

5529/88

A

12185

-55968-

ELJÁRÁS KIS KALÓRIATARTALMU ZSIRUTÁNZÓ VEGYÜLETEK ÉS E VEGYÜ-
LETEKET TARTALMAZÓ ÉLELMISZERKÉSZITMÉNYEK ELŐÁLLÍTÁSÁRA

NABISCO BRANDS, Inc., East Hanover, New Jersey,
Amerikai Egyesült Államok

A bejelentés napja: 1988. 08. 12.

Elsőbbsége: 1987. 08. 13. (USSN 085,434)

Amerikai Egyesült Államok

A nemzetközi bejelentés száma: PCT/US88/02732

Neurofiziológiai központtal szembe 89/01293

KÖZZÉTÉTELI PÉLDÁNY

K I V O N A T

A találmány tárgya eljárás új, étkezési célra alkalmas, kis kalóriatartalmu zsirutánzó vegyületek és ilyen vegyületeket tartalmazó élelmiszerkészítmények előállítására.

Az új vegyületek (I) általános képletében

R jelentése szerves csoport;

R' jelentése 1-30 szénatomos alifás, észter- vagy étercsoport, és az R' csoportok azonosak vagy különbözők lehetnek; és

m és n egész számok, amelyek értéke legalább 1, és m és n összege legalább 2.

A találmány szerinti vegyületeket úgy állítják elő, hogy egy (III) általános képletű reagenst - amelyben R, R' és m jelentése a fentiekben meghatározott -

$$\begin{array}{c} \text{O} \\ || \\ \text{R}'-\text{C}-\text{X} \end{array}$$
 általános képletű vegyülettel, amelyben R' jelentése a fentiekben meghatározott, és X halogénatomot jelent, vagy

egy $\text{R}'-\text{CO}_2\text{H}$ általános képletű vegyülettel, amelyben R' jelentése a fentiekben meghatározott -

- reagáltatnak.

A találmány szerinti vegyületek csökkent kalóriaértékét az biztosítja, hogy egyes csoportjaik az emberi emésztőcsatornában lehasadnak, és így a kalóriabevitelhez hozzájárulnak, míg más csoportjaik e hasadással szemben ellenállóak, és a kalória-hasznosuláshoz csak korlátozott mértékben járulnak hozzá.

jell I képlet

Gnie

5529/88

A¹¹

12193

12193/ax

KÖZZÉTÉTELI
PÉLDÁNY

-55968-

US205

A 23 D 7/00
A 61 K 31/00 15

Képviselő:

DANUBIA Szabadalmi és Védjegy Iroda Kft.

ELJÁRÁS KIS KALÓRIATARTALMU ZSIRUTÁNZÓ VEGYÜLETEK ÉS E VEGYÜ-
LETEKET TARTALMAZÓ ÉLELMISZERKÉSZÍTMÉNYEK ELŐÁLLÍTÁSÁRA

NABISCO BRANDS, Inc., East Hanover, New Jersey,
Amerikai Egyesült Államok

Feltalálók:

KLEMANN Lawrence P., Sommerville, New Jersey,
FINLEY John W., Whippany, New Jersey,
Amerikai Egyesült Államok

A bejelentés napja: 1988. 08. 12.

Elsőbbsége: 1987. 08. 13. (USSN 085,434)

Amerikai Egyesült Államok

A nemzetközi bejelentés száma: PCT/US88/02732

Newrebroni korrekciós számok KPO 89/01293

66379-5562 TEL-Sch

A találmány tárgya eljárás étkezési célra alkalmas, zsirutánzó - különösen a kívánt tulajdonságok együttesével rendelkező - új vegyületek és ilyen vegyületeket tartalmazó élelmiszerkészítmények előállítására.

Korunk társadalmában az elhízás általános problémát jelent. Számos egyén esetében az elhízás annak tulajdonítható, hogy kalóriafelvétele nagyobb, mint a kalórialeadása. Jóllehet genetikai és magatartási tényezők az elhízásban lényeges szerepet játszanak, általában egyetértenek abban, hogy a táplálékok (élelmiszerek) kalóriaértékének észszerű módosítása lényeges lehet az elhízásra hajlamos egyének számára abban, hogy testsúlyuk a kívánt egyensúlyi értéket elérje.

