СӘТБАЕВ УНИВЕРСИТЕТІ SATBAYEV UNIVERSITY

Теоретические основы экстракции: растворители, коэффициенты распределения, законы диффузии и осмоса.

Лектор:

PhD, ассоц. профессор

Оңалбек Дамира Дүйсембекқызы

Введение в экстракцию

Экстракция — это процесс извлечения целевых компонентов (биологически активных веществ, алкалоидов, гликозидов, эфирных масел и др.) из природного или синтетического сырья с помощью различных растворителей.

Она широко применяется в фармацевтике, химии, пищевой и косметической промышленности.

Основная цель экстракции — максимально полное извлечение действующих веществ при сохранении их активности и чистоты.

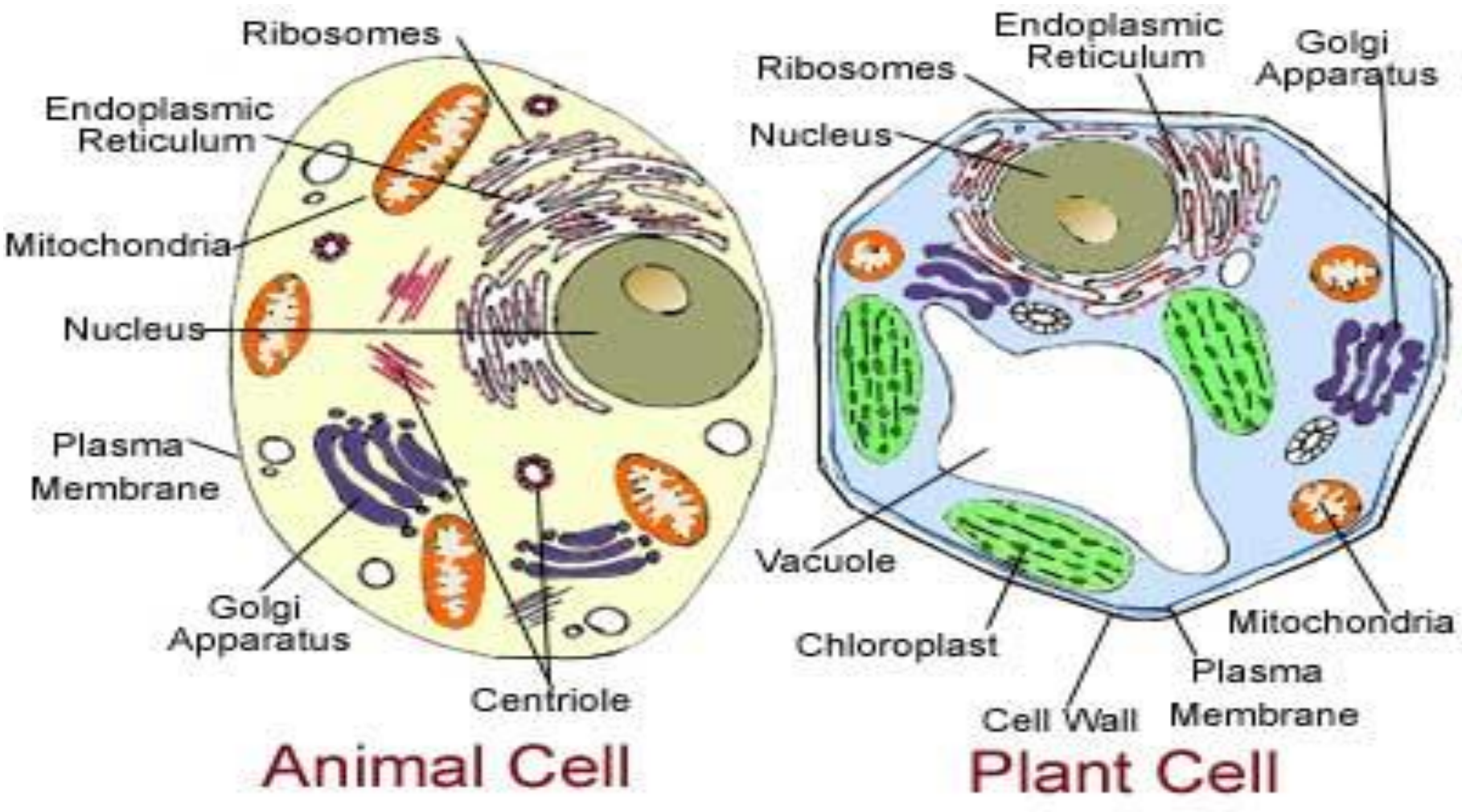


ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПРОЦЕССА ЭКСТРАГИРОВАНИЯ

