

O QUE A ISOTERMA DE SORÇÃO DIZ SOBRE O PRODUTO

Tânia M. M. Shibata
METER Group LatAm

**UTILIZE A
FERRAMENTA
PARA BAIXAR A
APRESENTAÇÃO,
ENVIAR AS SUAS
PERGUNTAS E
SUGESTÕES**



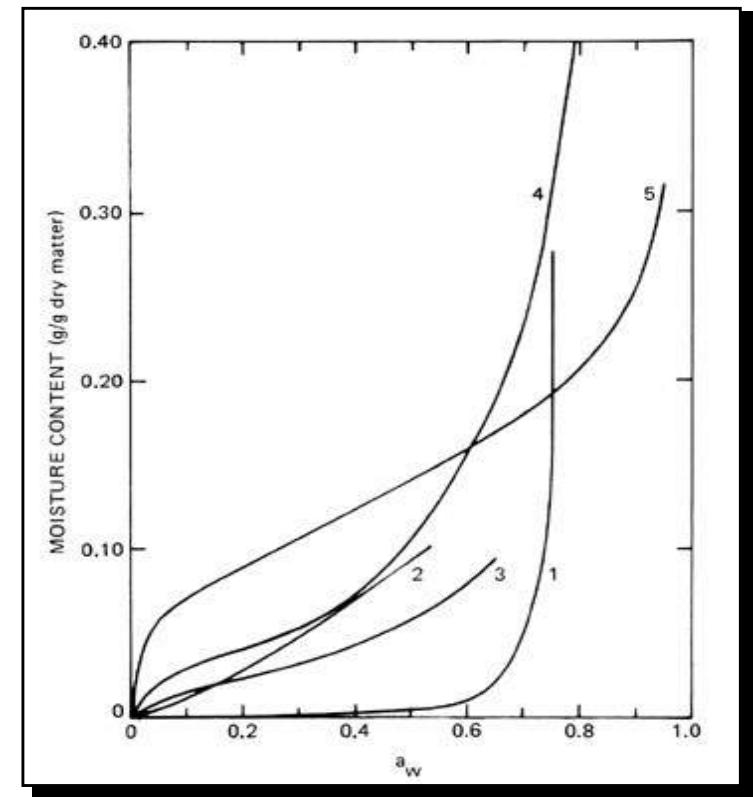
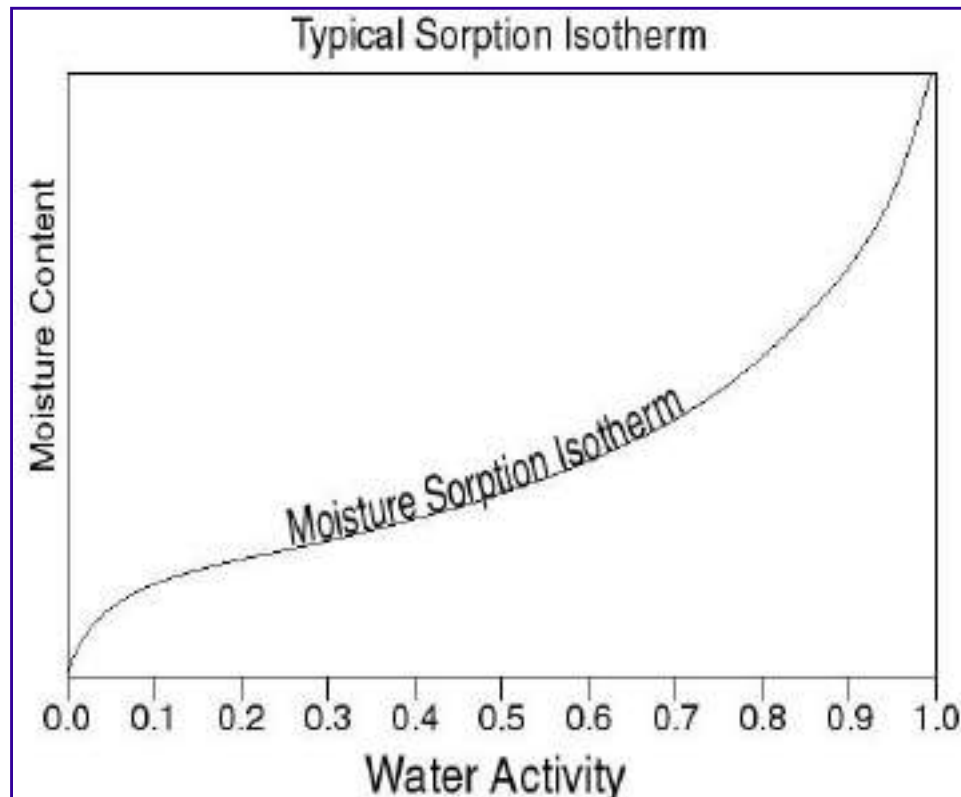
1 - O que é isoterma de sorção de água? 14/04/2022

2 - Como construir uma isoterma de sorção de água? 26/05/2022

3 - O que a isoterma de sorção de água diz sobre o meu
produto? 30/06/2022

O QUE É ISOTERMA DE SORÇÃO

ISOTERMA DE SORÇÃO DE VAPOR DE ÁGUA



MÉTODOS PARA GERAR ISOTERMAS DE SORÇÃO DE UMIDADE:

