

Az infravörös spektroszkópia alkalmazása nagymolekulájú zsírsavak vizsgálatára I.

B I R Ó E N D R E

Növényolaj és Mosószergyártó O. V. Budapest

B I A C S P É T E R

Budapesti Műszaki Egyetem Mezőgazdasági Kémiai Technológiai Tanszék

Erkezett: 1968. december 6.

A telített és telítetlen hosszuláncú zsírsavak tulajdonságai, fizikai állandói, reológiai sajátosságai a molekula szénhidrogénláncának viszonylag kis különbözősége ellenére jelentős eltérést mutatnak. Egyrészt a halmazállapot hőmérséklet-függésében mutatkozó rendellenességek, másrészt a különböző telítetlenségű zsírsavak forráspontja megváltozásában a nyomás – csökkentésekor tapasztalt anomáliák molekulaszervezeti különbségekre engednek következtetni. Az azonos szénlánc-hosszúságú, különböző telítetlenségű zsírsavaknál a telítetlenség fokozásával a törésmutató növekszik, a forráspont csökken. A természetes zsírsavkeverékek molekulárdesztillációjánál igen kis nyomáson viszont azt tapasztaljuk, hogy a desztillációs sorrend megváltozik: Sztearinsav, olajsav, linolsav és linolénsav. Véleményünk szerint ez az eltérés molekulaszervezeti különbözőségekre vezethető vissza. Ezeknek az anomáliáknak a vizsgálatára infravörös spektroszkópiai méréseket végeztünk.

Az infravörös spektroszkópia alkalmazása különösen a szerves vegyületek szerkezetének felderítésében játszik nélkülözhetetlen szerepet. Segítségével egy tiszta vegyületben, vagy elegenden levő funkciós csoportok legnagyobb része néhány mg anyagból percek alatt kimutatható és meghatározható, anélkül, hogy az anyag veszendőbe menne. Az infravörös spektroszkópiát szennyezések kimutatására, reakciók és szétválasztási technológiák ellenőrzésére is felhasználják szilárd, folyékony és gáz halmazállapotú anyagoknál egyaránt.

Az elektromágneses sugárzást az infravörös tartományban ($2-30 \mu$) minden anyag különböző mértékben elnyel, és az infravörös spektrométer ezt az abszorpciót méri sorjában minden egyes frekvencián, ez adja az infravörös spektrumot. A molekulán belül sok csoport abszorpciós frekvenciája nagyjából független a molekula egyéb részeitől, vagyis a rezgés a csoporton belül koncentráldik. Egy spektrumból szerkezeti felvilágosítást úgy kaphatunk, ha a megfigyelt abszorpciós sávokat specifikus csoportfrekvenciákhoz rendeljük. A spektrum minden sávját, sőt azok legnagyobb részét csak ritkán lehetséges értelmezni, azonban a jellegzetes sávok pontos helyzete, intenzitása és alakja szinte „ujjlenyomatként” ad felvilágosítást a vizsgált molekulacsoportról, a szerves kémia klasszikus funkciós-csoport analíziséhez hasonlóan. (1)

Az infravörös spektroszkópia elmélete szerint az alap- vagy normálrezgések között vegyértékrezgéseket (ν) és deformációs-rezgéseket különböztethetünk meg (δ, γ). Az előbbinél az atomok a kötési irányában rezegnek, míg az utóbbiaknál a rezgés iránya megváltozik. A zsírsavmolekulában levő CH-csoportoknál például szimmetrikus és aszimmetrikus vegyértékrezgés (ν), ezenkívül a kötési síkban (δ) és a kötési síkra merőleges (γ) szimmetrikus és aszimmetrikus deformációs rezgés

lehetősége van. Az alaprezgések közül azonban energiát csak azok abszorbeálnak, amelyeknél a kötésben levő atommagok rezgéseit dipólus momentumváltozások kísérik. (2)

A zsírsavak infravörös spektrumában az abszorpciós sávok legnagyobb részét a szénhidrogénlánc okozza, de éles intenzív rezgési sávval rendelkezik a karbonsavcsoport is. A C = O és OH-csoportok külön rezgési sávokkal jelentkeznek, ezenkívül a zsírsavaknál a gyakran megfigyelhető dimer állapot miatt megváltozott kötések széles, összekapcsolt rezgési sávokat okoznak.