Метод и режим экстрагирования (температура, время, pH экстрагента и др.) выбирают с учет следующих факторов:

- Вид сырья (свежее или высушенное сырье)
- Анатомо-морфологические особенности сырья
- Физико-химические свойства действующих веществ
- Влияние сопутствующих веществ

Объектами получения многих биологически активных веществ (БАВ) в фармацевтической технологии являются лекарственные растения, ткани и органы животных. В отличие от неживых материалов им присуща клеточная структура



Функции клеточной стенки растений

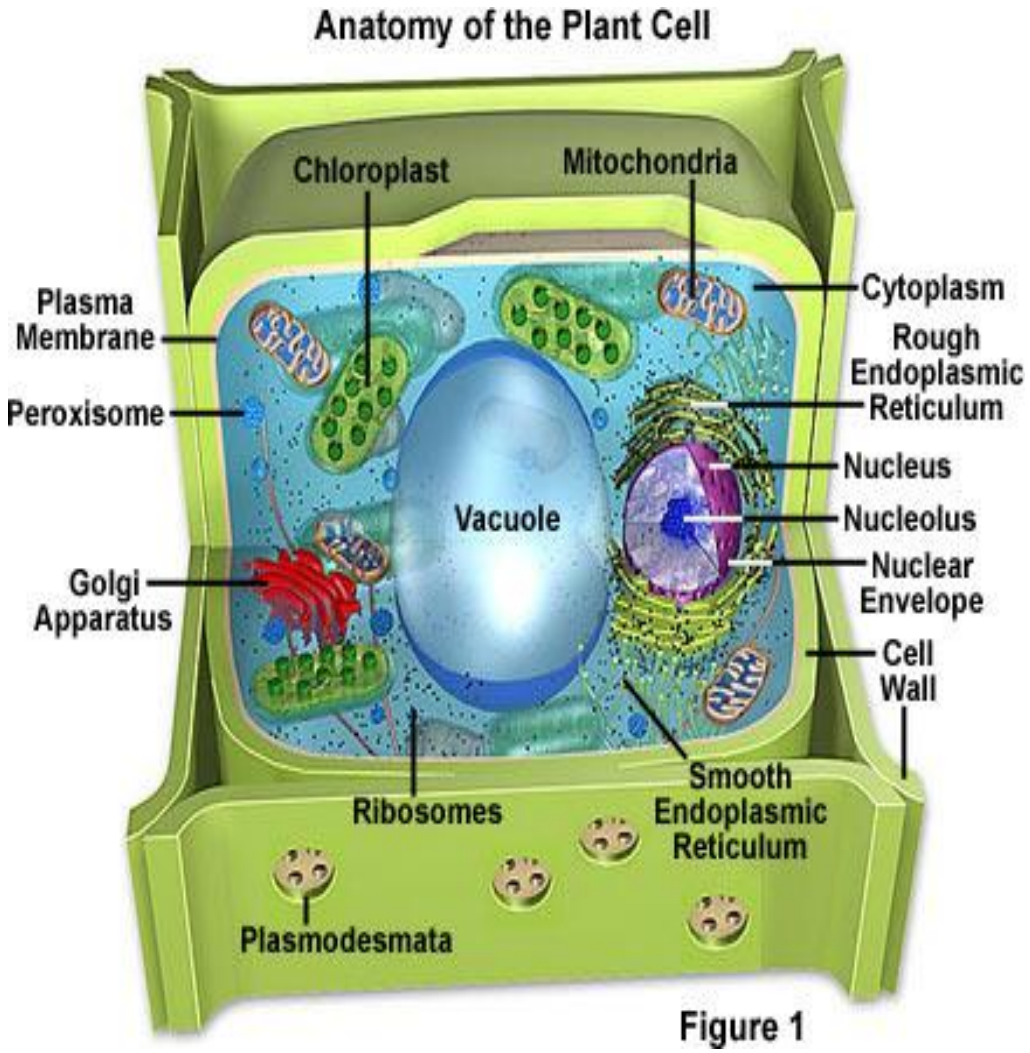
1. Обеспечение механической прочности

2. Ограничение и регуляция роста и формы клеток в зависимости от расположения целлюлозных миофибрилл;