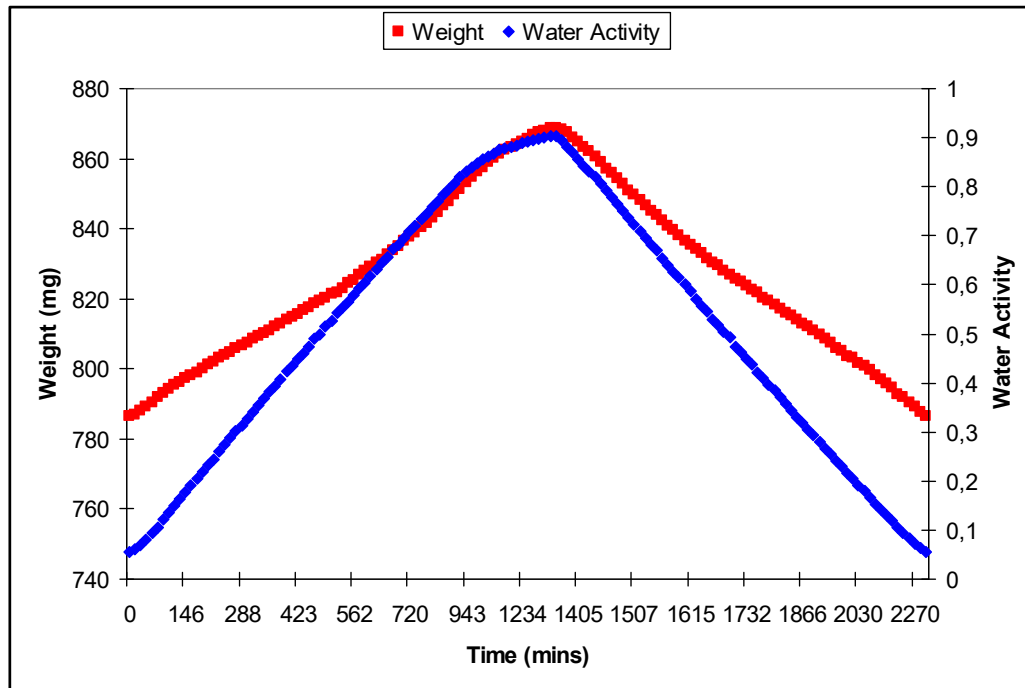
ESTÁTICO E DINÂMICO

MÉTODOS PARA GERAR ISOTERMA DE SORÇÃO: DINÂMICO E ESTÁTICO

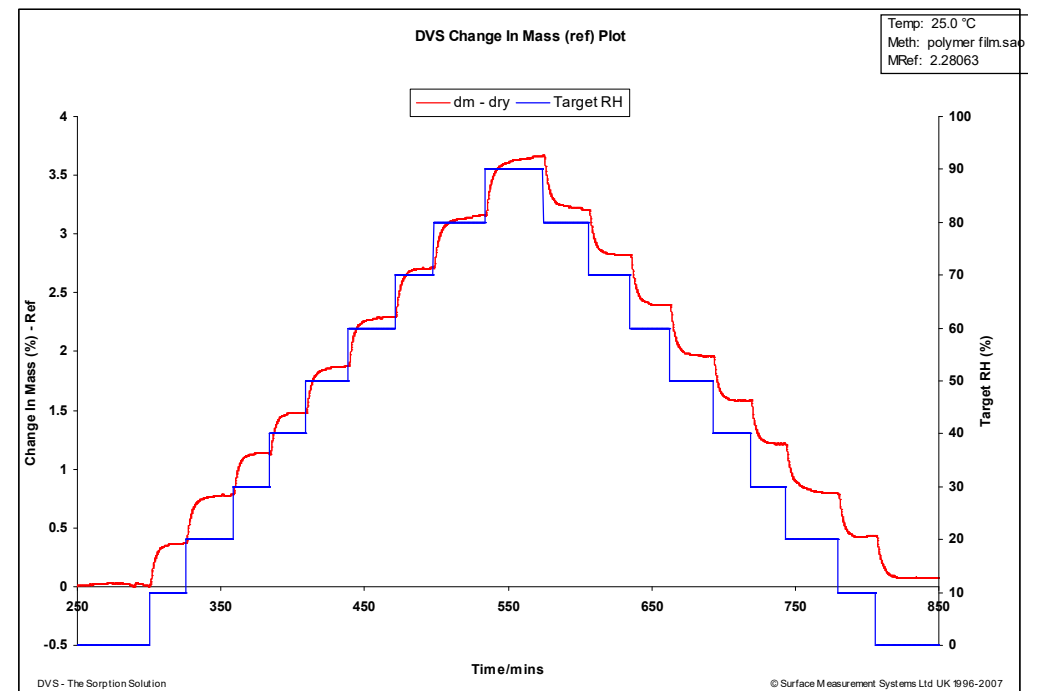


COMPARAÇÃO DOS MÉTODOS DDI E DVS

DDI



DVS



**POR QUE TRAÇAR ISOTERMA DE
SORÇÃO DE UMIDADE?**

POR QUE TRAÇAR ISOTERMAS DE SORÇÃO

Determinação da a_w crítica para o produto

Estabilidade da taxa de reação química

- Umidade da monocamada

Mudanças Físicas

- Alteração da textura
- Aglomeração e aglutinação de pós

Requisitos para embalagem

Mistura de ingredientes secos

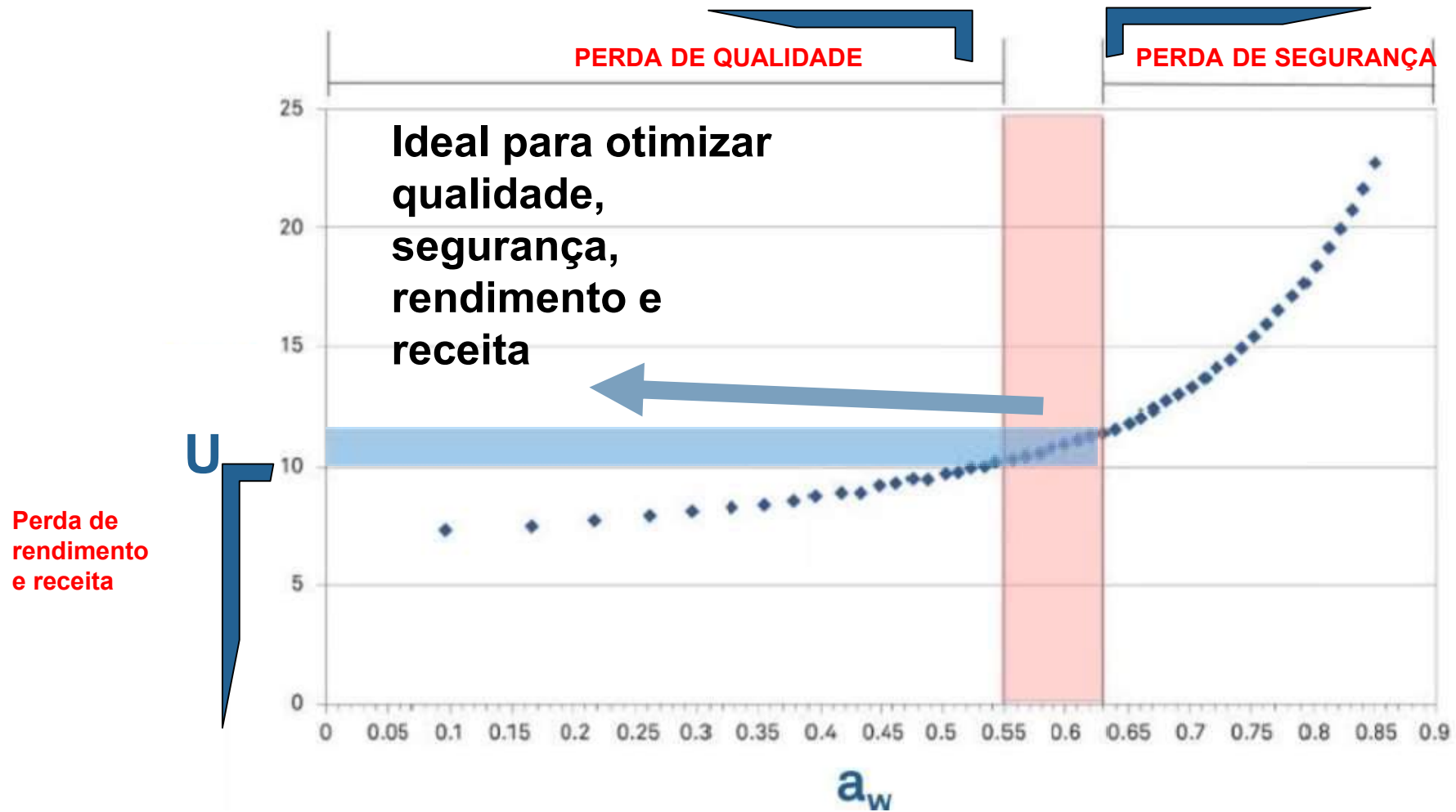
Alteração de temperatura

Estimar vida de prateleira

Determinação da umidade rapidamente



LIMITES DE QUALIDADE, SEGURANÇA E RENDIMENTO DO SEU PRODUTO



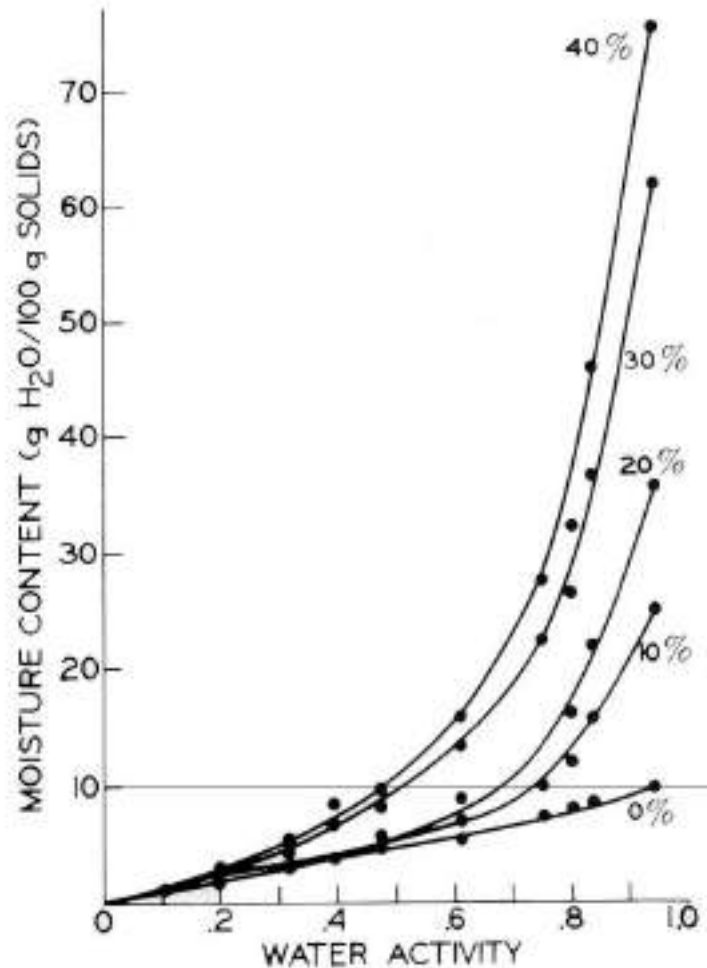
POR QUE TRAÇAR ISOTERMAS DE SORÇÃO

Outra função da isoterma de sorção é

- Selecionar umectantes
- Estimar o efeito da adição de soluto na a_w final
- Calcular a quantidade de soluto necessária para atingir a a_w



APLICAÇÕES PARA ISOTERMAS



Isoterma de sorção de CMC contendo diferentes quantidades de glicerol a 37°C.

Labuza, T. P., Heidelbaugh, N. D., Silver, M., and Karel, M. (1971). Oxidation at intermediate moisture contents. *Journal of American Oil Chemists Society*. 48:86-90.



APLICAÇÕES PARA ISOTERMAS



Formulação	Umidade (%)	a_w	Textura
Normal	15	0,785	Macia
Adição de 10% glicerol	15	0,585*	Macia

*Predição de Ross e Norish $a_w = 0,684$



APLICAÇÕES PARA ISOTERMAS

SELEÇÃO DE FORNECEDORES

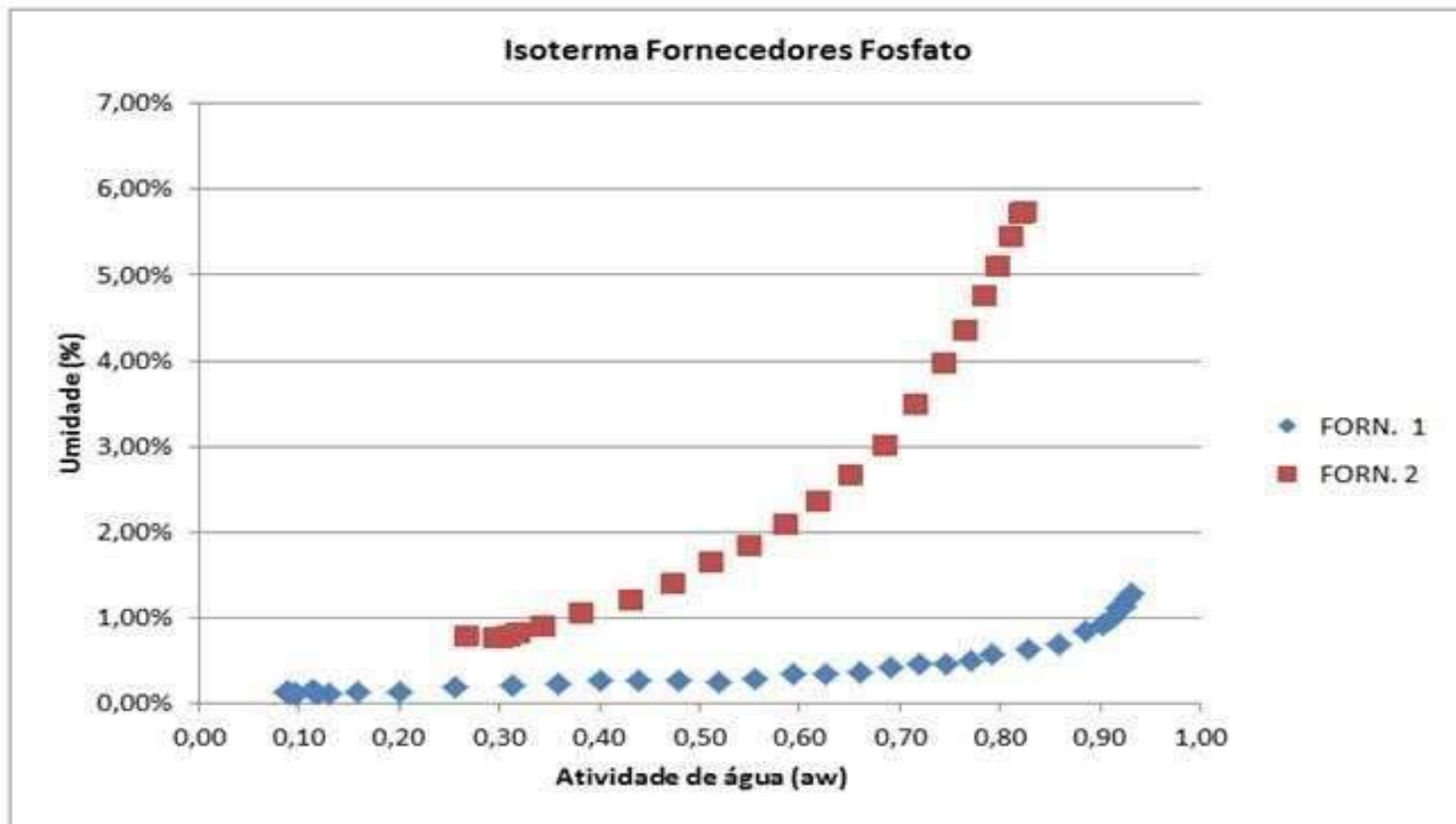
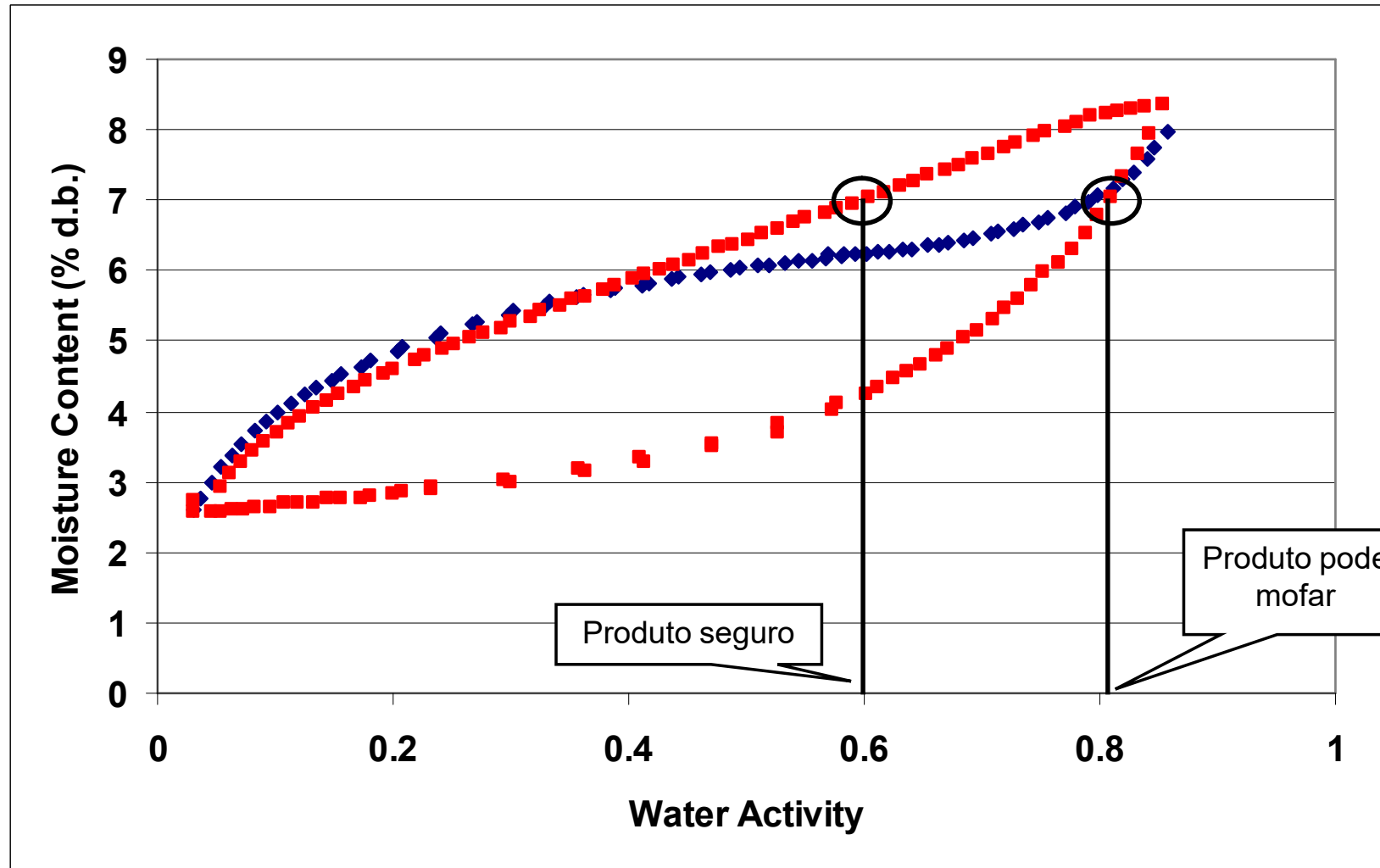