Az infravörös spektroszkópia egyik fontos alkalmazása az ilyen hosszúlánccal vegyületeknél a jelenlevő telítettség típusának meghatározása. A cisz- és transz-izomerek kettős kötéseinek rezgési sávjai jól megkülönböztethetők egymástól, sőt kimutatható, hogy a cisz-izomer erősebben abszorbeál, mint a szimmetrikusabb transz kettős kötés.

A zsírsavak spektrumjainak felvételét UR-20 (VEB Carl Zeiss, Jena) infravörös spektrométerrel végeztük. Ez a készülék közvetlenül és folyamatosan rajzolja fel a vizsgált anyag teljes spektrumát áteresztési, vagy elnyelési %-ban, az infravörös sugárzás frekvenciájára (hullámhosszára) vonatkoztatott lineáris skálán. Az írószerszemet a diagrammot a viaszréteggel bevont papírra oly módon karcolja, hogy a regisztrálással egyidejűleg a kívánt léptékű koordináta-rendszert is önmaga készíti el. Az infravörös sugárzás felbontását KBr, vagy NaCl, ill. LiF prizmák végzik. A készülék optikai-mechanikai sémáját az 1. ábra mutatja.

Az általunk vizsgált zsírsavak infravörös spektrumát úgy vettük fel, hogy az anyagokat egyrészt szilárd halmazállapotban KBr pasztillában, másrészt szerves oldószerben feloldva köristályú küvetta baba töltve helyeztük a készülékbe. A spektrumok felvételénél arra törekedtünk, hogy a vizsgálat körülményeit (küvetta rétegvastagság, oldatkoncentráció) úgy válasszuk meg, hogy az abszorpciós sávok a 20–70% áteresztési tartományba essenek. Az erős elnyelést mutató folyékony halmazállapotú zsírsavaknál azért a legkisebb, 0,25 mm rétegvastagságú NaCl-ból készült küvetta használtunk, a zsírsavakat 1:1 arányban apoláros CCl₄-al hígítva. A felbontást kőskristályból készült prizmával végezve a 700–4000 cm⁻¹ frekvenciatartományban csak a CH-kötések vegyértékrezgéseinek (2900 cm⁻¹) megfelelő erős és széles rezgési sávja, valamint a C=O kötés vegyértékrezgéseinek (1720 cm⁻¹) megfelelő erős és éles rezgési sáv esett a 0–10%-os áteresztési tartományba.

Szilárd halmazállapotban levő telített hosszúlánccal zsírsavak vizsgálatánál az előbb említett két erős rezgési sávon kívül gyakran mutatkozik egy sorozat gyenge, egymáshoz közeli elhelyezkedésű sáv 1180 és 1350 cm⁻¹ között. A sáv-csoport valószínűleg a lineáris láncok CH₂ deformációs rezgéseitől származik és oldatban eltűnik. Kaufmann és munkatársai megfigyelése szerint a 12-nél több C-atomot tartalmazó zsírsavaknál a sávok száma szerint meghatározható a lánc-hossz: (3)

a vizsgált zsírsav lánc-hossza = $2n + 2$, ahol n – a sávok száma.