3. Транспорт воды и минеральных веществ;

4. Защита от обезвоживания и проникновения болезнетворных микроорганизмов;

5. Запасание питательных веществ в некоторых клетках



В живых растительных клетках

основное сопротивление массопереносу оказывают мембраны.

клеточная стенка - полупроницаема для БАВ (внутри клетки) и осмотически пропускает экстрагент внутрь.

В мертвой клетке (высушенное сырье)

мембрана и цитоплазма денатурированы

основное сопротивление оказывают клеточные стенки

Вследствие денатурации цитоплазмы клеточная стенка - пористая перегородка и пропускает вещества в обе стороны.

Процесс извлечения из клетки принимает характер диализа (диффузии веществ в молекулярно-ионном состоянии)

При экстрагировании растительного материала чаще всего работают с высушенным сырьем



Процесс извлечения проходит в три стадии

- Смачивание сырья и проникновение экстрагента внутрь
- Образование первичного сока
- Массообмен

Стадии процесса извлечения:

1. стадия — смачивание сырья и проникновение экстрагента внутрь

Растительные материалы богаты гидрофильными веществами, они хорошо смачиваются водой.

Под действием капиллярных сил экстрагент пропитывает ЛРС, заполняет межклеточные пространства, а затем через поры в клеточных стенках и отчасти сквозь стенки проникает внутрь клеток.

Проникновение экстрагента внутрь клетки – **эндоосмос,** т.е. движение воды через пористую перегородку.

После проникновения воды внутрь растительной клетки первая стадия заканчивается.

Стадии процесса извлечения:

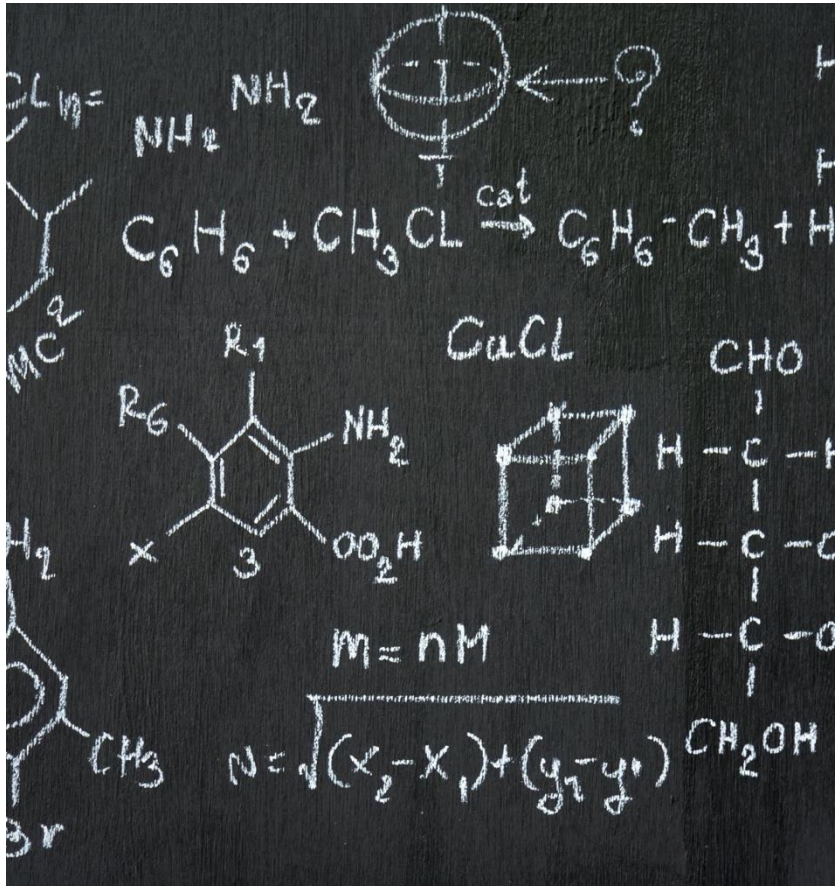
2 стадия – образование «первичного сока».