Gráfico 1. Curvas de Isotermas dos diferentes fornecedores

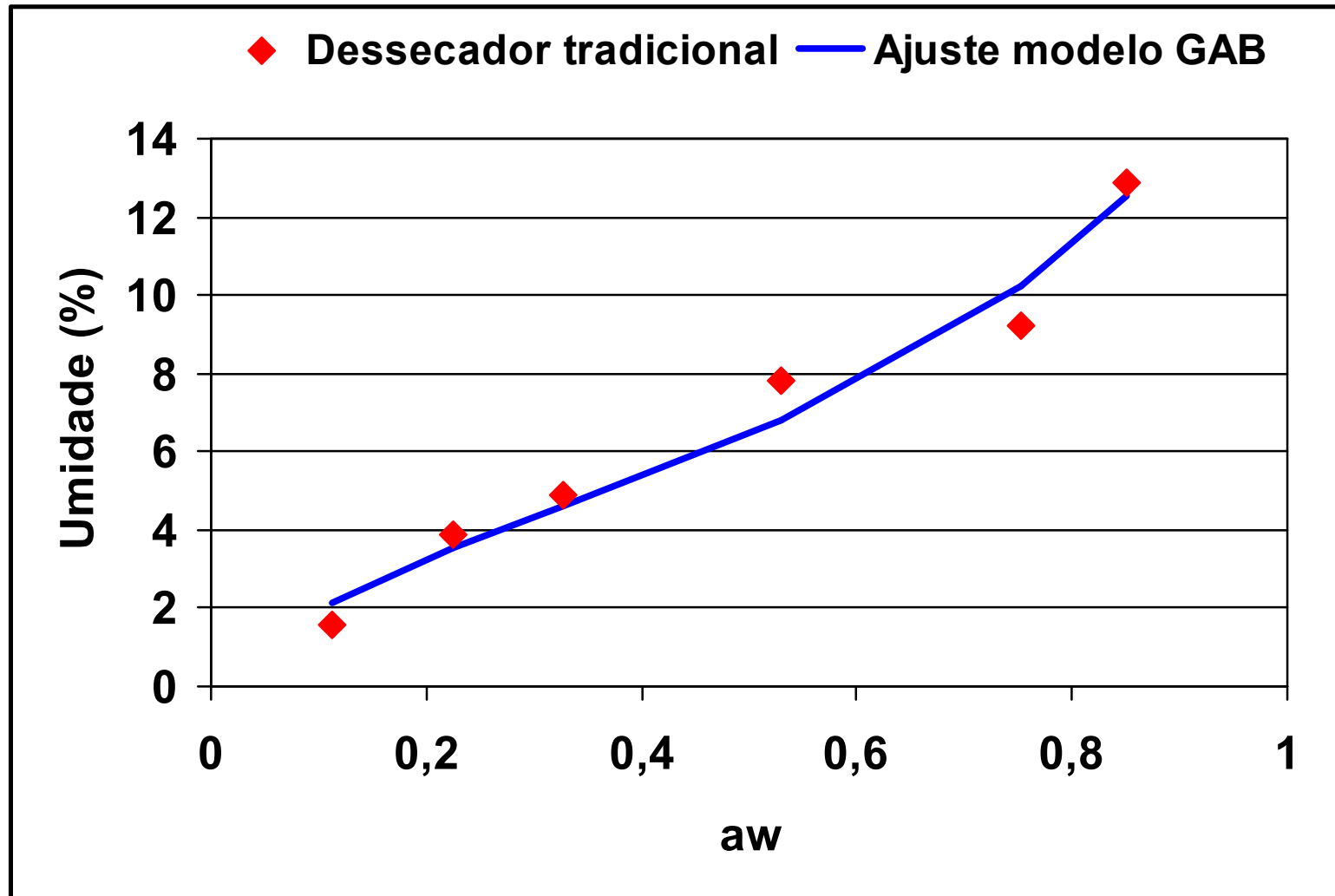


VOCÊ SABE O QUE ACONTECE COM O SEU PRODUTO QUANDO É SECADO E HIDRATADO?



MODELOS MATEMÁTICOS

INTERPOLAÇÃO COM MODELO



MODELOS ISOTERMA

BET (Brunauer, Emmet and Teller) (0-0,5a_w)

$$\frac{a_w}{(1 - a_w)m} = \frac{1}{m_0 C} + \frac{a_w (C - 1)}{m_0 C}$$

GAB (Guggenheim, Anderson, de Boer) (0-0,85a_w)

$$m = \frac{C_1 k m_0 a_w}{(1 - k a_w)(1 - k a_w + C_1 k a_w)}$$

m = (moisture) umidade g/g sólido na a_w

m₀ = umidade da monocamada

C, C₁ e k = constantes



Edward Teller, Paul Emmett and Stephen Brunauer, ca. 1960s.



MODELOS ISOTERMA

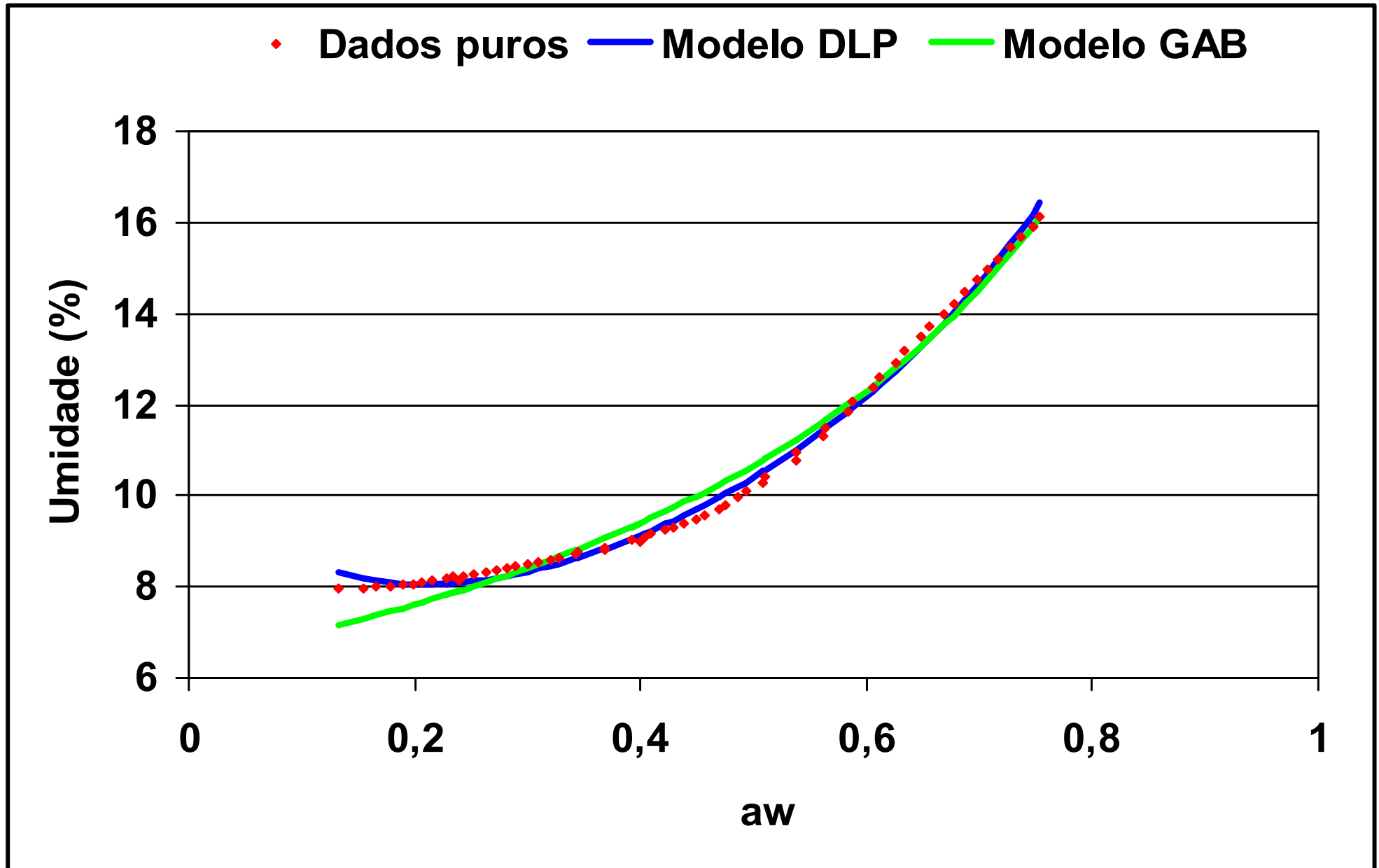
DLP (Double Log Polynomial) (0 a 0,95 a_w)

$$m = b_3x^3 + b_2x^2 + b_1x + b_0$$

$$x = \ln(-\ln(a_w)) \text{ (Valor de Chi)}$$

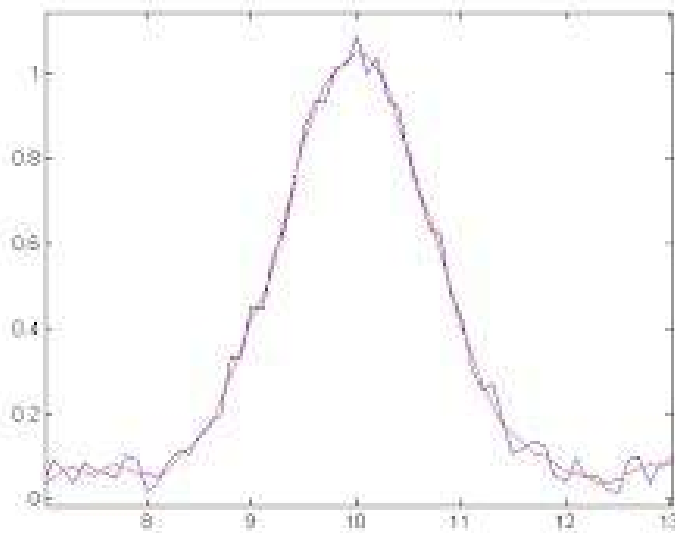


MODELOS ISOTERMA - COMPARAÇÃO

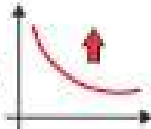
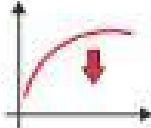



2º DERIVADA SAVITSKY/GOLAY

“Derivada de segunda ordem, extremos, sentido das concavidades e pontos de inflexão”



Propriedade da derivada segunda

Derivada segunda	Função	Gráfico
$f''(x) > 0$	concavidade para cima	
$f''(x) < 0$	concavidade para baixo	
$f''(x) = 0$	mudança de concavidade inflexão	

O algoritmo **Savitzky-Golay** é um método usado no processamento de sinais para suavizar uma curva e extrair derivadas sucessivas . Foi descrito em 1964 por [Abraham Savitzky](#) e [Marcel Golay](#) .



A Historic Collaboration

July marked the 25th anniversary of the publication in *ANALYTICAL CHEMISTRY* of Abraham Savitzky and Marcel Golay's landmark paper describing a smoothing algorithm for the reduction of random noise from measured spectra (*Anal. Chem.* 1964, 36, 1627-39). The digital smoothing filters they described have been used extensively in data analysis because they are versatile and easy to implement.

When the paper was published, both scientists were employed by the Perkin-Elmer Corporation; Savitzky as an instrumentation specialist in the research department of the Instrument Division and Golay as a senior research scientist. Golay, an electrical engineer, retired in 1965

from the U.S. Signal Corps Engineering Laboratories (Fort Monmouth, NJ) and began a second career as a consultant to P-E. This 34-year association lasted until his death (see p. 922 A).

Savitzky met Golay when he was a graduate student at Columbia University working on the development of a double-beam spectrophotometer that used a Golay IR detector. After receiving his Ph.D. in physical chemistry in 1949, Savitzky was employed by P-E as an engineer developing IR process control instrumentation. Later he was involved in P-E's initial GC research and in building P-E's earliest prototype GC instrument. In 1960 he became involved in the emerging field of computer-assisted instruments and, as a principal scientist, led programming teams in the development of P-E's IR software for the microcomputer. Savitzky retired in 1985 to form his own consulting firm for software development and information services (Silvermine Resources, Inc.). On the occasion of the 25th anniversary of this classic work, Savitzky looks back at the genesis of the publication.



GOLAY



SAVITZKY



ATIVIDADE DE ÁGUA CRÍTICA

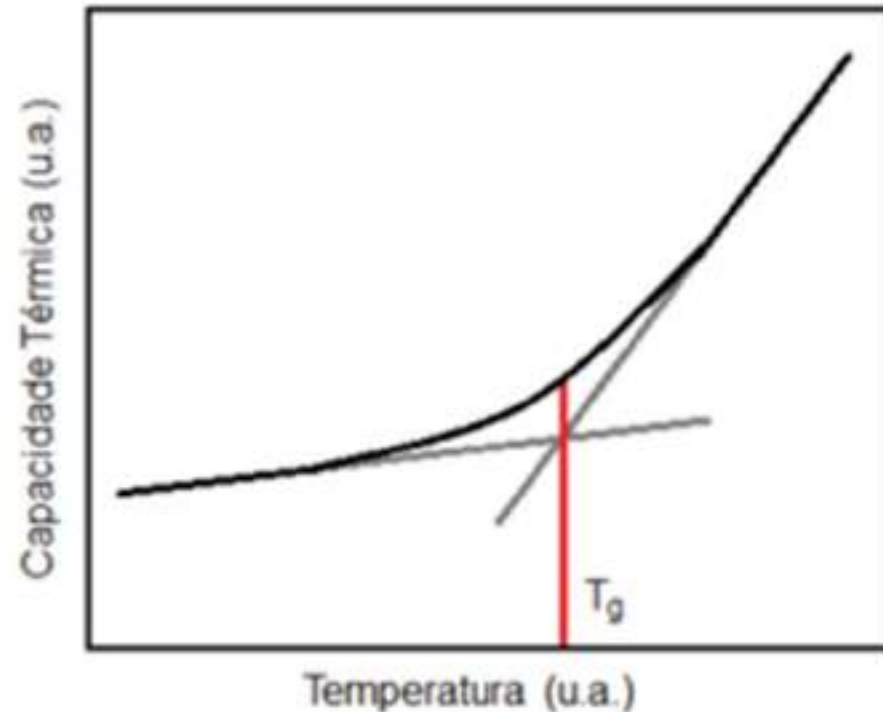
TRANSIÇÃO VÍTREA E AWC

- A transição vítrea é a transição reversível em materiais amorfos (ou em regiões amorfas de materiais semi-cristalinos) entre um estado duro e relativamente rígido e um estado mole e "borrachoso" (como um líquido de ultra-alta viscosidade).
- Um sólido amorfo que exhibe uma transição vítrea é dito vítreo
- Apesar de uma mudança profunda nas propriedades físicas de um material quando da sua transição vítrea, esse processo não é uma mudança de fase (como fusão ou solidificação), mas sim um fenômeno que se estende ao longo de uma faixa de temperatura definido por uma série de convenções.
- Tais convenções incluem uma constante de taxa de resfriamento (20 K/min) e um limiar de viscosidade de 10^{12} Pa·s, entre outros parâmetros.