Néhány 12 és 18 közötti szénatomszámú zsírsav infravörös spektrumjait felvéve megállapítottuk, hogy az egymástól közel egyenlő távolságban elhelyezkedő keskeny sávok közül a nagyobb frekvenciákon megjelenőket a karboxilcsoport ν C–O vegyértékrezgésének széles, igen erős sávja eltakarja. Holly szerint itt nem tisztá kötés frekvenciáról van szó, hanem a karboxilcsoport olyan csoportrezgéséről, amelyben a ν C–O rezgés tulajdonságai mellett a δ OH rezgési is érvényesülnek. (2)

Miután megmértük a CH₂-csoportpárok rezgéseinek tulajdonítható sávok egymástól való távolságát, a vizsgált karboxilcsoport rezgési sávjának nem szimmetrikus lefutású csúcsának megtaláltuk a hiányzó sávoknak megfelelő szuperponáltan jelentkező csúcsokat.

A 12 szénatomos laurinsav(dodekánsav, $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_{10}-\text{COOH}$) és a 16 szénatomos palmitinsav(n-hexadekánsav, $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_{14}-\text{COOH}$) infravörös spektrumjain a következő sávokat különböztették meg: (2., 3. ábra)

laurinsav	1195	1219	1247	1275*	1299*	cm^{-1}
palmitinsav	1191	1210	1230	1251	1272	1992* 1311* cm^{-1}

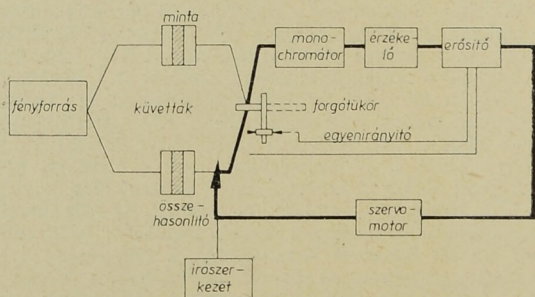
(*-gal jelölve az 1300 cm^{-1} frekvenciánál megjelenő széles $\nu \text{ C-O} + \delta\text{OH}$ csoportrezgés sávján megfigyelt szuperponált sávok frekvenciáját.)

a rezgési sávok különbsége így रहे:

laurinsav	24	28	28	24	cm^{-1}
palmitinsav	19	20	21	21	20 19 cm^{-1}

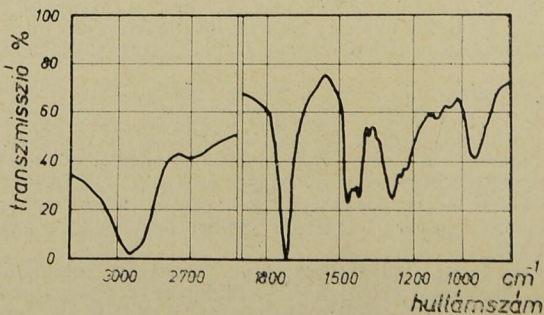
azaz közel szimmetrikus eloszlású.

A sávok csúcsainak egymástól való átlagos távolsága laurinsavnál 20 cm^{-1} , palmitinsavnál 26 cm^{-1} , a vizsgált zsírsavakra nézve jellemző érték. Az irodalomban Nakanishi közöl a 18 szénatomos sztearinsav infravörös spektroszkópiai vizsgálatánál az $1186-1316 \text{ cm}^{-1}$ tartományban 8 közel egyforma intenzitású sávot. (4)



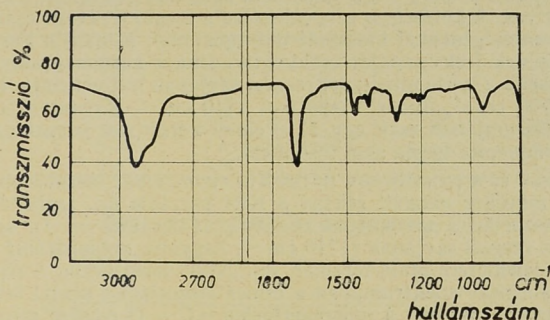
1. ábra

Linolsav infravörös spektruma



2. ábra

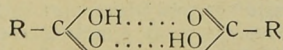
Palmitinsav infravörös spektruma



3. ábra

A sávok átlagos távolságát kiszámítva 17 cm^{-1} frekvenciaértéket kaptunk, amely jó megegyezést adott saját felvételeink alapján feltételezhető átlagos sáv-távolsággal. Az irodalmi adatok és saját méréseink alapján tehát a CH_2 deformációs rezgések $130 - 140 \text{ cm}^{-1}$ széles frekvenciatartományában levő közel egyenletes eloszlású és intenzitású rezgési sávok egymástól való távolsága alapján is elvégezhető a vizsgált telített hosszúlancú zsírsav azonosítása.