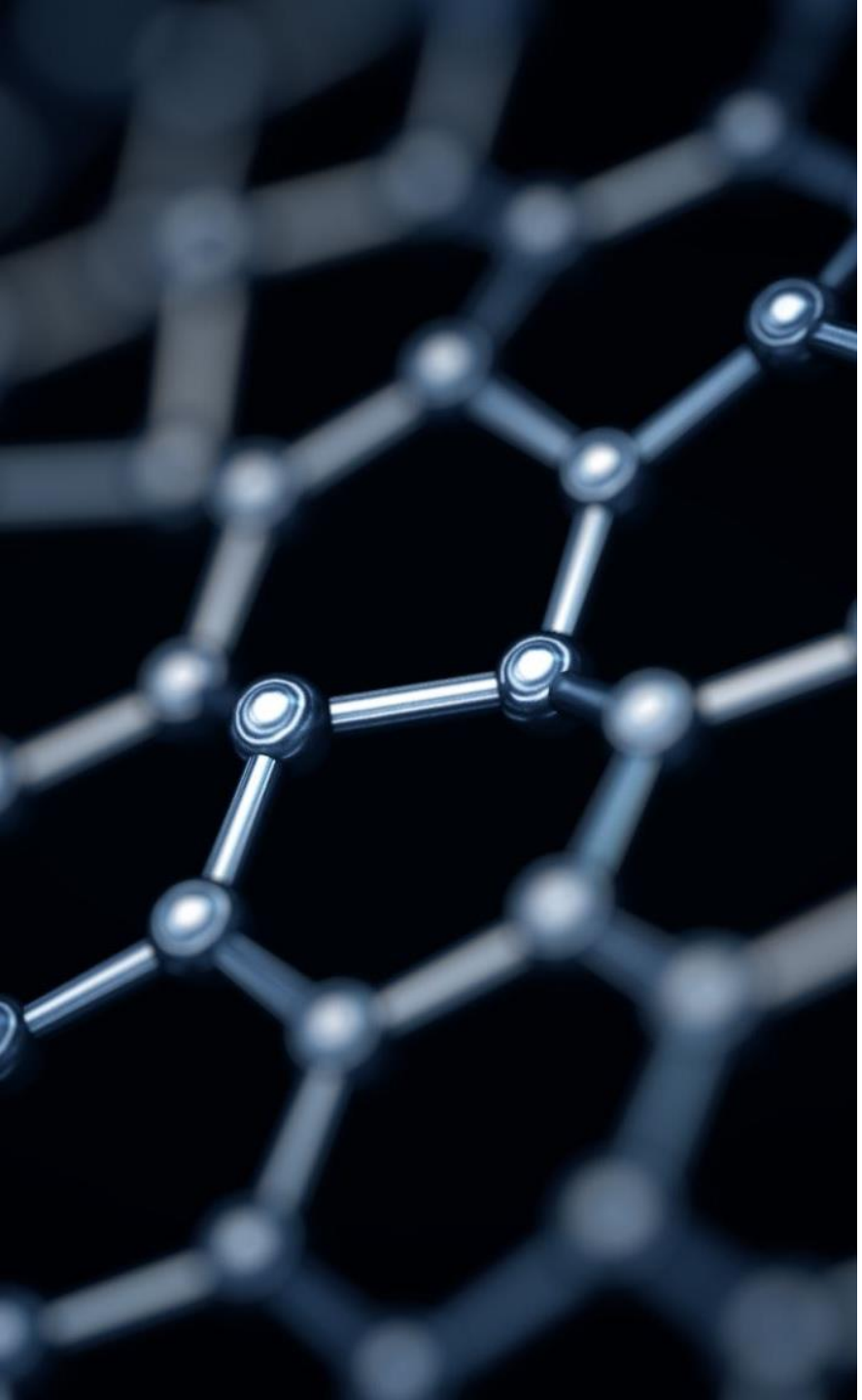
Внутри клеток экстрагент взаимодействует с находящимися в них веществами:

- ✓ вещества, способные образовывать истинные растворы, растворяются;
- ✓ неограниченно набухающие ВМС набухают и растворяются;
- ✓ ограниченно набухающие ВМС набухают, образуя гели.

