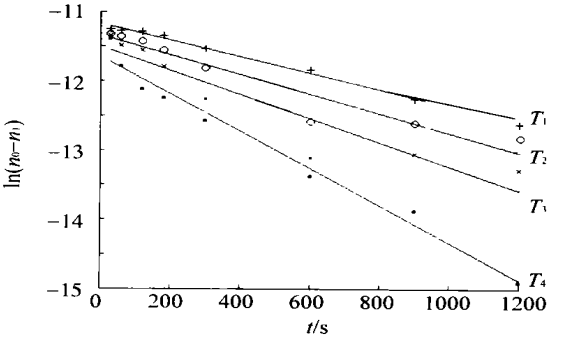


图 1 不同微波温度下 $\ln \left(n_0-n_1\right)$ 与微波辐射时间 t 的关系图

Fig. 1 The relationship between $\ln \left(n_0-n_1\right)$ and radiation time under different microwave temperatures $T_1=303 \text{ K} ; T_2=313 \text{ K} ; T_3=323 \text{ K} ; T_4=333 \text{ K}$
 $n_0=1.447 \times 10^{-5} \text{ mol}, \phi=3.65 \times 10^{-4} \text{ m},$
 $c_{s, 0}=0.019605 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}, V_s=7.3826 \times 10^{-4} \text{ m}^3,$
 $D_0=6.09773 \times 10^{-13} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

3.2 颗粒物大小与萃取效率的关系

当只考虑颗粒粒度的变化时, 其它参数为常数, 于是可以得到

$$\begin{aligned} \ln \left(n_0-n_1\right) &=\frac{1}{1-b} \cdot \\ \left[\ln \frac{(1-b) g(1+\gamma) D_0 c_{s, 0}}{m} e^{m t}+(2-3 b) \ln \phi\right] &\quad (16) \end{aligned}$$

令,
$$\alpha_2 = \frac{1}{1-b} \ln \left[\frac{g(1+\gamma)D_0 c_{s,0}}{m} \exp(mt) \right]$$
$$\beta_2 = \frac{2-3b}{1-b}$$
$$\ln(n_0 - n_1) = \alpha_2 + \beta_2 \ln \phi \quad (17)$$

以 $\ln(n_0 - n_1)$ 对颗粒粒径 ϕ 作图, 得图 2。

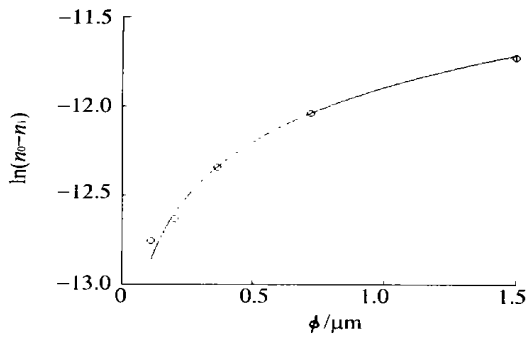


图 2 颗粒粒径与 $\ln(n_0 - n_1)$ 的关系图

Fig. 2 The relationship between $\ln(n_0 - n_1)$ and particle size

$$n_0 = 1.447 \times 10^{-5} \text{ mol}, t = 10 \text{ min}, P = 900 \text{ W},$$
$$c_{s,0} = 0.019605 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}, D_0 = 6.09773 \times 10^{-13} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

从图 2 可见, 实验值和理论值较吻合。随着颗粒的粒径增加, 在相同的微波萃取条件下, 基体内残留 Res 的含量也随颗粒的粒径增加而增加。这是由于颗粒的粒径增加, Res 扩散迁移出虎杖基体的路径增加了, 在相同的萃取时间下, 其基体内部残留的 Res 含量相应要比小粒径的高。研究表明: 当颗粒过大时, 可以通过适当磨碎样品达到加速萃取目的, 但是, 颗粒粒径过细 (达到 0.111 mm) 时, 虎杖中 Res 残留量实验值比模拟值偏高, 主要是由于在实际的萃取过程中, 虎杖颗粒粒径小于 0.111 mm, 虎杖中其它组分如糖类等也大部分被萃取, 萃取液体的黏度增加, 为分离出 Res 时造成困难, 可能导致损失, 因而出现图实验值 Res 残留量高于模拟值。由此可见, 样品颗粒大小是 MAE 过程的重要参数。