A zsírsavak fizikai állandóit, reológiai sajátosságait nagymértékben meghatározhatja az egyes molekulák között fellépő kisenergiájú kötések jellege. A természetes szerves anyagoknál igen fontosak a H-atom közvetítésével létrejövő intermolekuláris és intramolekuláris kötések. A zsírokban és más nagymolekulájú anyagokban számos különböző hidrogénkötés van, amelyek nagymértékben hozzájárulnak a kémiai sajátosságok változatosságához. (5) A zsírsavak és az azonos szénláncú alkoholok fizikai állandóinak (olvadáspont, forráspont) közel 40 C° -os különbségét a savmolekulák között fellépő sokkal nagyobb erősségű H-kötés okozza. A savcsoport O-H kötése sokkal erősebben polarizált, mint az alkoholos hidroxilcsoport. A zsírsavak karbonil-dipólusának meglehetősen elektronnegatív oxigénje H-híd kötést létesíthet egy másik hidroxilcsoport oxigénjével, ezáltal a karbonsavak nagy része folyékony és szilárd halmazállapotban egyaránt ciklikus dimer állapotban van (6).



A dimériként jelenlevő karbonsavcsoport legjobban a kb. $3400 - 2500 \text{ cm}^{-1}$ tartományban levő igen széles OH rezgési sávról ismerhető fel, amely nagyszámú részmaximumból áll. Közülük a legerősebb a 2690 cm^{-1} -nél megjelenő csúcs. (A monomer karbonsav szabad hidroxil-csoportjának OH vegyértékrezgése a 3570 cm^{-1} frekvenciánál ad kis intenzitású abszorpciós csúcsot.)

A kisebb frekvenciatartományban a C-C, C-O kötések vegyértékrezgéseinek és a C-OH kötés síkban deformált rezgésének tulajdonítható az éles abszorpciós csúcsként megfigyelhető $1442, 1289 \text{ cm}^{-1}$ sáv, míg a sakra merőleges γOH

kötés deformációs rezgése a zsírsavaknál jól azonosítható széles sávot ad a 935 cm^{-1} frekvenciaértéknél.

A spektrum egy rezgési sávjának intenzitása (a sáv területe) a vizsgált funkciós csoport, ill. kötéstípus mennyiségének felel meg. A különálló, éles, szimmetrikus alakú rezgés elnyelési görbéje csúcsának az extinkciós értéke a koncentrációval közel arányos. A kötéstípus megváltozása a rezgés frekvenciáját változtatja meg. A karboniloxigénnel kialakult hidrogénhidak például a karbonilcsoport $\nu\text{C}=\text{O}$ rezgésének frekvenciáját csökkentik. Dimer karbonsavakban általában lényegesen kisebb a karbonilcsoport rezgési sávjának frekvenciája, így monomer állapotban 1760 cm^{-1} , dimer állapotban 1710 cm^{-1} . Kristályos állapotban a zsírsavak spektrumjában csak egy 1710 cm^{-1} körüli sáv jelentkezik, ami arra mutat, hogy monomer forma nem fordul elő.