Процесс растворения осложняется тем, что некоторые растворимые соединения адсорбционно связаны с нерастворимыми компонентами внутриклеточного содержимого.

Образованием внутри клеток концентрированного раствора растворимых веществ — **«первичного сока»** — заканчивается вторая стадия извлечения.





Стадии процесса извлечения:

3 стадия — массообмен - переход веществ из растительного материала в жидкую среду

В результате высокой концентрации «первичного сока» внутри клеток создается значительное осмотическое давление, вызывающее диффузионный обмен между содержимым клеток и окружающей их жидкостью с меньшим осмотическим давлением, обмен идет до момента уравнивания осмотического давления по обе стороны клеточных оболочек.

В первую очередь из клеток диффундируют НМВ, медленнее диффундируют более сложные ВМС. Наименьшей скоростью диффузии обладают коллоидные растворы.

Процессы **экзо- и эндоосмоса** протекают спонтанно (самопроизвольно), пока концентрации р-ров снаружи и внутри клетки не станут одинаковыми. При этом происходит молекулярная и конвективная диффузии

Растворители в экстракции

- Выбор растворителя является ключевым фактором.

Требования к растворителям:

- Высокая растворяющая способность по отношению к целевым веществам.
- Селективность (растворение нужного вещества при минимальном извлечении примесей).
- Химическая инертность по отношению к извлекаемым веществам и оборудованию.
- Летучесть (для легкого удаления после экстракции).
- Безопасность и нетоксичность (особенно для фармацевтических препаратов).
- Экономичность и доступность.

Наиболее часто используемые растворители:

- **Полярные**: вода, этанол, метанол, ацетон.
- **Слабо полярные**: этилацетат, бутанол, хлороформ.
- **Неполярные**: эфир, бензол, гексан.

Пример: алкалоиды лучше извлекаются органическими растворителями, гликозиды — водно-спиртовыми.

Коэффициент распределения (закон Нернста)

При экстракции из жидких систем действующее вещество распределяется между двумя несмешивающимися растворителями.

- **Коэффициент распределения (K):**

$$K = \frac{C_1}{C_2}$$

где:

- C_1 — концентрация вещества в органическом растворителе,
- C_2 — концентрация в водной фазе.

Заключения:

- Чем выше K, тем эффективнее экстракция.
- При многократной экстракции меньшими порциями растворителя извлечение происходит более полно, чем при однократной обработке большим объёмом.
- Экстракция протекает до достижения равновесия.