3.3 微波功率与萃取效率的关系

微波功率变化, 主要是改变了整个体系所处的电磁场强度。董翔等^[10] 在研究电场对扩散系数的影响时表明, 扩散系数与电场强度的平方成正比关系, 而微波场是一种电磁场, 因而微波功率对扩散系数的影响常数是功率的函数, 假定

$$\gamma = k_1 E^2,$$

又因
$$P = \omega \epsilon_0 \epsilon''_{\text{eff}} E^2 V \quad (18)$$

所以,
$$\gamma = k_1 E^2 = \frac{k_1 P}{\omega \epsilon_0 \epsilon''_{\text{eff}} V} \quad (19)$$

将 (19) 式代入 (13) 式中, 可得到

$$\ln(n_{s,0} - n_1) = \alpha_3 + \beta_3 \ln P \quad (20)$$

式中,
$$\alpha_3 = \frac{1}{1-b} \ln \left[\frac{(1-b) g k_1 \phi^2 D_0 c_{s,0}}{m V_s^b} \exp(mt) \right],$$

$$\beta_3 = \frac{1}{1-b} \ln \frac{1}{\omega \epsilon_0 \epsilon''_{\text{eff}} V}$$

P 为微波辐射功率, ω 为微波场的角频率, ϵ_0 为绝对介电常数, ϵ''_{eff} 为介质在微波场中有效损耗, E 为电场强度, V 为样品的体积, k_1 为常数。

介质对微波吸收的效率取决于萃取体系的溶剂和基体的性质以及萃取体系的性质等, 当对一特定的萃取体系, 溶剂等参数不变, 通过微调模型参数, 可得到较好的拟合结果, 最后可以得到 $\alpha_3 = -11.6172$, $\beta_3 = -0.3796$ 。以 $\ln(n_0 - n_1)$ 对功率 P 作图, 得图 3。由图可见, 随着功率增加, 萃取效果越好, 这与实验结果的趋势是一致的, 但从图可见到有些实验值还存在一定的偏差。主要是因为, 在实际的萃取过程中, 由于是在控温的条件下进行, 微波的功率并非固定不变, 而是随着萃取体系反馈的信号相应变化。而当微波功率的变化, 整个萃取体系的电磁场强度会发生变化, 而我们的模型把电磁场强度当作常数处理是欠缺的。

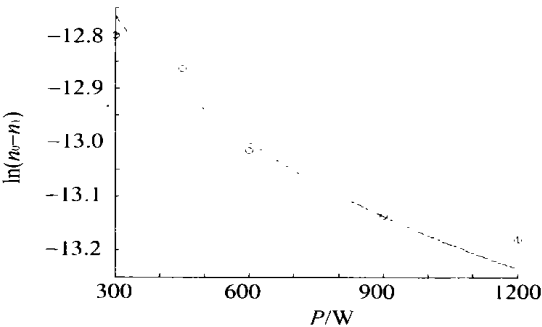


图 3 微波功率与 $\ln(n_0 - n_1)$ 的关系图

Fig. 3 The relationship between $\ln(n_0 - n_1)$

and microwave power

$$n_0 = 1.447 \times 10^{-5} \text{ mol}, \phi = 3.65 \times 10^{-4} \text{ m},$$
$$c_{s,0} = 0.019605 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}, D_0 = 6.09773 \times 10^{-13} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1},$$
$$V_s = 7.3826 \times 10^{-4} \text{ m}^3, T = 333 \text{ K}$$

3.4 萃取温度与扩散系数的关系

对于球形的颗粒物, 其萃取表观速率常数 (K) 与扩散系数 (D) 有以下关系^[11]:

$$K = \frac{12D}{\phi^2} \quad (21)$$

通过实验和模型理论, 分别求得 MAE 在 303, 313, 323 和 333 K 时候的扩散系数 (见表 1), 结果表明, MAE 实验条件下的扩散系数与模拟条件下的扩散十分接近, 这一结论说明 MAE 增强扩散的这

一假设是成立的。说明了 MAE 是通过增强 TC 在基体内扩散速度一个萃取过程。

表 1 Res 在 MAE 体系和普通加热回流条件下的扩散系数

Tah 1 Diffusion coefficients of resveratrol in MAE system and reflux heating system

T/K	扩散系数 ¹⁾ /(m ² ·s ⁻¹)			扩散增强因子	
	D _E /10 ⁻¹¹	D _T /10 ⁻¹¹	D ₀ /10 ⁻¹³	D _E /D ₀	D _T /D ₀
303	1.25585	1.25432	6.09773	20.6	20.57
313	1.83856	1.83456	8.91005	20.6	20.59
323	2.62887	2.55474	12.7173	20.7	20.09
333	3.67902	3.74254	17.7675	20.7	21.06