A laurinsav és a palmitinsav infravörös spektrumát összehasonlítva azt találtuk, hogy mindkét vizsgált zsírsav a KBr pasztilla ún. „szilárd oldatában” erős dimer asszociációs sávokat adott (2692 , 1442 , 1289 cm^{-1}), ugyanakkor a $\nu\text{C}=\text{O}$ kötés rezgési sávjának (1710 cm^{-1}) nagyobb hullámszámú lejtőjén kevés monomer jelenlétére utaló torzulás, ún. „váll” jelentkezik. A rövidebb szénatomszámú laurinsav spektrumában a dimer asszociációs sávjai intenzívebbek, ugyanakkor palmitinsavnál a monomerforma $\nu\text{C}=\text{O}$ rezgése mutatkozik élesebben és 3470 cm^{-1} frekvenciánál megjelenik az OH-kötés vegyértékrezgési sávjá.

A telített hosszúláncú zsírsavak infravörös spektrumainak vizsgálata szerint a szénlánc-hosszúság csökkenésével a ciklikus dimer asszociáció mértéke növekszik. E megfigyelésünk a rövidláncú karbonsavaknál tapasztalt törvényszerűség kiterjesztését jelenti.

További vizsgálataink a hosszúláncú telítetlen zsírsavak infravörös spektroszkópiái tanulmányozását célozták. Azonos szénatomszámú zsírsavaknál a telítetlenség növekedésével a tulajdonságok nagymértékben megváltoznak. Különösen a reológiai sajátosságok megváltozása és a különböző telítetlenségű zsírsavak forráspontjainak egymástól eltérő viselkedése indokolta, hogy az asszociációs tulajdonságokat és az ezzel összefüggő dipólusmomentum változásokat spektroszkópiai módszerekkel vizsgáljuk.

Mint már korábban említettük, az infravörös spektrumban az egyes vegyületcsoportokra jellemző gyököknek, funkciós csoportoknak meghatározott frekvencián jelentkező abszorpciós sávok felelnek meg. Mennyiségi analízist is végezhetünk, ha az egyes funkciós csoportokra jellemző sávok intenzitását mérjük.

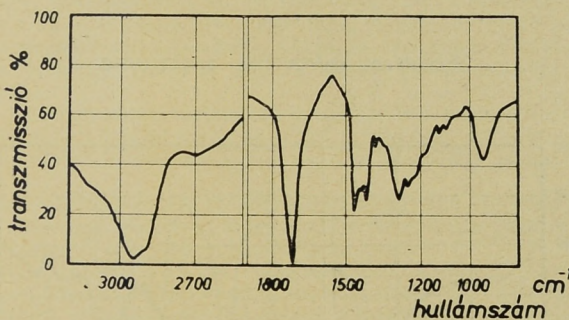
A dimer-monomer arány szemléltetésére közelítő számítást alkalmaztunk. A koncentrációeltérésekből adódó hibák elkerülésére az azonos körülmények között felvett spektrumnál az egyes sávok csúcsainak extinkciós értékeit egy közel állandónak vett csoport rezgési sávjainak elnyelési értékére vonatkoztattuk. A zsírsavak infravörös spektrumában az $1400\text{--}1500\text{ cm}^{-1}$ tartományban nagyon jellegzetes, „fogformájú” rezgési sávcsoport található, ahol a legnagyobb intenzitású 1465 cm^{-1} frekvenciájú sáv a metilénscsoportok síkban deformációs szimmetrikus sávját jelenti, ez teljesen összeolvad a metilcsoport gyenge aszimmetrikus rezgésével. A vizsgált telítetlen zsírsavak jellemző elnyelési sávjait erre, a molekulán belül százalékos összetételben viszonylag kevésbé változó vegyületcsoport rezgési sávjára vonatkoztattuk. (1. táblázat.) A „fog-alakú” elnyelési sávcsoport másik éles csúcsa a karboxilcsoport befolyása alatt álló αCH_2 -csoport rezgési sávját képviseli (1415 cm^{-1}).

Az olajsav, linolsav, linolénsav és ricinolsav infravörös spektrumfelvételein jól megfigyelhető ennek a két jellegzetes rezgési sávnak a megváltozása (4., 5., 6., 7. ábrák).