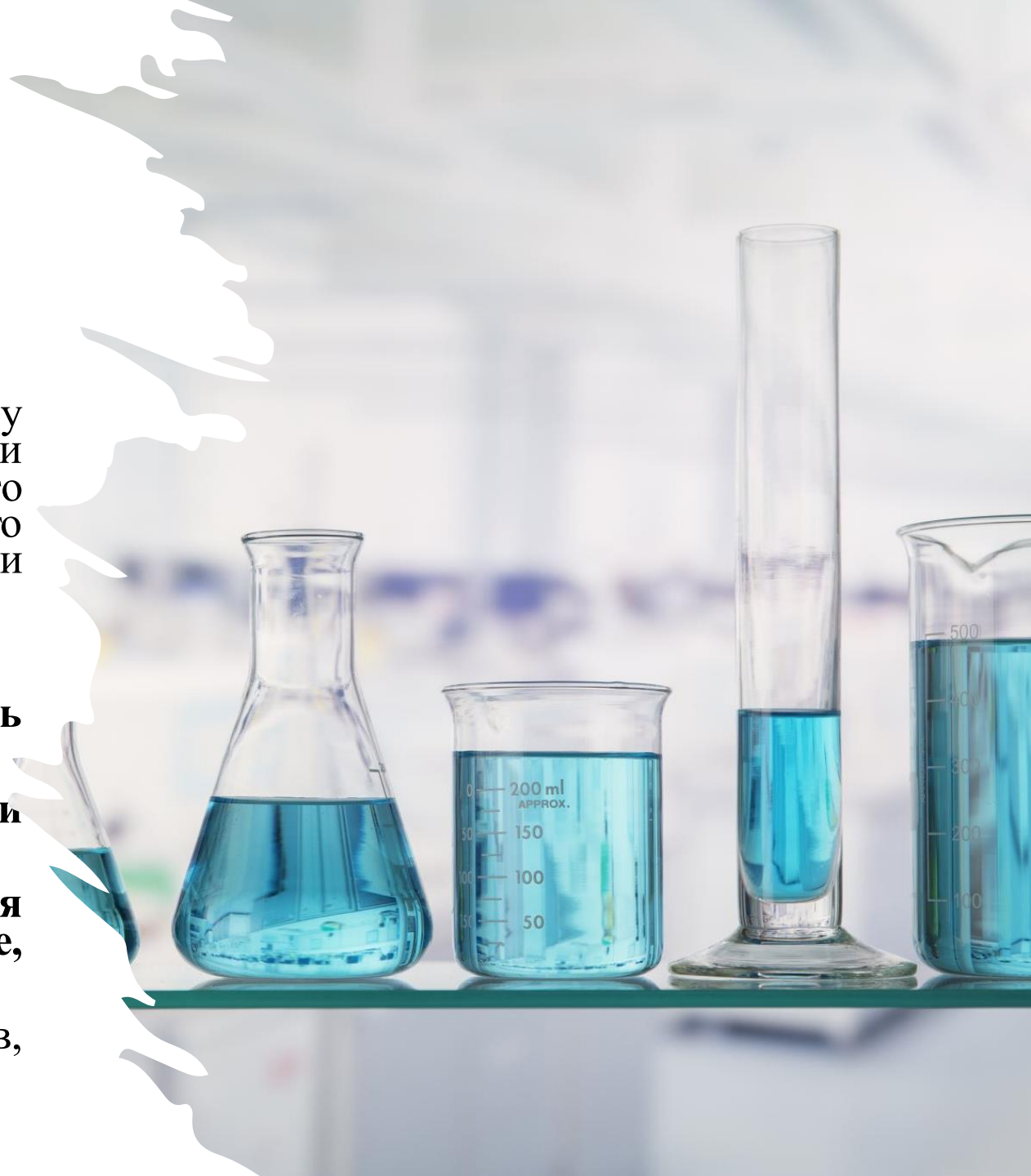
Закон Нернста

Формулировка:

Если вещество распределяется между двумя несмешивающимися растворителями (например, вода и органический растворитель), то при равновесии отношение концентраций этого вещества в каждой фазе постоянно при фиксированной температуре.

Зачем нужен закон Нернста?

- Позволяет **рассчитать эффективность экстракции**.
- Помогает определить **оптимальный объём и кратность экстракции**.
- Обосновывает, что **многократная экстракция малыми порциями растворителя эффективнее, чем однократная большим объёмом**.
- Используется при выделении алкалоидов, гликозидов, антибиотиков и др.



Молекулярная диффузия

осуществляется за счет хаотического движения молекул и зависит от запаса кинетической энергии частиц (молекул).