Számos élelmiszer - amelynek ize kielégítő - jelentős mennyiségű zsirt tartalmaz. Ez problémát jelenthet olyan egyének számára, akik ezeket az élelmiszereket kedvelik, mivel a zsír kalóriaértéke a fehérjékének és a szénhidrátokénak mintegy kétszerese. Valójában, a becslések szerint az étrend összes kalóriatartalmának körülbelül 40%-a a zsirból ered. Régióta kívánatos az étrend zsirtartalma kalóriaértékének csökkentése anélkül, hogy a zsirtartalmu élelmiszerek vonzereje vagy a jóllakottság érzése csökkenne. Közölték, hogy ez a lehetőség előnyös és gyakorlati módszert jelenthet az elhízás megakadályozására, ideális értelemben a diétázó egyén összes táplálékfelvételének korlátozása nélkül.

Sajnálatos módon a zsirok helyettesítésére mindeddig javasolt anyagok közül csak kevés olyan termék áll rendelkezésre, amely a természetes triglicerid-zsirok és olajok valamennyi kívánt sajátosságaival rendelkezik. A táplálkozási zsirok kalória-

értékének csökkentésére az egyik lehetőségnek mutatkozott az emberi szervezetben felszívódó triglicerid mennyiségének csökkentése, mivel a táplálkozásban általánosan elterjedt triglicerid-zsirok majdnem teljesen felszívódnak (Lipids, II. kötet, kiadó H. J. Denel, Interscience Publishers, Inc., New York 1955, 215). A triglicerid-zsirok felszívódása úgy volt csökkenthető, hogy a molekulának az alkohol- vagy zsírsav-komponensét megváltoztatták. Egyes kísérletek azt mutatták, hogy a trigliceridek felszívódóképessége bizonyos zsírsavak alkalmazásával csökken; ilyen például az erukasav H.J. Denel és munkatársai: Journal of Nutrition 35, 295 (1948) 7, valamint a sztearinsav, ha trisztearin alakjában van jelen F. H. Mattson: Journal of Nutrition 69, 338 (1959) 7. A 2 962 419 számú Egyesült Államok-beli szabadalmi leírásban közlik, hogy olyan zsírsavészterek, amelyek neopentil-csoportot tartalmaznak, nem emészthetők a normális zsirok módjára, s így élelmiszerkészítményekben zsír helyettesítőként alkalmazhatók.

Számos más szabadalmi leírásban ismertetnek táplálkozásra alkalmas, olyan vegyületeket, amelyek nem emészthetők, vagy nem szívódnak fel olyan mértékben, mint a természetes trigliceridek: ilyen sajátosságokkal bírnak állítólag a 3 579 548 számú Egyesült Államok-beli szabadalmi leírásban közölt, bizonyos elágazó szénláncu karbonsavakból képezett glicerinsavészterek. A 3 600 186 számú Egyesült Államok-beli szabadalmi leírásban olyan cukor- valamint cukoralkohol-zsírsavésztercsoportot tartalmaznak. A leírás szerint mindezeknek a vegyületeknek a fizikai sajátosságai a közönséges triglicerid-zsír tulajdonságaihoz hasonlítanak, fogyasztás után azonban kisebb mértékben

szívódnak fel. Sajnálatos módon ez utóbbi vegyületek nemkivánt és adott esetben zavaró mellékhatása, hogy a székllettel való közvetlen ürülésük gátolt.