A vizsgálatokhoz felhasznált zsírsavak funkciós csoportjainak százalékos megoszlás

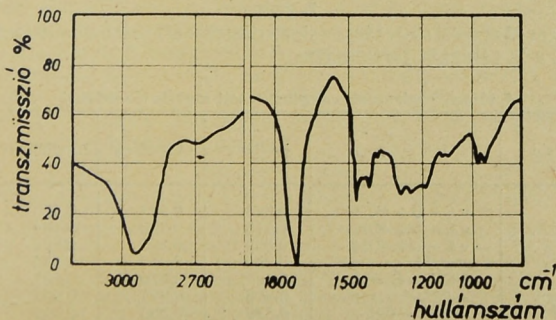
Zsírsav	Mólsúly	CH ₃ -	-CH ₂ -	-CH=	-COOH	-OH
Laurinsav	200	7,5	70,0	-	22,5	8,0
Palmitinsav	256	5,86	76,7	-	17,6	6,25
Sztearinsav	284	5,3	78,9	-	15,7	5,64
Olajsav	282	5,32	68,5	9,23	15,9	5,66
Linolsav	280	5,36	60,0	18,35	16,1	5,71
Linolénsav	278	5,40	50,3	28,10	16,4	5,74
Ricinolsav	298	5,03	65,4	8,72	15,2	11,40

Olajsav infravörös spektruma



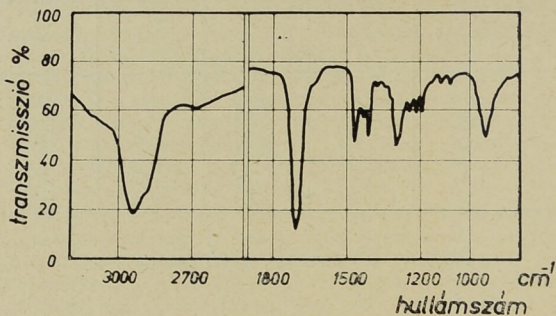
4. ábra

Linolénsav infravörös spektruma



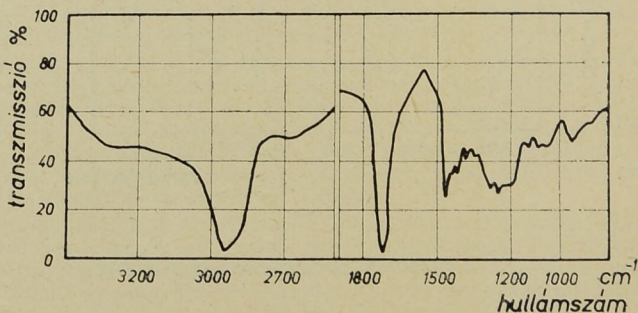
5. ábra

Laurinsav infravörös spektruma



6. ábra

Ricinolsav infravörös spektruma



7. ábra

Az 1465 cm^{-1} rezgési sáv csúcsának extinkciós értékére vonatkoztatott sávok arányszámait a 2. táblázat tartalmazza.

2. táblázat

A vizsgált zsírsavak vonatkoztatott extinkciós értékei

Sávfrekvencia	Kötéstípus	Olajsav	Linolsav	Linolélsav	Ricinolsav
2692 cm^{-1}	$\nu\text{ C-O} + \delta\text{OH}$	0,368	0,378	0,425	0,399
1442 cm^{-1}	$\nu\text{ C-O} + \delta\text{OH}$	0,715	0,729	0,754	0,699
1289 cm^{-1}	$\nu\text{ C-O} + \delta\text{OH}$	0,838	0,905	0,930	0,845
945 cm^{-1}	γOH	0,450	0,463	0,544	0,428
1415 cm^{-1}	$\alpha\text{CH}_2-\dot{\text{C}}=\text{O}$	0,701	0,810	0,825	0,675
1380 cm^{-1}	$-\text{CH}_2$	0,406	0,421	0,537	0,608
3015^* cm^{-1}	$-\text{CH}=\text{CH}-$	0,326	0,350	0,365	—