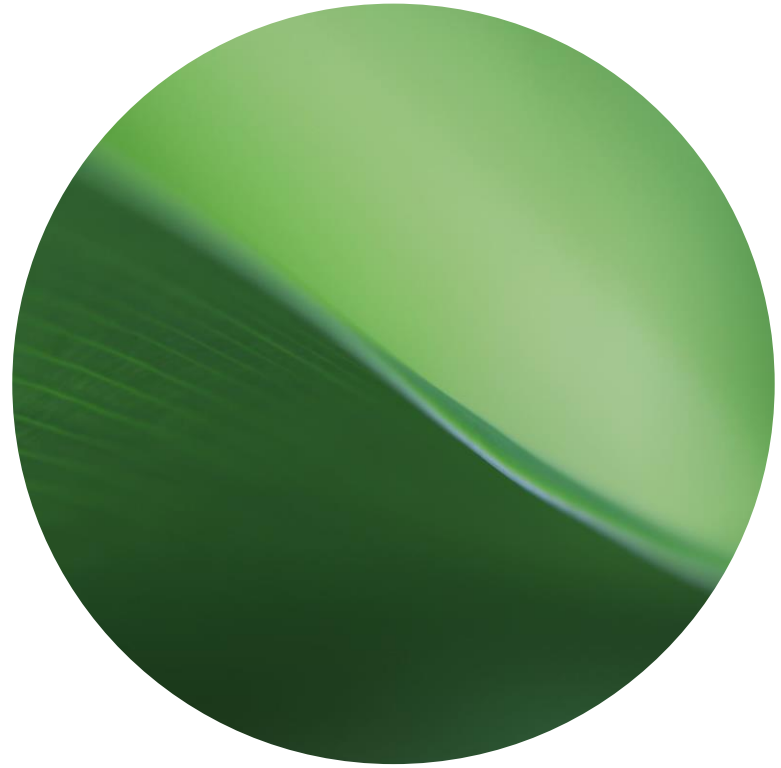
Скорость молекулярной диффузии зависит:

от температуры извлечения (при ее увеличении возрастает скорость движения молекул),

величины поверхности разделяющей вещества,

толщины слоя, через который проходит диффузия.

времени (чем дольше диффузия, тем большее количество вещества переходит из одной среды в другую).



Диффузия как основа экстракции

Диффузия — это процесс самопроизвольного перемещения молекул из области с высокой концентрацией в область с низкой концентрацией.

Закон Фика (I):

$$J = -D\frac{dC}{dx}$$

где:

- J — поток вещества,
- D — коэффициент диффузии,
- $\frac{dC}{dx}$ — градиент концентрации.

Значение: скорость экстракции зависит от температуры, вязкости растворителя, размеров частиц сырья и степени их измельчения.

Практические выводы:

- Увеличение температуры ускоряет диффузию.
- Измельчённое сырьё экстрагируется быстрее.
- Перемешивание раствора повышает скорость экстракции.

Диффузия как основа экстракции

Закон Фика II:
Скорость изменения концентрации вещества в данной точке пропорциональна изменению градиента концентрации:

$$\frac{dC}{dt} = D\frac{d^2C}{dx^2}$$

где $C(x,t)$ - концентрация, D - коэффициент диффузии.

Зачем нужны законы Фика?

- Объясняют, **как и с какой скоростью вещество выходит из растительного сырья в растворитель**.
- Позволяют учитывать факторы, влияющие на скорость экстракции:
  - температура,
  - измельчение сырья,
  - перемешивание,
  - вязкость растворителя.
- Используются для **оптимизации времени экстракции** и выбора условий процесса.

Механизм диффузии через клеточную мембрану

- молекулы диффундирующего вещества сорбируются материалом мембраны,
- диффундируют через мембрану,
- десорбируются с другой ее стороны

скорость диффузии лимитируется градиентом концентрации и свойствами мембраны

диффузия приобретает характер свободной молекулярной диффузии (но ограниченной узкими просветами пор и длинной ходов капилляров выноса веществ к наружной поверхности)

внутренняя диффузия характеризуется коэффициентом внутренней диффузии **Dвн**. величина коэффициента внутренней диффузии в порах растительного материала 10^{-12}-10^{-11} $м^2/с$, что для тех же веществ на 2-3 порядка меньше величины коэффициента свободной молекулярной диффузии 10^{-9}-10^{-8} $м^2/с$.

Конвективная диффузия

Перенос вещества в результате причин, вызывающих перемещение жидкости: сотрясение, изменение температуры, перемешивание;

Осуществляется значительно быстрее и происходит за счет конвекции, т.е. переноса массы из одного места подвижной среды в другую.

Таким образом, извлечение действующих веществ из ЛРС проистекает за счет процессов **диффузии, десорбции, растворения, диализа и вымывания,** которые идут самопроизвольно и одновременно.