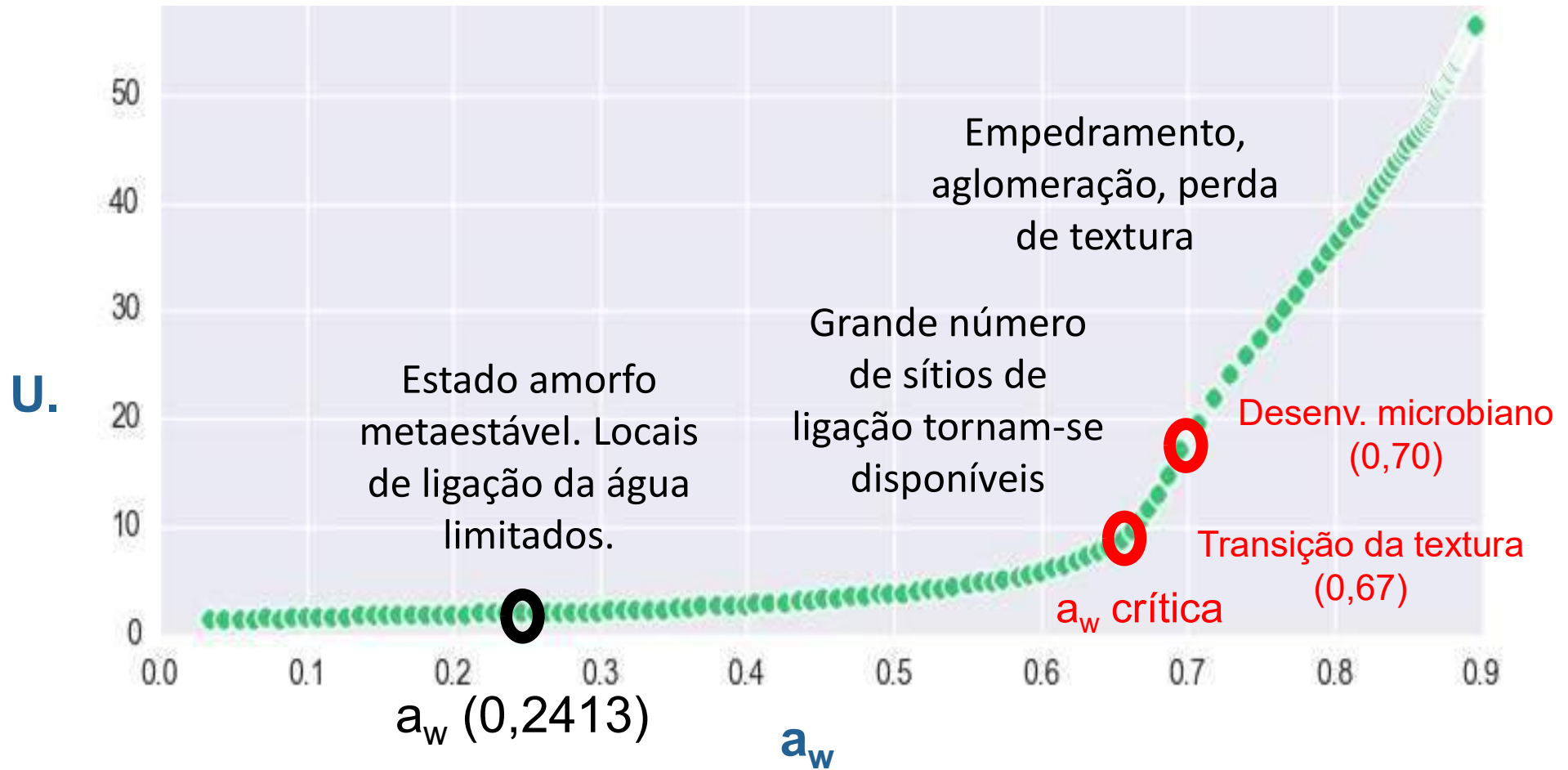


TEMPERATURA T_g

Determinação da T_g por técnica de DSC (calorimetria diferencial de varredura), mostrando a capacidade térmica em função da temperatura. A T_g é o ponto de intersecção das retas cinzas. (*u.a.* = *unidades arbitrárias*)

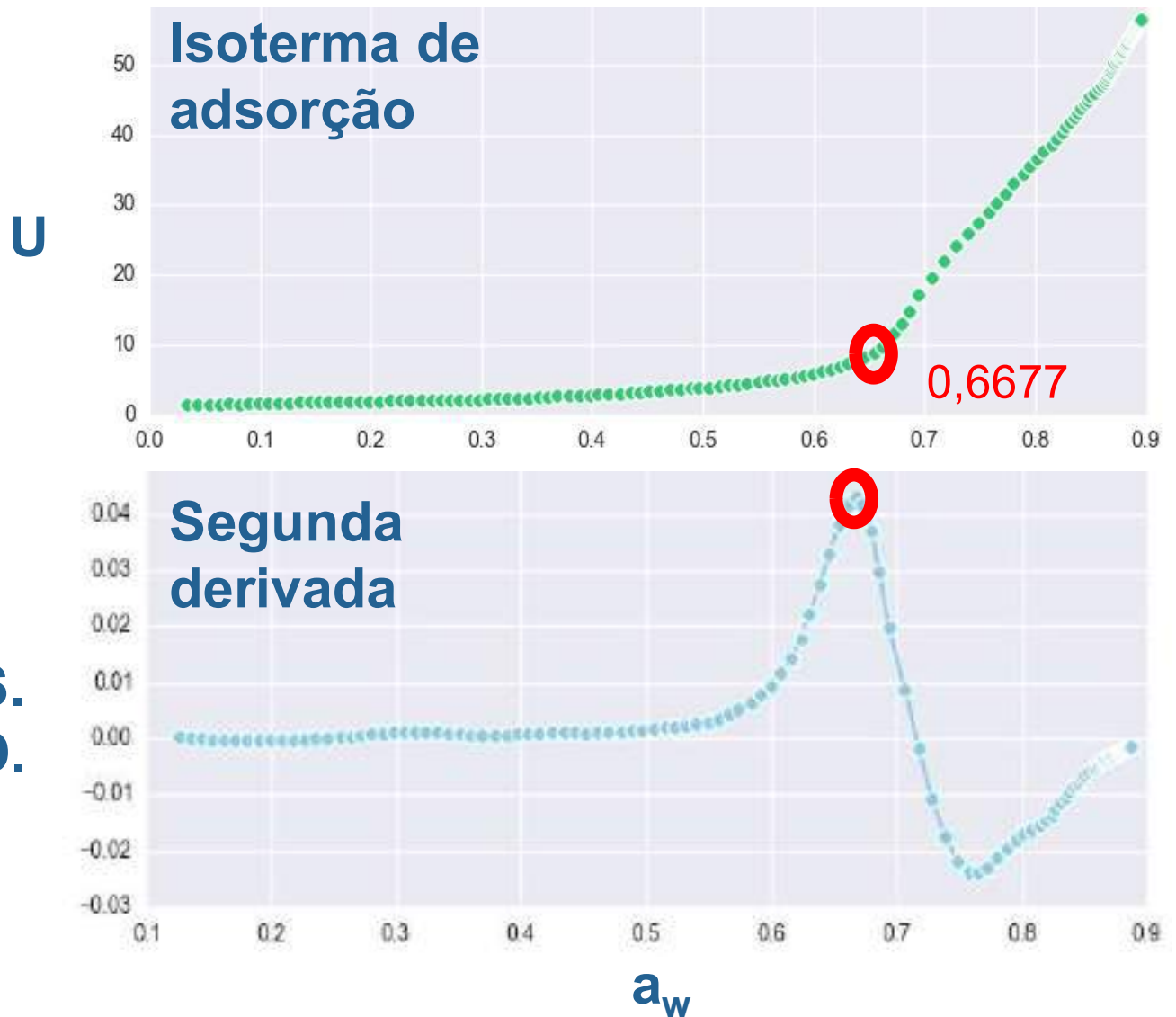


Atividade de água crítica



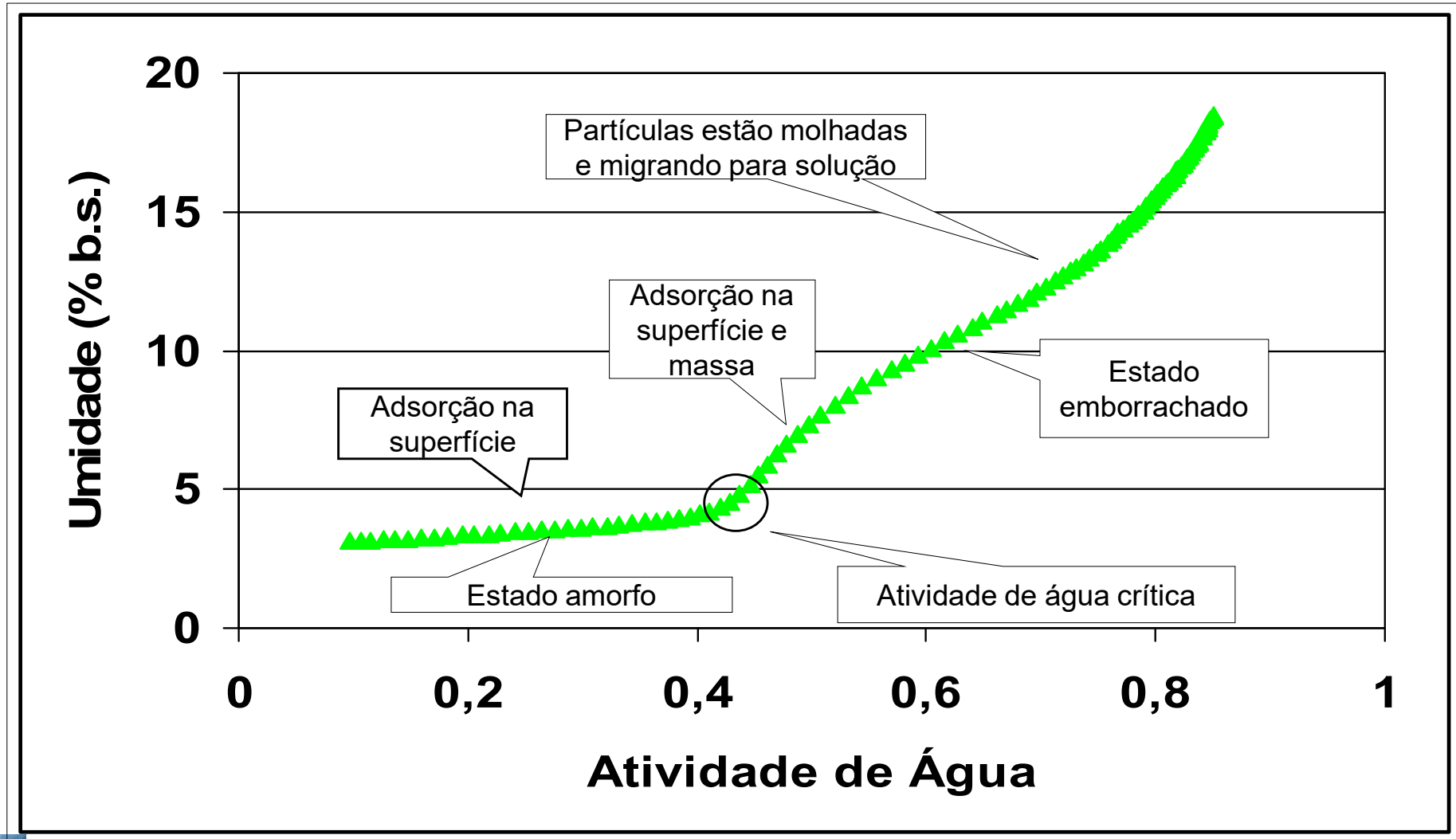
Atividade de água crítica

- Inicie com a isoterma de adsorção.
- Obtenha a segunda derivada.
- Identifique o(s) ponto(s) onde a umidade aumenta mais rapidamente (picos).
- Os pontos se correlacionam com a mudança de textura.