* LiF prizmával felbontva, $3015\text{ cm}^{-1}/2862\text{ cm}^{-1}$

A telítetlen zsírsavaknál a telítetlenség mértékének növekedésével a ciklikus dimer asszociációra jellemző extinkciós értékek emelkedő tendenciát mutatnak. Az egyes asszociációs rezgési sávok elnyelésének aránya megfelel a Kössler által közölt moláris extinkciós koeficiens arányának, azaz közelítő számításaink helyességét igazolja. (7)

A 2400–3400 cm^{-1} tartományban megjelenő széles $\nu\text{C}-\text{O} + \delta\text{OH}$ sáv (különösen a ricinolsav spektrumán látható jól) legnagyobb részmaximuma 2692–2717 cm^{-1} között található. Az irodalomban erre a sávra közölt moláris extinkciós koeficiens értéke 15, míg az 1210–1320 cm^{-1} közötti ún. hibridsávnál 7. A kísérleteink során meghatározott közelítő sávintenzitásarányok az irodalmi $15/7 = 2,14$ értékhez képest olajsavnál 2,27, linolsavnál 2,39, linolénsavnál 2,19, ricinolsavnál 2,12.

Az 1390–1440 cm^{-1} frekvenciatartományban levő sáv (1442 cm^{-1}) is egyetítő a δOH és $\nu\text{C}-\text{O}$ rezgési sávok jellegét, de itt a δOH rezgés a tulajdonságokat meghatározó, uralkodó komponens, ezért az arány kisebb (olajsavnál 1,94, linolsavnál 1,92, linolénsavnál 1,78, ricinolsavnál 1,75).

A linolsavnál a dimer asszociáció növekedése kisebb, azaz a várt dimer/monomer arány növekedéséhez képest viszonylag több a monomer. Ennek következtében a $\nu\text{C}=\text{O}$ csoporttól függő αCH_2 rezgési sáv (1415 cm^{-1}) értéke ugrásszerűen megnő, mivel valószínűleg kisebb az asszociáció által stabilizálódott az oxigénnel kialakult parciális negatív töltés effektusa. (E_{olajsav} : 0,701; E_{linolsav} : 0,810).

A több telítetlen kötést tartalmazó linolénsav és a linolsav között feltűnő a láncvégi CH_3 -csoport rezgési sávjának eltérő viselkedése, a Fodor szerint a molekulák végei között feltehetően létező van der Waals-féle asszociációs erőnek köszönhető (8).

A linolénsav molekulái között tehát valószínűleg több különféle kisenergiájú asszociációs kötéstípus létezik, ez magyarázatul szolgálhat a tiszta linolsav nagy viszkozitásértékére és erős polimerizációs hajlamára.

A telítetlen kötések 3015 cm^{-1} frekvenciánál megjelenő rezgési sávjának (LiF prizmával felbontva kapjuk) extinkcióértékének növekedése nem arányos a telítetlen kötések számának növekedésével. A vártnál kisebb extinkcióérték a molekulák szénhidrogénlánc közötti H-hidak lehetőségét valószínűsíti.

A telített hosszúlancú zsírsavak infravörös spektroszkópiai vizsgálatánál megállapított eltérések felvilágosítással szolgálhatnak a különböző telítetlenségű, azonos szénlánc-hosszúságú zsírsavak és olajok fizikai tulajdonságainak különbözőségeire, reológiai viselkedésére.