A szokásos glicerid-észterektől nagyobb eltérést jelent az 1 106 681 számú kanadai szabadalmi leírás, amelyben olyan glicerín-dialkil-éter-származékokat írnak le, amelyek a közlés szerint a közönséges zsirokhoz hasonló funkcionális tulajdonságokkal rendelkeznek, azonban az emésztőcsatornában jelentős mértékben nem szívódnak fel. Ward és munkatársai közölték „New Fat Products: Glyceride Esters of Adipic Acid; JAOCs 36, 667 (1959) 7, hogy olyan, igen viszkózus olajszerű termékek, amelyeket úgy kaptak, hogy két glicerínmolekulát reagáltattak egy kétbázisú savval - például fumársavval, borostyánkőssavval vagy adipinsavval - majd minden egyes glicerinegység egyik hidroxilcsoportját zsírsavval reagáltatták, az élelmiszeriparban főként kenőanyagokként és burkolatként (mázként) alkalmazhatók.

Hamm a 4 508 746 számú Egyesült Államok-beli szabadalmi leírásban kis kalóriatartalmu helyettesítőszerként ismerteti a táplálkozási olajkomponens legalább egy részének a helyettesítésére olajalakú élelmiszerkészítményekben. Ez a helyettesítőszer kis kalóriatartalmu olajkomponensként lényegében egy hővel szemben állandó, 2-4 karboxilcsoportot tartalmazó polikarbonsav és egy 8-30 szénatomos, egyenes vagy elágazó szénláncu, telített vagy telítetlen alkohol észteréből áll „lásd még D. J. Hamm: "Trialkoxi-trikarballilát, trialkoxi-citrát, trialkoxi-gliceril-éter, Jojoba-olaj és szaccharóz-poliészter előállítás és kiértékelése kis kalóriaértékű helyettesítőszerként minősé-

gében táplálkozási zsirok és olajok helyett" (angolul) (J. of Food Science 49, 419 (1984)7.

A 4 582 927 számú Egyesült Államok-beli szabadalmi leírásban egyes diésztereket ismertetnek, amelyek célja a zsír természetes tulajdonságainak az utánzása. E vegyületek legalább két olyan karboxilátcsoportot tartalmaznak, amelyek közös szénatomhoz kötődnek, és mindegyik karboxilátcsoport 12-18 szénatomos alkil-, alkenil- vagy dienil-alkohol maradékát tartalmazza.

Csökkenett felszívódóképességű és ennek következtében csekély kalóriatartalmú, zsirszerű vegyületek előállításában az egyik fő nehézség a táplálkozási zsír kívánatos és megszokott fizikai tulajdonságainak a megtartása. Így például, ha gyakorlatilag csekély kalóriaértékű zsirt óhajtunk előállítani, akkor az adott vegyületnek utánoznia kell a szokásos triglicerid-zsirt, hogy a különböző, zsirtartalmú élelmiszerkészítményekben - így a főzőmargarinban, növényi zsiradékokban, tésztakeverékekben - továbbá sütés során is alkalmazható legyen. Sajnos, az eddigi kísérletek nem hoztak olyan mértékű sikert, hogy a kapott termékeket célzott felhasználásukra engedélyezzék (biztonsági okokból), és arra sem alkalmasak, hogy a nagyközönség általánosan elfogadja.

A fel nem szívódó, zsirszerű anyagokkal kapcsolatban további problémaként merül fel az a lehetőség, hogy a zsiroldható vitaminokat és ásványi anyagokat elvonják a szervezetből, és - nagyobb mennyiségben alkalmazva - hashajtóként működnek. E problémák és hasonló nehézségek megoldására számos kísérletet tettek; jobb megoldásnak mutatkozik azonban olyan vegyületek kidolgozása, amelyek jobban összeegyeztethetők az ember emész-

tési folyamatával, s emellett kalóriatartalmuk a glicerid-zsirokkal összehasonlítva lényegesen kisebb.

Azt találtuk, hogy a fenti célok megvalósíthatók a zsirutánzó vegyületek új csoportjával, és ezeket az új vegyületeket tartalmazó élelmiszerkészítménnyel. Ezek az új zsirutánzó vegyületek legalább egy zsiralkohol és legalább egy zsirsav valamilyen hidroxikarbonsavval alkotott észterei.

Ezekben az új vegyületekben a molekula gerincét képező láncból karboxilát- és karboxilcsoportok nyulnak ki, ezért a vegyületeket az alábbiakban karboxi/karboxilát-észtereknek nevezzük, amelyek (I) általános képletében

R jelentése szerves csoport;

R' jelentése 1-30 szénatomos alifás, észter- vagy étercsoport, és az R' csoportok azonosak vagy különbözők lehetnek; és

m és n egész számok, amelyek értéke legalább 1, és m és n összege legalább 2.