1) D_E 为微波辅助萃取扩散系数实验计算值; D_T 为微波辅助萃取扩散系数理论模拟值; D₀ 为普通加热回流扩散系数

为了进一步从实验证明 Res 的扩散系数在 MAE 情况下确实比普通加热回流的高,我们在相同的实验条件下(即与 MAE 相同的加热温度,溶剂,虎杖样品颗粒物大小等),对虎杖样品进行了 4 个普通加热回流实验,并计算其扩散系数,结果列于表 1 第 4 列。从表 1 第 5 列可见,在 MAE 情况下,Res 的扩散系数比普通加热回流的扩散系数提高了 20 倍。这更进一步说明了 MAE 是通过增强 TC 在基体内扩散速度的一个萃取过程。

4 结 论

本文以虎杖中 Res 的萃取为研究对象,在扩散理论的基础上首次建立了包含微波场、基体颗粒物大小、萃取温度和萃取时间等影响参数的动力学模型,全面考虑了 MAE 过程中各参数的影响,理论值和实验值有较好的吻合。说明了微波场的存在增强了 TC 在样品基体的扩散能力,即基体内有效扩散

系数增大。比较了 MAE 和普通加热回流条件下 Res 的扩散系数,结果表明,前者比后者高 20 倍。这更进一步说明了 MAE 的过程是一增强扩散的过程。

参考文献:

[1] NÖBREGA J A, TREVIASZ L C, ARAÚJO G C L, et al. Focused microwave assisted strategies for sample preparation [J]. Spectrochimica Acta Part B, 2002 (57): 1855—1876.

[2] VLORICA L A, RICHARD Y, JAM B, et al. Extraction of organic pollutants from solid samples using microwave energy [J]. Anal Chem, 1995, 67: 2096—2102.

[3] ZHANG Z, XIONG G, LI G, et al. Sample pretreatment with microwave assisted techniques [J]. Analytical Sciences, 2000, 16: 221.

[4] 潘学军,刘会洲,徐永源. 微波辅助提取(MAE)研究进展 [J]. 化学通报, 1999, 5: 7—14.

[5] 李核,李攻科,张展霞. 影响微波辅助萃取虎杖中白藜芦醇效率的一些重要操作参数[J]. 分析化学, 2003, 31(11): 1341—1344.

[6] THOSTENSON E T, CHOU T W. Microwave processing: fundamentals and applications [J]. Composites: Part A (Applied Science and manufacturing), 1999, 30: 1055—1071.

[7] CECILIA S E, ERLAND B. Analytical scale microwave assisted extraction[J]. J Chromatography A, 2000, 902: 227—250.

[8] SPIRO M, TOUMI K, KANLIAH M. The kinetics and mechanism of caffeine infusion from coffee: The hindrance factor in intra bean diffusion[J]. J Sci Food Agric, 1987, 46: 349—356.

[9] 耿信笃. 现代分离科学理论导引[M]. 西安: 西北大学出版社, 1990.

[10] 董翔,陈哲怡,张莉菲,等. 用光学方法研究玻璃微珠电流变液颗粒间的相互作用[J]. 化学物理学报, 2001, 14(5): 537—542.

[11] SPIRO M, SELWOOD R M. The kinetics and mechanism of caffeine infusion from coffee: the effect of particle size[J]. J Sci Food Agric, 1984, 35: 915—924.

A Kinetic Model for Microwave-Assisted Extraction under Closed Vessel Condition

LI He, ZHANG Zhan xia, LI Gong ke

(School of Chemistry and Chemical Engineering, Sun Yat sen University, Guangzhou 510275, China)

Abstract: Based on the Fick's diffusion law and using the electromagnetic enhanced diffusion theory, a kinetic model has been developed for microwave assisted extraction (MAE) under closed vessel condition. The effects of irradiation temperature and time, the microwave power and particle size on MAE were modeled. Except for the power, the experimental and modeling data of MAE were closed to each other and their diffusion coefficients of resveratrol were almost the same, indicating that the model developed was reasonable. Experimental data also revealed that the diffusion coefficients obtained by the MAE was enhanced by a factor of 20 in comparison with those obtained by the conventional reflux heating, this further demonstrates that the diffusion of target compound from the sample matrix is enhanced during the MAE process.

Key words: microwave assisted extraction; kinetic model; resveratrol