Vizsgálatainkban a száradó és kevésbé száradó telítetlen zsírsavak tulajdonságainak molekulaszervezeti vonatkozásaihoz kívántunk hozzájárulást adni. Infravörös spektroszkópiai méréseink alapján azt tapasztaltuk, hogy igen kis nyomáson és alacsonyabb hőmérsékleten (molekulárdeszillációs körülmények) a desztillációs sorrend megváltozik, az eltérés a molekulák között fellépő asszociációs kötésekre vezethető vissza. További kutatásainkban azt vizsgáljuk, hogy a hosszúlancú zsírsavaknál megfigyelt asszociációs jelenségek milyen hatást gyakorolnak a technológiai folyamatokra.

I R O D A L O M

- (1) Schwarz J. C. B.: Fizikai módszerek a szerves kémiában. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1968.
- (2) Holly S., Sohár P.: Infravörös spektroszkópia. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1968.
- (3) Kaufmann H. P., Volbert F., Mankel G.: Fette, Seifen, Anstrichmittel, 61, 7, 1959.
- (4) Nakanishi K.: Infrared Absorption Spectroscopy, Holden-Day Inc, San Francisco, 1964.
- (5) Erdős-Grúz T., Schay G.: Elméleti fizikai kémia, Tankönyvkiadó, Budapest, 1962.
- (6) Roberts J. D., Caserio M. C.: Modern Organic Chemistry, Benjamin, Inc, New-York, 1967.
- (7) Kössler I.: Methoden der Infrarot-Spektroskopie in der chemischen Analyse, Geerstw. Portig K-G., Leipzig, 1966.
- (8) Fodor G.: Szerves kémia, Tankönyvkiadó, Budapest, 1960.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИНФРАКРАСНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ ЖИРНЫХ КИСЛОТ, I

Э. Биро и П. Биач

Авторы исследовали свойства молекулярноструктурных отношений насыщенных и ненасыщенных жирных кислот методом инфракрасной спектроскопии. У насыщенных жирных кислот с длиноцепным строением, уменьшением длины углеродных цепей повышается димерная ассоциация цикла между молекулами, одновременно при разных ненасыщенных жирных кислотах с идентичным числом углеродных атомов повышением ненасыщенности образуется не только циклическая димерная ассоциация, но и разные силы ассоциации с низкой энергией. Этим объясняется, что при молекулярной дистилляции порядок дистилляции изменился и более насыщенные жирные кислоты обогащаются в первой фракции.

ANWENDUNG DER INFRAROTEN SPEKTROSKOPIE AUF DIE UNTERSUCHUNG DER HOCHMOLEKULAREN FETTSÄUREN

E. Biró und P. Biacs

Die Verfasser untersuchten die molekularstrukturellen Beziehungen der Eigenschaften von gesättigten und ungesättigten langkettigen Fettsäuren mit infraroter Spektroskopie. Bei gesättigten langkettigen Fettsäuren nimmt die cyclische dimere Association zwischen den Molekula mit der Verkürzung der Kettenlänge zu, bei Fettsäuren verschiedenen Sättigungsgrades und der nämlichen Kohlenatomzahl aber treten mit zunehmender Ungesättigtheit nicht nur die cyclische dimere Association, sondern auch mehrere verschiedene Associationskräfte von geringer Energie auf. Damit kann es erklärt werden, dass sich bei der Molekulardestillation die Destillationsfolge umkehrt und in den ersten Fraktionen die mehr gesättigten Fettsäuren angereichert sind.

APPLICATION OF INFRARED SPECTROSCOPY IN THE INVESTIGATION OF HIGH MOLECULAR FATTY ACIDS

E. Biró and P. Biacs

The molecular structure aspects of the properties of saturated and unsaturated long-chain fatty acids have been investigated by the authors by infrared spectroscopic methods. In the case of saturated long-chain fatty acids, the cyclic dimer association between the molecules proved to increase with the decrease of the length of the carbon chain, while in the unsaturated fatty acids of the same number of carbon atoms, besides the cyclic dimer association also several low-energy association forces were observed with the increase of the degree of unsaturatedness. This may be the cause why in the case of molecular distillation the distillation sequence is reversed, and the more saturated fatty acids are enriched in the first fractions.