

H. J. HEDIGER, Zürich: *Die Anwendung der Infrarot-Spektroskopie in der Lebensmittel- und Gerichtsschemie.*

Die Infrarot-Spektrographie fand nur langsam Eingang in die Lebensmittelchemie, denn 1. liegen meist unübersichtliche, inhomogene Mischungen vor, 2. handelt es sich oft um kleine Unterschiede an Substanzen mit hohem Molekulargewicht und 3. beschränkt der hohe Wassergehalt der Proben den brauchbaren Spektralbereich. In letzter Zeit allerdings wurden diese Schwierigkeiten überwunden: Die Messung der integralen Absorption erlaubt es, die genaue Intensität einer Absorptionsbande zu differenzierten Aussagen in der Strukturuntersuchung heranzuziehen. Z. B. zweckmäßig vorbereitete Proben von Milch, Butter, Casein u. a. ergaben wertvolle Infrarot-Spektren, welche Rückschlüsse auf die Qualität der Probe erlaubten. In der gerichtlichen Chemie bereitet oft die Kleinheit der verfügbaren Probenmenge erhebliche Schwierigkeiten. Mit einem Infrarot-Mikrospektrograph, dessen Optik aus sphärischen Spiegeln besteht und der ein spezielles Thermoelement als Empfänger aufweist, können aber Substanzmengen von 5 µg und weniger spektroskopiert werden. Für Fasern, Flüssigkeiten und Festkörper wurden besondere Probenhalterungen konstruiert.

G. CRAMER, Essen: *Desinfektion in Lebensmittelbetrieben.*

Für die Desinfektion in Lebensmittelbetrieben sind phenolische Zubereitungen, Alkalien, Aktivchlor-haltige Mittel oder auch Formaldehyd nur in bestimmten Fällen zu empfehlen. Solche Mittel sollten zur Erhaltung des ursprünglichen Zustands der Nahrungsmittel in der Lebensmittelhygiene nicht verwendet werden. Am besten eignen sich für diesen Zweck die oberflächenaktiven Desinfektionsmittel, die Invert- und Ampholytseifen. Den Invertseifen fehlt jedoch die Wirksamkeit gegen Tuberkulosebakterien. Bestimmte Ampholytseifen töten diese in 10–30 min sicher ab. Die Ampholytseifen erweisen sich außerdem noch indifferent gegenüber Eiweiß. Sie ergeben im Gegensatz zu den Invertseifen keine Fällung mit Rinderalbumin und behalten ihre bakteriologische Wirksamkeit in Gegenwart von Eiweiß in erheblich höherem Maße.

Die Desinfektion großer Flächen und sperriger Güter im Großbetrieb ist durch die Zumischgeräte der Th. Goldschmidt A.-G. erst möglich geworden. Die Händedesinfektion in Lebensmittelbetrieben sollte, da noch keine ausreichend wirksame keimtötende Stückseife zur Verfügung steht, mit einem oberflächenaktiven Desinfektionsmittel als Konzentratwaschung geschehen. [VB 801]

## Symposium über Angewandte IR-Spektroskopie

London, 9. bis 10. April 1956

L. J. BELLAMY, Waltham Abbey: *Neue Fortschritte in der Struktur-Analyse.*

Untersuchungen, wie Gruppenschwingungen nach Frequenz und Intensität durch benachbarte polare Gruppen beeinflusst werden oder gewisse physikalische Molekeleigenschaften sich ändern, sind von Bedeutung, um zwischen zwei möglichen Molekelstrukturen zu entscheiden. So ließ sich die durch Änderung der induktiven und mesomeren Effektes hervorgerufene Verschiebung von Gruppenschwingungen allgemein deuten, und somit u. a. das unterschiedliche Verhalten ebener (z. B. Carbonyl-Gruppe) und nichtebener Gruppen ( $P=O$ ,  $S=O$ ). Da bei solchen Änderungen ein bis zwei weitere Bindungen in der Molekel beteiligt sind, eröffnete sich auch die Möglichkeit, Frequenzverschiebungen von Gruppenschwingungen quantitativ mit anderen Änderungen im Spektrum zu verknüpfen, wie dies bereits bei den Carbonyl- und C–H-Schwingungen in Benzoyl-Verbindungen beobachtet wurde. Am Beispiel von  $H_3C-X$ -Verbindungen wurde diese innere spektrale Verknüpfung ebenfalls nachgewiesen und z. B. die Berechnung aller 6  $CH_3$ -Schwingungen aus der Kenntnis der X–C-Frequenz ermöglicht.

A. ELLIOTT, Durham: *IR-Spektroskopische Untersuchung der Struktur von Polypeptiden und Proteinen.*

In völlig gestreckten Polypeptid-Ketten sind die C=O- und NH-Gruppen annähernd senkrecht zur Kettenachse angeordnet. Die Valenzschwingungen dieser Gruppen zeigen daher bei Aufnahme der Spektren in polarisierter IR-Strahlung maximale Absorption, wenn der E-Vektor senkrecht zur Kettenachse schwingt, wie dies bei Seide und Nylon 66 bekannt ist. Umgekehrten Dichroismus zeigen Polypeptide, deren Ketten in der regelmäßigen, schraubenförmig gewundenen Form nach Pauling, Corey und Branson vorliegen, die durch innermolekulare Wasserstoff-Brücken der hauptsächlich in Kettenrichtung liegenden C=O- und NH-Gruppen stabilisiert wird. Diese dichroitischen Effekte wurden an den Spek-

tren von Poly- $\alpha$ -alanin gezeigt und die bei der Umwandlung der gestreckten in die gewundene Form auftretenden Änderungen im Spektrum diskutiert. Andere Untersuchungsergebnisse wurden im Zusammenhang mit Röntgenstrukturuntersuchungen über die natürlichen Seidenarten und über deren Vergleich mit synthetischen Polypeptiden übermittelt.