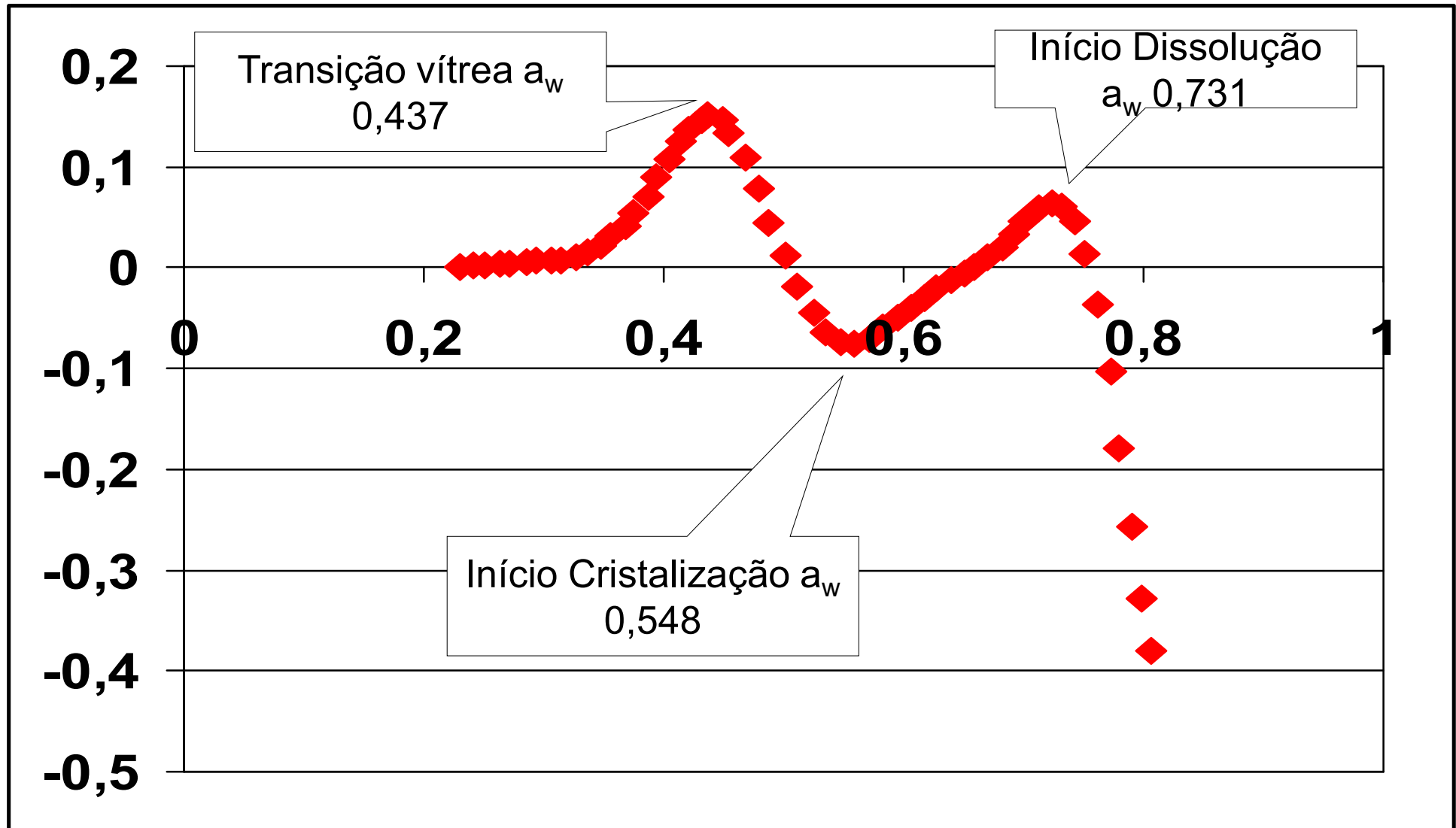
Atividade de água crítica

ISOTERMA E FASES DE TRANSIÇÃO A 25°C



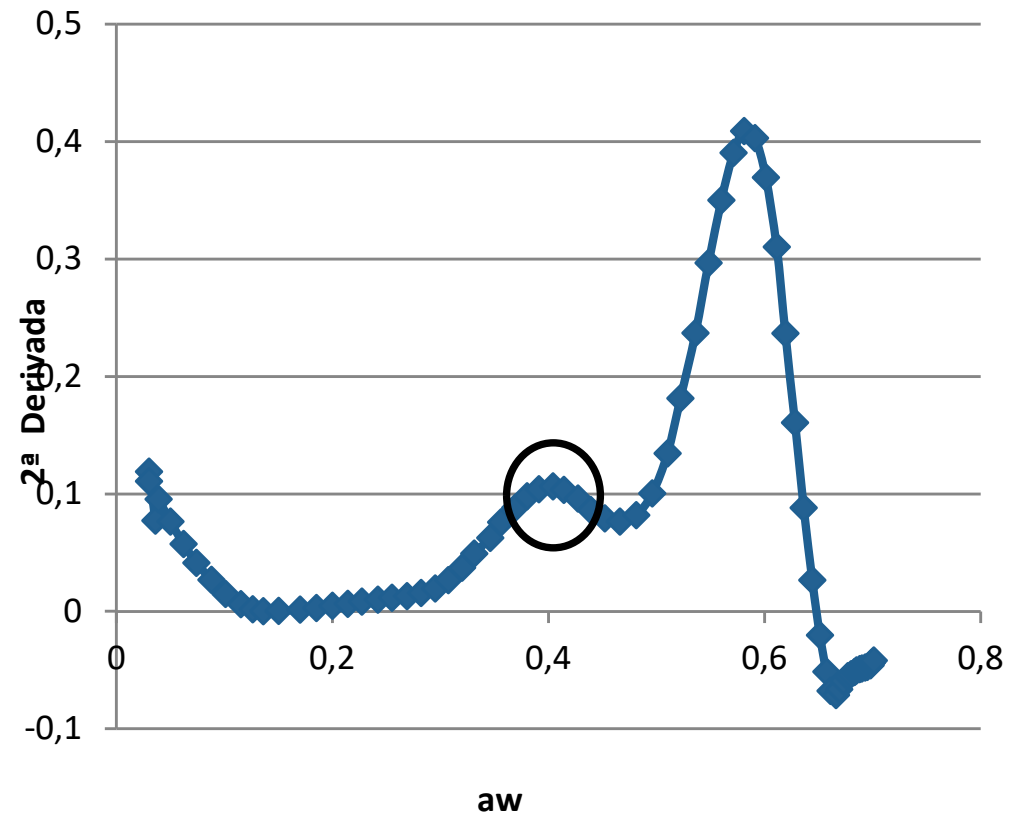
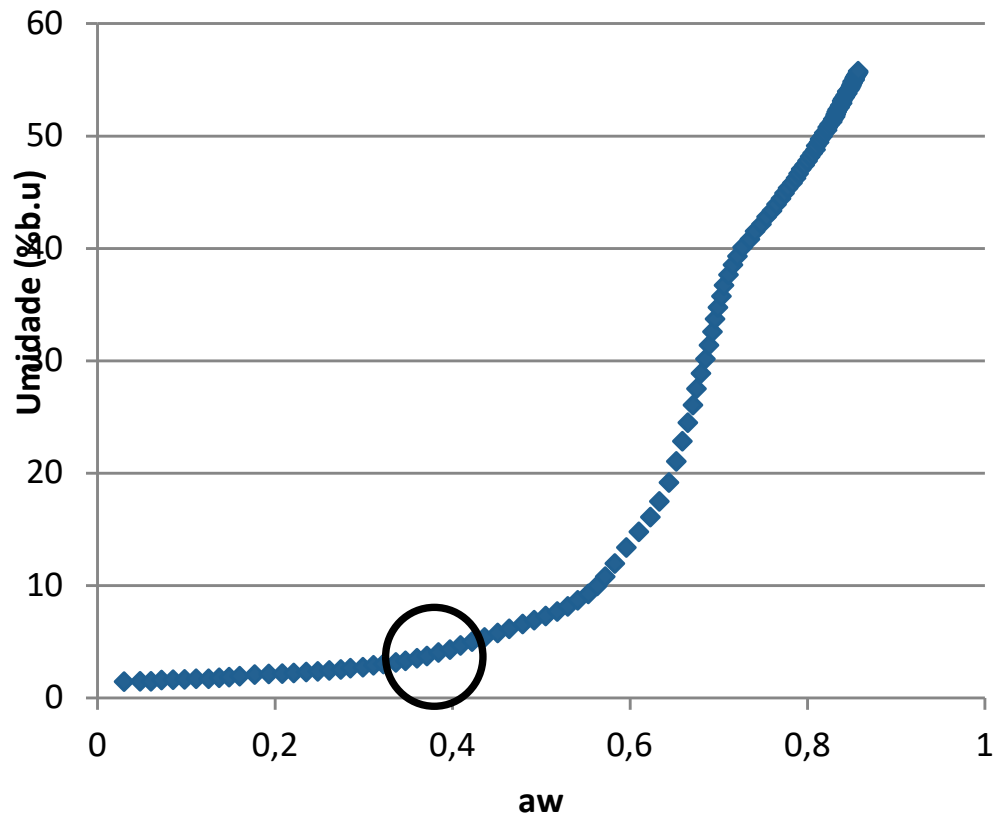
*Dados de Leite em pó Spray Dried

