

基于机器学习和 DFT 计算从玳玳花中同步提取精油和果胶的绿色方法和机理见解

周鹏 李湘洲* 鲁颖 王宇晴

(中南林业科技大学 材料科学与工程学院, 长沙, 410004)

摘要:【目的】随着《巴黎气候协定》和双碳政策的提出, 生产企业现在正面临绿色低碳转型。优化生产工艺、提高原料利用率、降低生产成本是促进植物提取物产业绿色低碳发展的重要技术途径。【方法】本研究巧妙地利用低共熔溶剂(DES)与水蒸气蒸馏法结合, 实现从玳玳花中绿色高效地同步提取精油与果胶。利用单因素实验、响应面设计、人工神经网络以及遗传算法分析, 精确地确定同步提取过程的最优条件。通过物理表征技术和密度泛函理论(DFT)计算, 探讨了同步提取过程的潜在机理。【结果】精准地确定了最佳工艺参数为 DES 浓度 11.2%, 液料比 10.6 mL/g 和蒸馏时间 56.0 min, 精油和果胶的得率分别为 $1.33 \pm 0.07\%$ 和 $14.50 \pm 0.58\%$ 。该工艺显著提高了精油得率, 降低了溶剂用量并缩短了蒸馏时间, 呈现出了显著的进步性。同时, 通过观察提取过程中的原料外貌结构变化并且结合密度泛函理论从分子层面进行了计算, 证实了 DES 对果胶的溶解能力远高于水对果胶的溶解能力, 能够强化对细胞壁的破坏作用, 促进精油快速地从植物组织内扩散出来。【结论】这项研究工作提出了一种绿色高效的植物精油与果胶同步提取的策略, 为其他含有精油和果胶的植物花朵的开发利用提供借鉴。