Осмос и его роль в экстракции

Осмос — процесс перехода растворителя через полупроницаемую мембрану из менее концентрированного раствора в более концентрированный.

Осмотическое давление (π):

$$\pi = CRT$$

где:

- C — молярная концентрация,
- R — универсальная газовая постоянная,
- T — абсолютная температура.

Значение для экстракции:

- В растительном сырье клетки окружены оболочкой, которая играет роль полупроницаемой мембраны.
- При контакте с растворителем возникает осмотический поток, способствующий выходу биологически активных веществ.
- Увеличение разницы концентраций усиливает процесс.

Зачем нужен закон осмоса:

Объясняет, **почему вещества выходят из клеток растений в растворитель**: клеточные оболочки действуют как полупроницаемые мембраны.

Позволяет понять, как **разность концентраций между клеточным соком и экстрагентом** вызывает движение растворителя и перенос растворённых веществ.

Используется при разработке методов мацерации и перколяции в фармацевтической технологии.

Практическая роль этих законов

- **Закон Нернста** → определяет равновесие и эффективность извлечения (какая часть вещества уйдёт в растворитель).
- **Законы Фика** → описывают скорость извлечения (насколько быстро вещество перейдёт в растворитель).
- **Закон осмоса** → объясняет начальный этап выхода веществ из клеток в растворитель через мембраны.

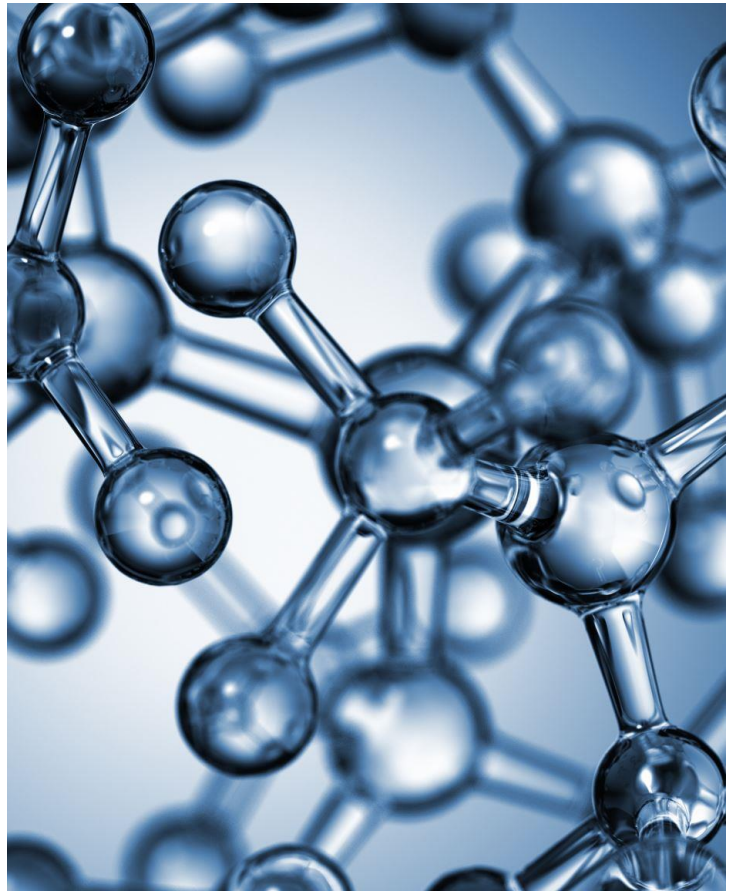
👉 Вместе они дают **полное теоретическое обоснование экстракции**:

- Осмос «выводит» вещество из клеток.
- Диффузия переносит его в растворитель.
- Закон распределения определяет, в какой фазе вещество окажется после установления равновесия.



Факторы, влияющие на эффективность экстракции

- Химическая природа растворителя.
- Температура и давление процесса.
- Степень измельчения сырья.
- Соотношение «сырьё – экстрагент».
- Время экстракции.
- Перемешивание и многократное извлечение.



Спасибо за внимание!