SAVITSKY/GOLAY 2^A DERIVADA



*Dados de Leite em pó Spray Dried - Adsorção a 25° C

Atividade de água crítica



Mistura para sopa em pó a 25°C

Atividade de água crítica

IMPACTO DA a_w CRÍTICA



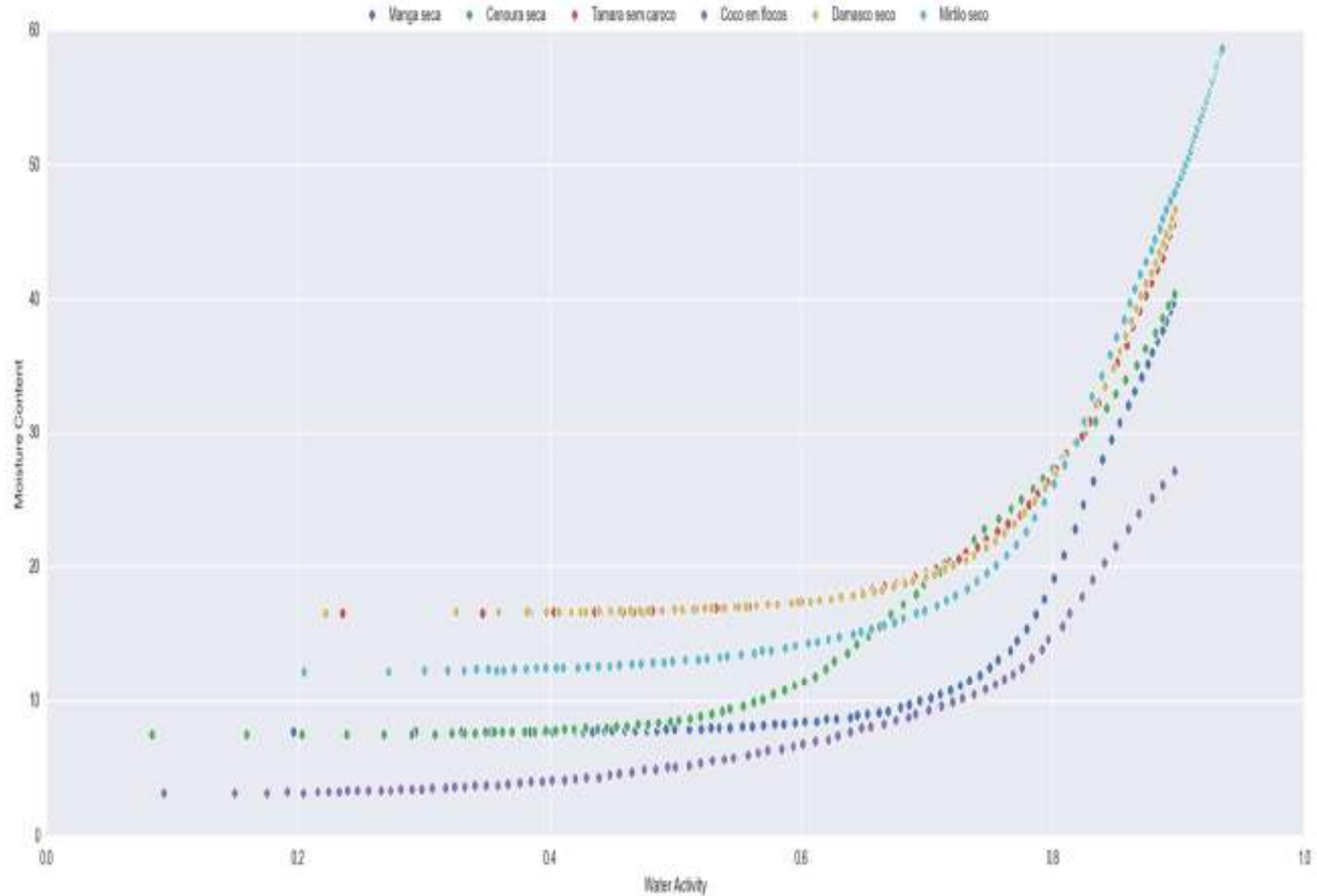
Antes da a_w crítica



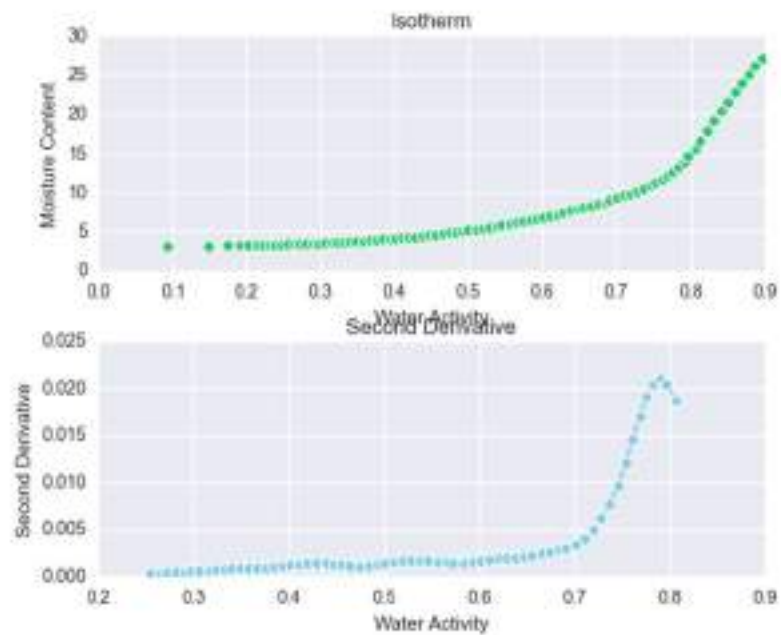
Após a_w crítica



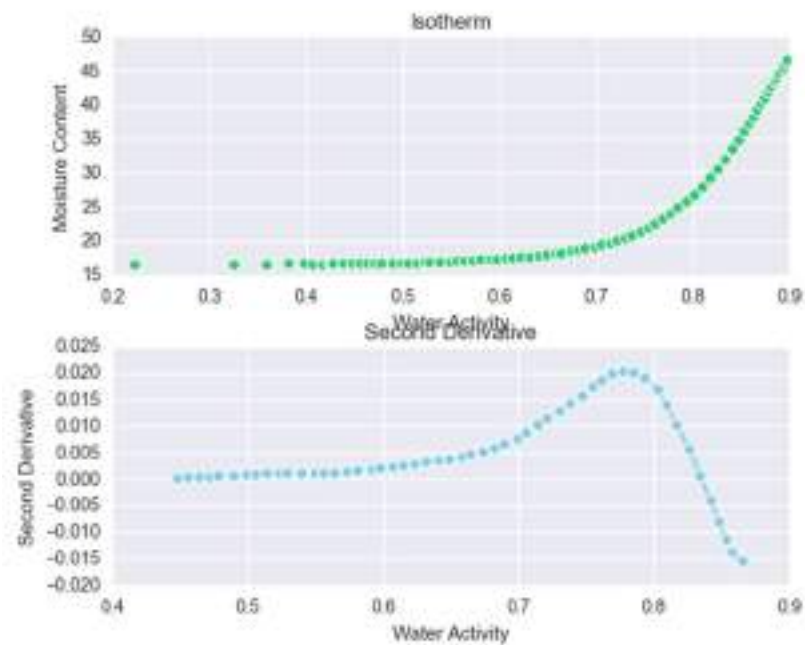
ISOTERMAS DE FRUTAS DESIDRATADAS



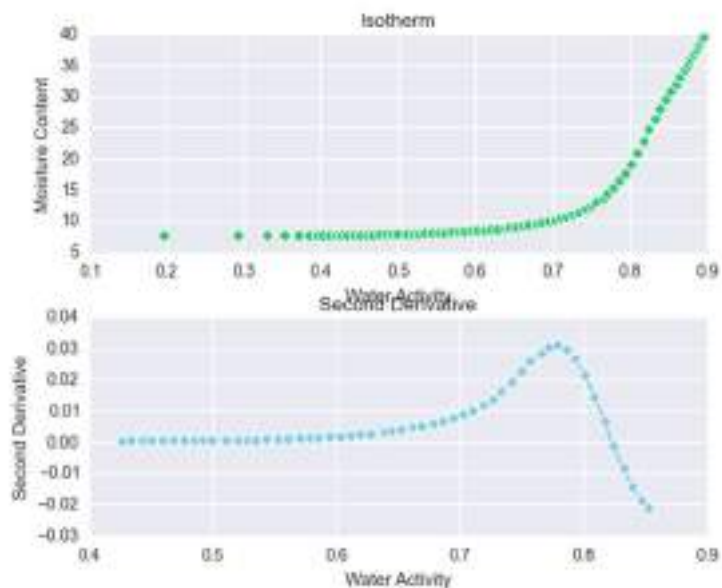