H. POWELL, Sunbury-on-Thames: *Differential-IR-Spektroskopie bei Aufgaben der Erdölindustrie.*

Bei der quantitativen Analyse von Gemischen wurde in zunehmendem Maße die Methode der Differentialanalyse verwendet. Ihre Anwendung wurde notwendig, wenn sich die Banden der verschiedenen Komponenten eines Gemisches überlappen und eine Bestimmung einzelner Komponenten schwierig oder unmöglich war. Mit einer Kuvette veränderlicher Schichtdicke im Vergleichsstrahl eines Doppelstrahlspektrometers konnte die Absorption einer oder mehrerer Komponenten eines Gemisches mit nur geringen Einbußen an Einzelheiten im Restspektrum eliminiert werden. Das Verfahren und die Ergebnisse einiger qualitativer und quantitativer Analysen, wie sie in der Erdölindustrie auszuführen sind, wurden u. a. an den Untersuchungen von Gemischen wie iso-Oktan (2,2,4-Trimethylpentan) und n-Heptan, bei der quantitativen Bestimmung von Schmierölzusätzen, von Triäthylenglykol-Spuren in Benzol-n-Heptan-Gemischen und von Zusätzen in Motorenbenzin beschrieben.

J. GAUNT, Harwell: *Anwendung der IR-Spektroskopie in der Atomenergieforschung.*

Die Struktur des für die Gewinnung von  $^{235}U$  äußerst wichtigen  $UF_6$  konnte in den letzten Jahren durch Untersuchung aller Hexafluoride der 6. Gruppe als totalsymmetrischer Oktaeder ( $O_h$ ) sichergestellt werden. Frühere Ergebnisse der Elektronenbeugung und thermodynamischer Messungen, die diesem Befund entgegenstehen, konnten auf Grund neuerer Erkenntnisse mit dieser Struktur in Einklang gebracht werden.

Die äußerst wichtige Kontrolle der Isotopenreinheit des im Reaktor verwandten schweren Wassers gelang durch spektroskopische Bestimmung des HOD-Gehalts mit der Schlüsselbande 2,946 µ durch ein besonderes Meßverfahren im Bereich hoher Extinktionen. Das Prinzip ließ sich auf den ganzen Bereich der  $D_2O-H_2O$ -Mischungen ausdehnen und liefert bei Verwendung billiger, festgestellter Gittermonochromatoren Genauigkeiten, die in der Größe der durch Massenspektroskopie erreichbaren liegen.

D. H. WHIFFEN, Birmingham: *Anwendung der IR-Spektroskopie in der Chemie der Kohlenhydrate.*

Die Identifizierung und Strukturaufklärung von Zuckern und Polysacchariden mit Hilfe der IR-Spektroskopie erwies sich wertvoll, wenn andere Methoden nicht genügend Anhaltspunkte ergaben. So gelang es u. a., Sorbit als mischkristallbildende Verunreinigung von Mannit nachzuweisen, ferner auch, die von verschiedenen Mikroorganismen produzierten Dextrane als im polymeren Aufbau gleich oder verschiedenartig nachzuweisen und zu unterscheiden.

R. G. I. MILLER, H. A. WILLIS, Welwyn Garden City, Herts.: *Quantitative Analyse von synthetischen Polymeren im 2µ-Gebiet.*

Polymere Stoffe, von denen man infolge hoher Viskosität oder der durch Vernetzung hervorgerufenen Unlöslichkeit nur schwer für die quantitative Analyse brauchbare Lösungen herstellen kann, wurden vorteilhaft im kurzwelligen 2µ-Gebiet spektroskopiert. Die Proben wurden durch Heißpressen zu Filmen verarbeitet, die im Gebiet der Oberschwingungs- und Kombinationsbanden z. T. auch noch bei 2 mm Stärke brauchbare Spektren ergeben. Die Vorteile des Verfahrens, u. a. die Möglichkeit der Verwendung einfacher Gitterspektroskopieapparate mit PbS-Zelle und Glasküvetten wurden hervorgehoben. Über Anwendungen der 2µ-Spektroskopie zur Bestimmung des mittleren Molekulargewichtes eines polymeren Stoffes aus der Intensität der Endgruppenschwingung, die Abschätzung des Monomergehaltes in Polymeren und Kopolymeren wurde berichtet.

J. C. HAWKES, St. Louis, USA: *Quantitative Infrarot-Analyse einiger chemischer Produkte.*

Bei der Herstellung von Pentachlorphenol durch Chlorieren von Phenol wurden die Zwischenprodukte, Mischungen von Mono- bis Pentachlorphenol, spektroskopisch analysiert. Es wurden auch Gemische untersucht, die bei der Chlorierung von Phenoxxyessigsäure und bei der Herstellung von p-Phenetidin auftreten; ferner 2 Komponentenmischungen von 2-Hydroxy-4-propenylbenzol und 2-Hydroxy-5-propenylbenzol. Die Fehler der Analysen konnten durch systematischen Ausbau differential-analytischer Methoden unter 0,2–0,3 % gebracht werden. [VB 799]