Isotermas em 25°C



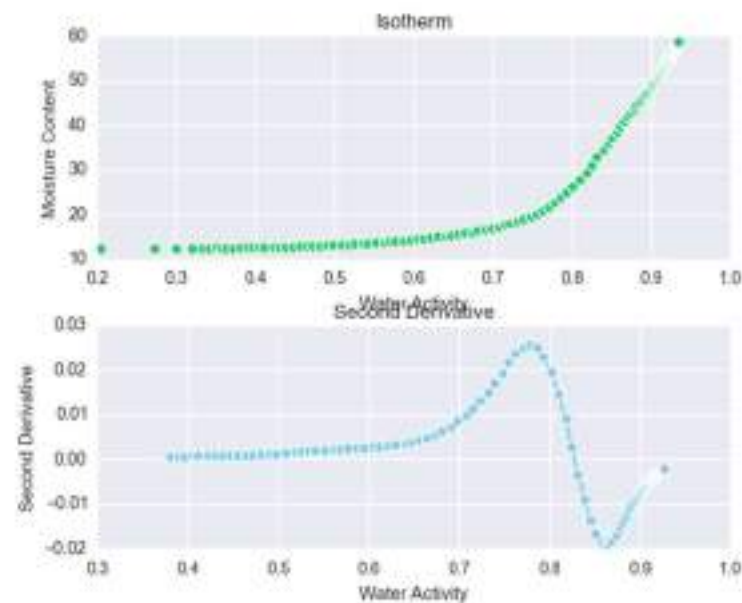
Coco em flocos



Damasco seco



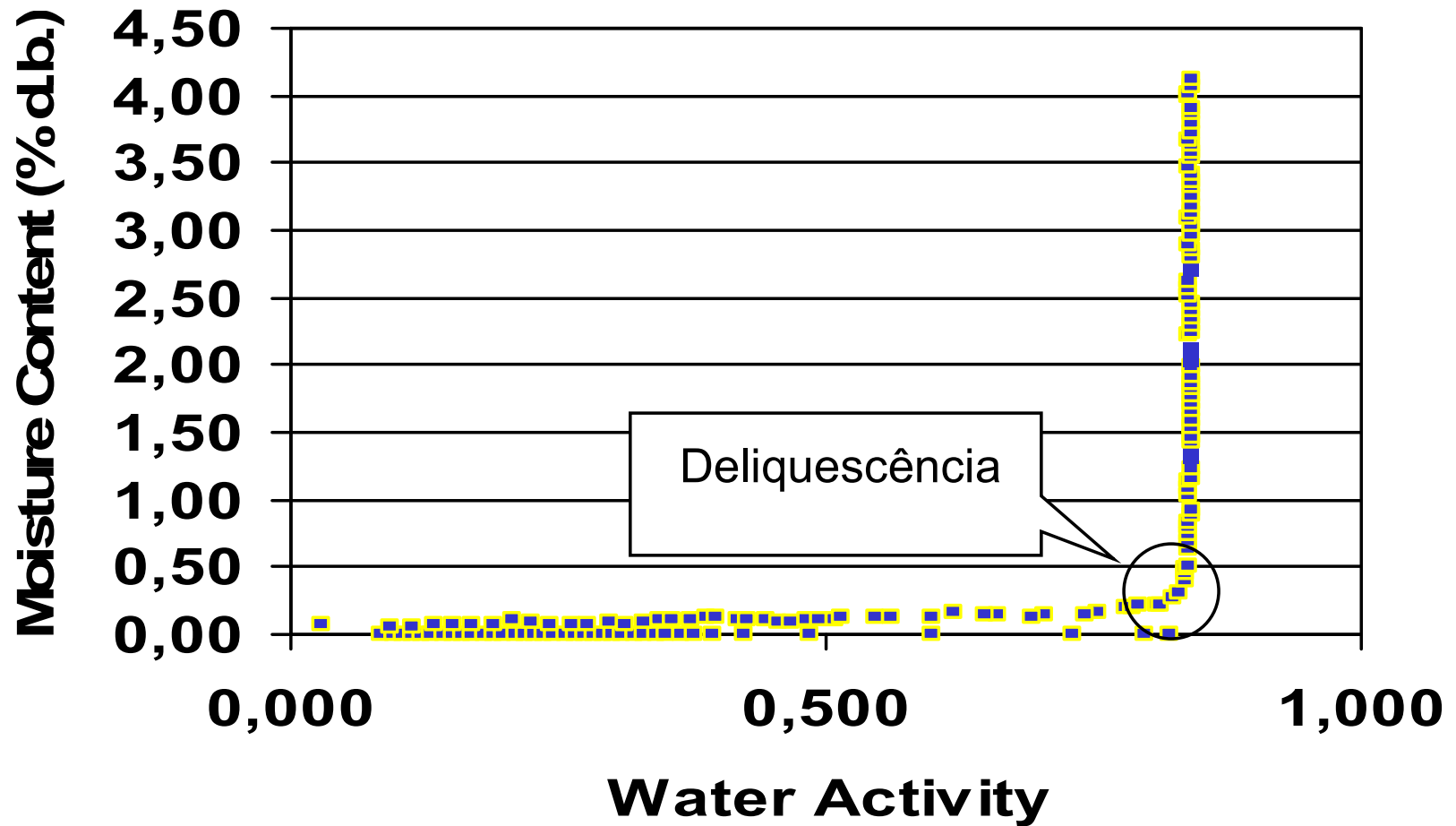
Manga seca



Mirtilo seco



DETERMINAÇÃO DO PONTO DE DELIQUESCÊNCIA



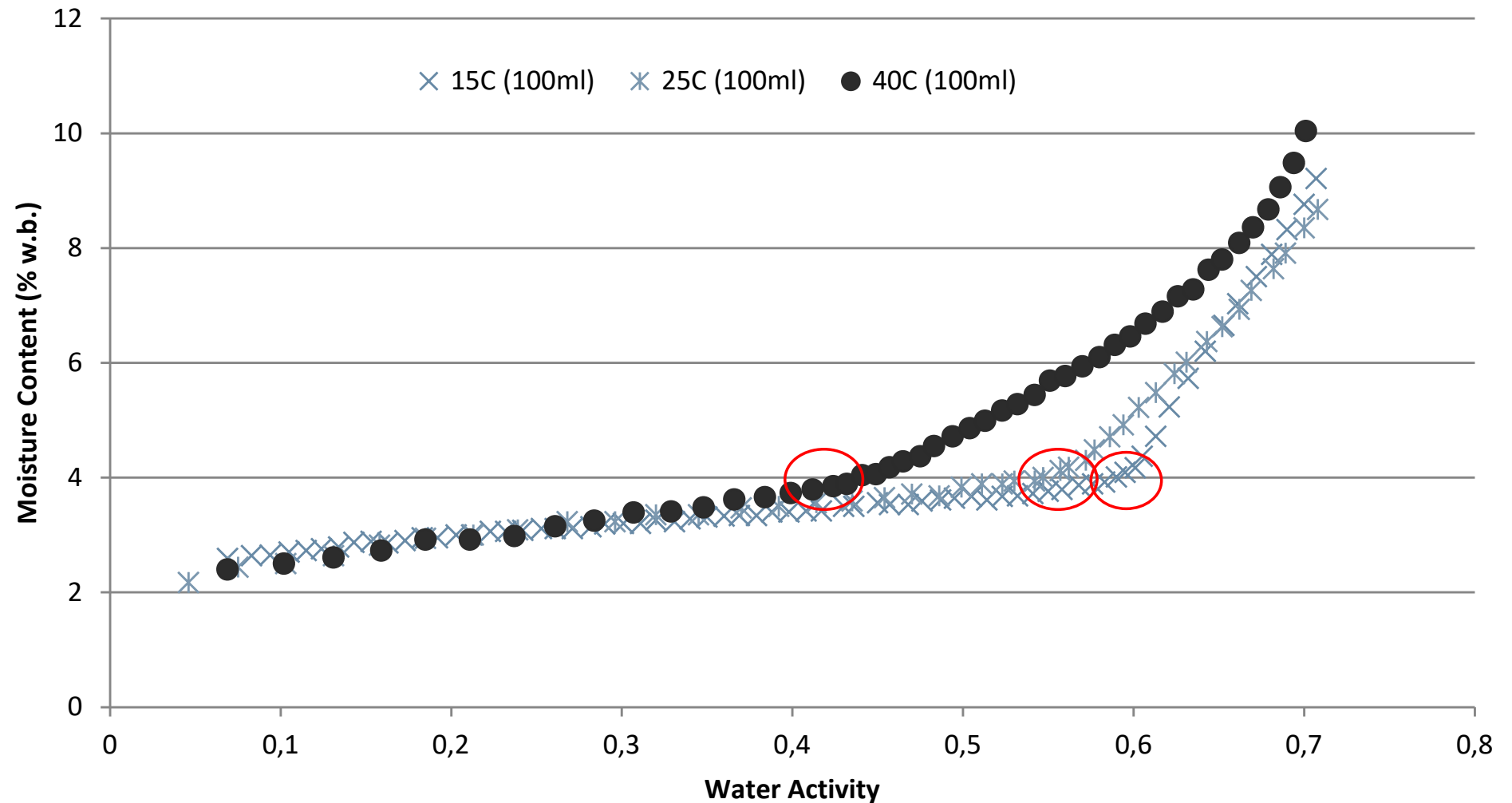
*Sacarose



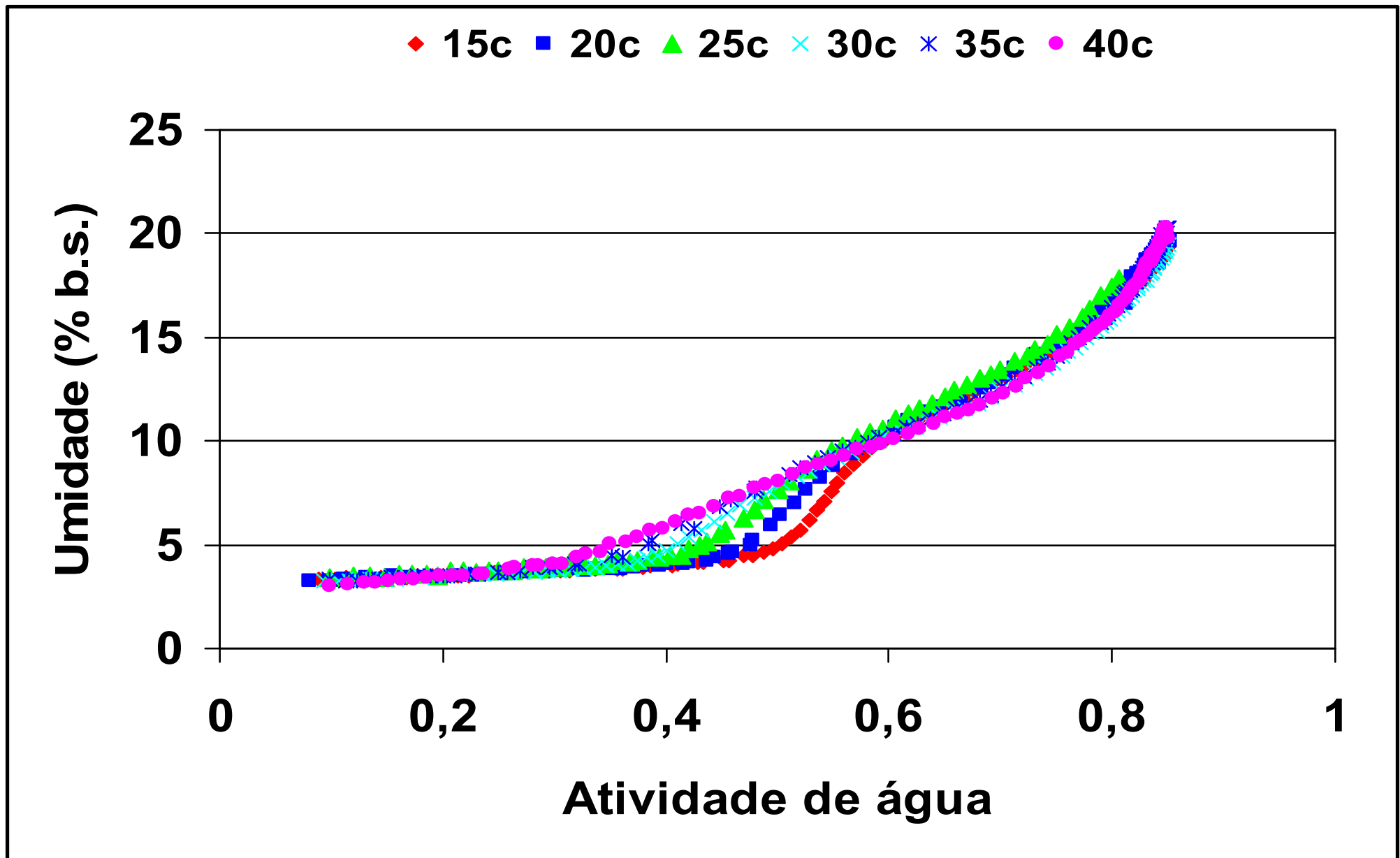
TEMPERATURAS

Atividade de água crítica e temperaturas

Chocolate em pó a 15°C, 25°C e 40°C (100ml)

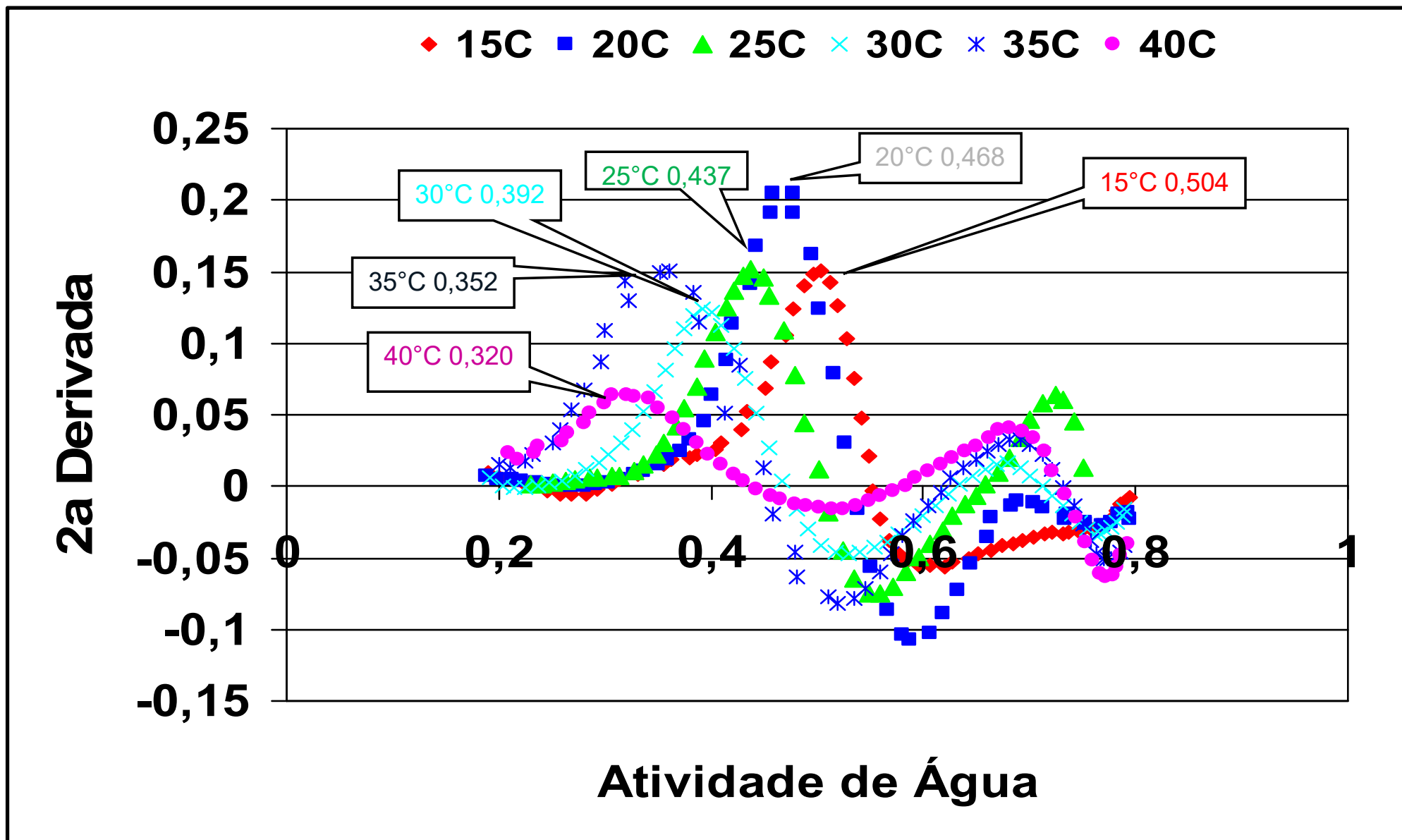


ISOTERMAS EM DIFERENTES TEMPERATURAS



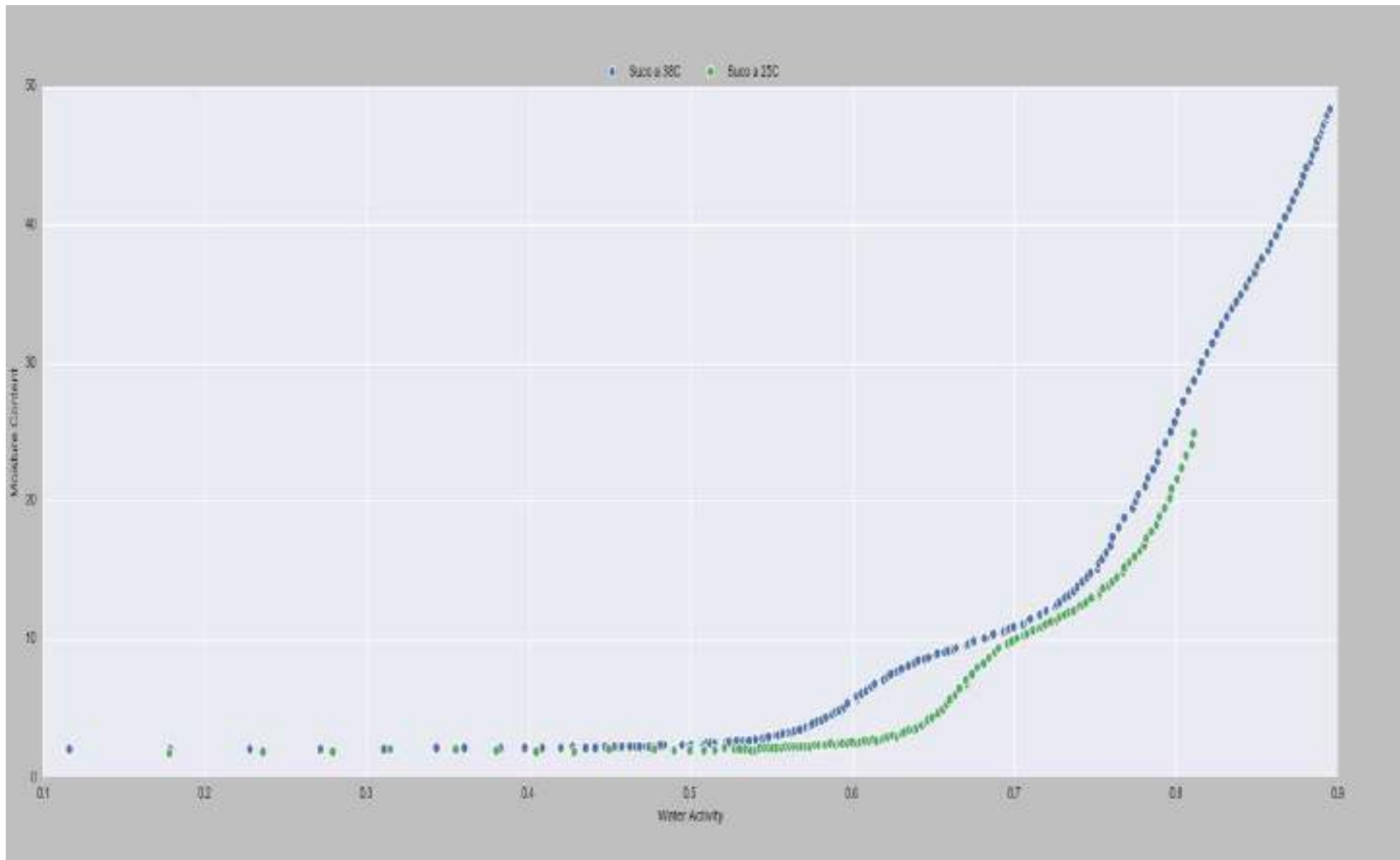
*Dados de Leite em pó Spray Dried

SAVITSKY/GOLAY 2^A DERIVADA

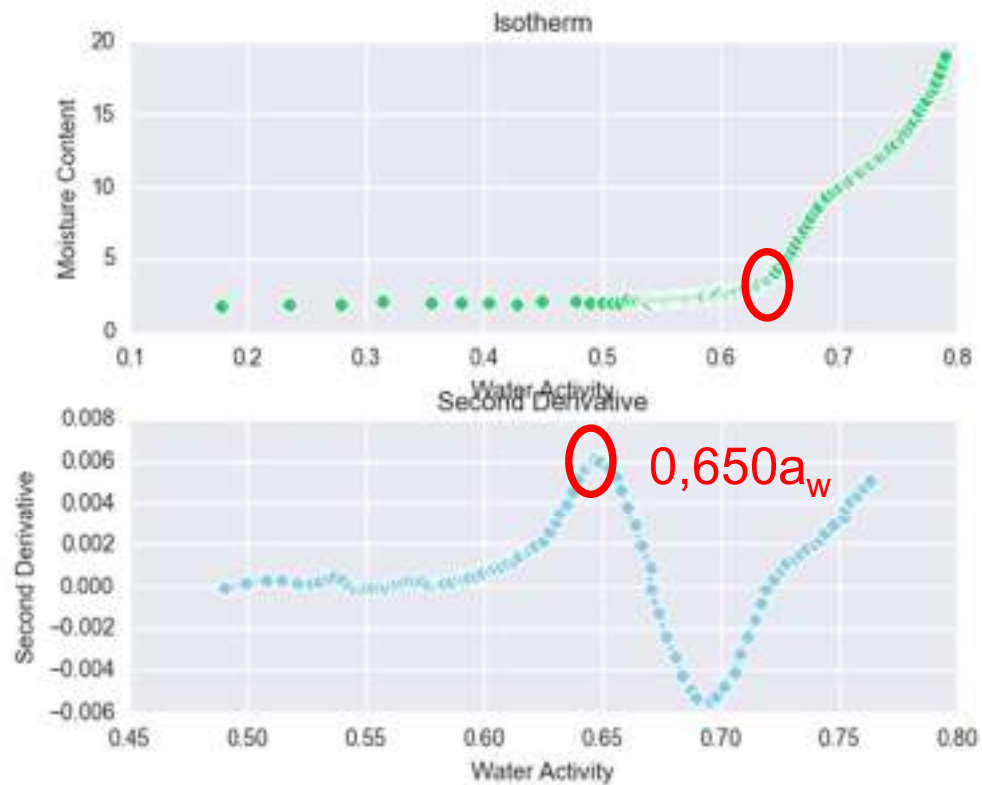


*Dados de Leite em pó Spray Dried

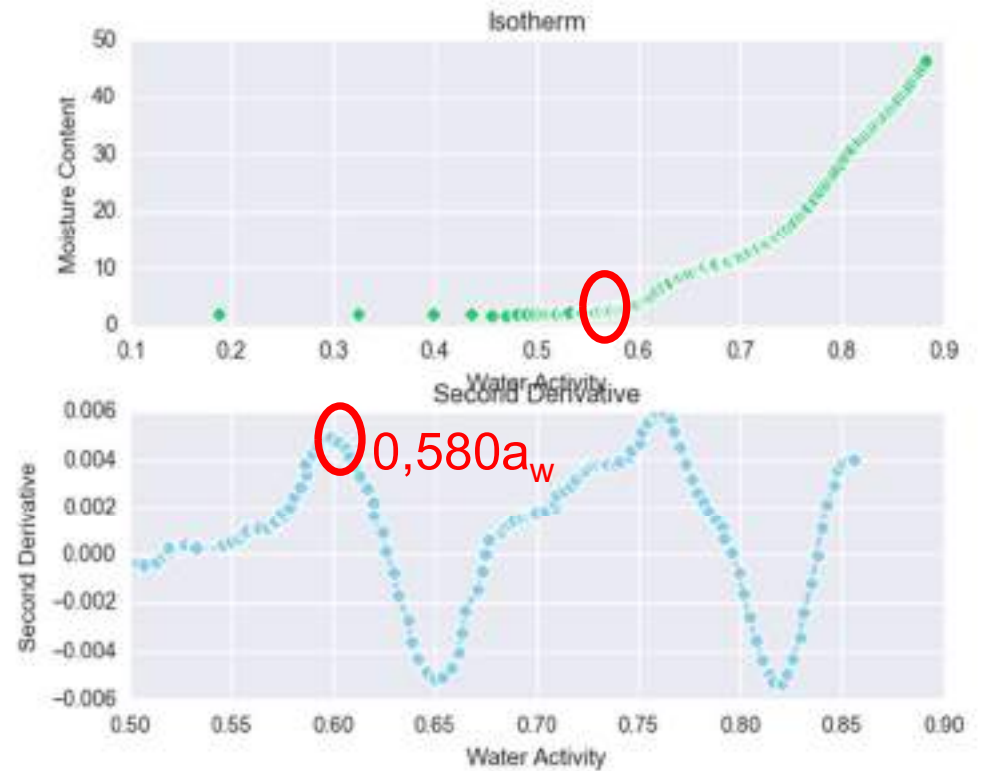
ISOTERMA DE BRBIDA EM PÓ A 25 E 38°C



Atividade de água crítica



25°C



38°C

aw a 25°C	U (%)	aw a 38°C	U (%)	aw a 25°C	U (%)	aw a 38°C	U (%)	aw a 25°C	U (%)	aw a 38°C	U (%)
0,1782	1,11	0,1787	1,47	0,5898	1,72	0,5919	4,34	0,7018	9,49	0,7158	11,27
0,2358	1,17	0,2276	1,47	0,5919	1,77	0,5949	4,56	0,706	9,69	0,7192	11,47
0,2789	1,17	0,2716	1,47	0,5934	1,82	0,5971	4,8	0,7079	9,83	0,7196	11,62
0,3143	1,37	0,3105	1,46	0,5968	1,85	0,6028	5,08	0,7114	10,05	0,725	11,85
0,355	1,36	0,3428	1,56	0,5997	1,9	0,6025	5,28	0,7148	10,21	0,7261	12,03
0,3801	1,27	0,3602	1,55	0,6027	1,84	0,6058	5,52	0,7173	10,33	0,7278	12,2
0,4048	1,25	0,4085	1,55	0,605	1,92	0,6083	5,76	0,7191	10,47	0,731	12,45
0,4281	1,19	0,4198	1,55	0,6073	1,96	0,6116	6,02	0,7226	10,67	0,734	12,71
0,4495	1,42	0,4269	1,63	0,6103	2,01	0,6139	6,27	0,7261	10,82	0,7366	12,99
0,4778	1,38	0,4268	1,65	0,6125	2,1	0,6193	6,51	0,728	11,01	0,7388	13,34
0,49	1,33	0,4936	1,78	0,6147	2,04	0,6213	6,73	0,7315	11,19	0,7422	13,67
0,4998	1,3	0,4942	1,79	0,6183	2,09	0,6235	6,94	0,734	11,36	0,7451	13,99
0,5083	1,29	0,5008	1,81	0,62	2,18	0,6273	7,17	0,7366	11,55	0,7471	14,3
0,5149	1,27	0,512	1,87	0,622	2,3	0,6304	7,37	0,7401	11,77	0,7517	14,65
0,5209	1,49	0,5216	1,93	0,625	2,41	0,6346	7,58	0,7421	11,93	0,7519	14,97
0,527	1,44	0,5223	1,96	0,6275	2,33	0,6383	7,76	0,7442	12,13	0,754	15,36
0,5305	1,4	0,5309	2,06	0,6303	2,5	0,6406	7,9	0,7476	12,37	0,7567	15,82
0,5342	1,37	0,5352	2,12	0,6318	2,6	0,6446	8,06	0,7525	12,64	0,7597	16,35
0,5372	1,33	0,5365	2,15	0,6351	2,79	0,6471	8,18	0,753	12,82	0,7608	16,9
0,54	1,32	0,5409	2,2	0,638	2,79	0,6516	8,33	0,7549	13,08	0,7647	17,63
0,5428	1,54	0,5445	2,29	0,6394	2,91	0,6527	8,43	0,7584	13,35	0,7681	18,34
0,5457	1,53	0,5466	2,32	0,6429	3,16	0,6571	8,55	0,7605	13,64	0,7731	19,02
0,5482	1,55	0,5485	2,39	0,6455	3,3	0,6594	8,63	0,7632	13,95	0,7752	19,55
0,5505	1,5	0,5528	2,46	0,6466	3,48	0,6624	8,79	0,7674	14,33	0,7766	20,08
0,553	1,51	0,5542	2,53	0,6492	3,76	0,664	8,91	0,7681	14,63	0,7807	20,69
0,5562	1,48	0,5568	2,6	0,6529	4,05	0,6705	9,05	0,7709	15,01	0,7825	21,26
0,5587	1,58	0,5611	2,67	0,6559	4,35	0,6723	9,15	0,7744	15,43	0,7858	21,87
0,5615	1,59	0,5626	2,74	0,6579	4,67	0,6743	9,26	0,7776	15,87	0,7888	22,5
0,5636	1,58	0,5642	2,85	0,6605	5,01	0,6752	9,37	0,7802	16,27	0,7892	23,09
0,5661	1,61	0,5672	2,95	0,6637	5,38	0,6818	9,53	0,7817	16,71	0,7937	23,84
0,5683	1,58	0,5712	3,08	0,6665	5,83	0,686	9,66	0,7845	17,22	0,7969	24,6
0,5711	1,61	0,5742	3,19	0,6704	6,18	0,6868	9,76	0,7879	17,8	0,7988	25,26
0,5737	1,63	0,5753	3,31	0,6703	6,49	0,6872	9,87	0,7897	18,36	0,8009	25,98
0,5764	1,69	0,5784	3,48	0,6737	6,91	0,6934	10,02	0,7929	19,03	0,8046	26,83
0,5796	1,7	0,5811	3,63	0,6773	7,33	0,6959	10,16	0,796	19,7	0,8076	27,6
0,5819	1,71	0,5839	3,81	0,6812	7,71	0,697	10,27	0,7975	20,35	0,8109	28,35
0,5833	1,75	0,5878	3,99	0,684	8,09	0,6993	10,41	0,8008	21,15	0,814	29,03
0,5866	1,78	0,5898	4,19	0,688	8,45	0,7053	10,61	0,8036	21,95	0,8159	29,7
				0,69	8,73	0,7076	10,76	0,8062	22,78	0,819	30,39

ISOTERMA DE BEBIDA EM PÓ A 25 E 38°C

aw a 25°C	U (%b.u)	aw a 38°C	U (%b.u)
0,1782	1,11	0,1787	1,47
0,3801	1,27	0,3602	1,55
0,5305	1,4	0,5309	2,06
0,54	1,32	0,5409	2,2
0,5737	1,63	0,5753	3,31
0,5919	1,77	0,5919	4,34
0,6559	4,35	0,6571	8,55
0,6956	9,04	0,6959	10,16
0,7148	10,21	0,7158	11,27
0,7525	12,64	0,7519	14,97
0,8036	21,95	0,8046	26,83

EMBALAGEM

E

VIDA DE PRATELEIRA

Embalagem e Vida de Prateleira

- Empresa de proteína em pó

Problema: Empedramento da proteína em pó (5-10% do total produção).

Solução: A isoterma mostrou que o material estava sendo produzido muito perto do ponto de transição vítrea, então as especificações de produção foram ajustadas.



Valor comercial: Agora <0,1% de empedramento.



Predição da vida de prateleira e otimização da embalagem

- **Predição da vida de prateleira.**

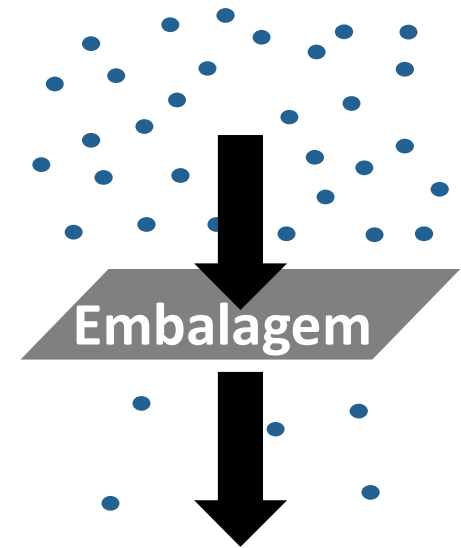
Baseado na a_w crítica da amostra e taxa de permeabilidade ao vapor de água (TPVA ou WVTR) da embalagem.

Medida em $\text{g/m}^2/\text{dia}$

Predição em diferentes condições de armazenamento.

- **Escolha a embalagem adequada.**

Determine TPVA da embalagem para atingir a vida útil desejada.



Vida de prateleira conforme a embalagem.

WVTR Testing Temperature (C):	37,8 °C	WVTR Testing Humidity (%):	90 %	
Humidity of Air (%):	65 %	Atmospheric Pressure (kPa):	100	Total Dry Mass (g): 18144 g
Ambient Temperature (C):	25 °C	Surface Area of Packaging (m2):	0,74 m ²	WVTR (g/m2/days): 5,00 g/m ² /dia
Initial Aw:	0,2413	Critical Aw for Shelf Life:	0,60	

● Seleccionar a isoterma

Results:
Shelf Life: **186** Days



**ESTE SEMINÁRIO
LHE FOI ÚTIL? DEIXE
OS SEUS
COMENTÁRIOS E
SUGESTÕES.**



perguntas?

ENCONTRE-NOS



<https://www.facebook.com/metergroupbr/>



<https://www.metergroup.com.br/>



<https://twitter.com/metergrouplatam>



<https://www.youtube.com/metergrouplatam>



<https://www.instagram.com/metergrouplatam/>



<http://linkedin.com/company/metergrouplatam>



AGRADECEMOS A SUA PARTICIPAÇÃO

METER Group LatAm

Avenida Andromeda, 693

Sala 204 Floradas de S. José

12.230-000

S.J dos Campos – SP

Fone: (12) 3307-1016



tania@metergroup.com