Az (I) képletben az R csoport a glicerínmaradékhoz hasonlít, amely a természetes zsirok molekulájának gerincét képezi. Az n és m összege, azaz a molekula R gerincrésszéhez kapcsolódó karboxil- és karboxilátcsoportok számának összege, a gerincrészen való elhelyezkedésük, a gerincrész szerkezete, és a különböző R' csoportok választása a célzott vegyület kívánt biológiai és fizikai sajátosságaitól függ.

Az (I) általános képletben az R csoportnak - amely a molekula gerincrészét képviseli összetétel, konfiguráció és méret szempontjából - a kapcsolódó R' karboxil- és karboxilátcsoportokkal együtt - elfogadható, zsirutánzó molekulát kell

szolgáltatnia. Az R csoportot szubsztituálatlan vagy szubsztituált alifás vagy karbociklusos csoportok közül választjuk. Az R csoport méretét nem kell korlátoznunk, és az R csoportban bármely szénatom vagy hidrogénatomok kén-, nitrogén- vagy oxigénatommal helyettesíthetők; általában azonban az R csoport legfeljebb 20 szénatomot tartalmaz.

Jóllehet m és n értékeinek felső határai nincsenek, a szintézis gyakorlata szempontjából m és n összege általában nem haladja meg a 25-öt, és általában 12-nél kevesebb. Az m és n arányának a megválasztása, továbbá az alkalmas R és R' csoportok kiválasztása és az R' csoportok R gerincalkotó csoporton való elhelyezkedése a célvegyületeknek mind biológiai, mind fizikai sajátosságait befolyásolja. Ha bármely fenti tényező következtében több kapcsolódó csoport metabolizálódik, akkor a zsirutánzó vegyület kalóriaértéke növekszik. A találmány szerinti legelőnyösebb vegyületek kalóriaértéke a közönséges glicerid-zsirok kalóriaértékének harmadrésze, általában 50-90 százalékkal kevesebb a glicerid-zsirok kalóriaértékénél. Az m aránya n-hez 1:10-től 3:1-ig terjedhet, pontosabban 1:8 és 1:1 között van.

Az R' csoportok hasonlóak a természetes zsirok zsirsavcsoportjainak alifás egységeihez, ezek a csoportok bármilyen alifás, észter- vagy étercsoportok lehetnek, amelyek zsirutánzó termékek kialakítására alkalmasak. Ilyen csoportok például az alifás zsirsav- vagy zsiralkoholcsoportok. Az étercsoportok általános szerkezete az $-R''-O-R'''$ képlettel foglalható össze, amelyben R'' és R''' alifás csoportot jelentenek. Az észtercsoportok általános képlete $-R''-C(=O)-OR'''$ ahol R'' és R''' jelen-

tése a fentiekben meghatározott.

A találmány szerinti vegyületek bármilyen ehető termékben vagy bármely élelmiszerelőállítási eljárásban alkalmazhatók - ahol zsirt vagy olajat, azaz triglicerid-zsirt használnak - azok teljes vagy részleges helyettesítésére.

A találmány szerinti vegyületek szerkezeti típusának, molekulaméretének és a szénhidrogéncsoportok (hidrokarbilszoportok) számának megfelelő választásával a kalóriatartalom célzott csökkentése valósítható meg, miközben a találmány szerinti zsirutánzó anyagok tulajdonságainak a kombinációjával maximális előny érhető el.

Az alábbiakban "zsiron" akár szilárd, akár folyékony vagy képlékeny konzisztenciájú teméket értünk. A "fogyasztásra alkalmas termék" széles értelemben bármilyen fogyasztásra alkalmas terméket jelent, olyant is, amelynek a célja nem a táplálkozás; ez lehet például egy antioxidáns zsirok vagy olajok esetében; foltosodás elleni szer; emulgeálószer; anyagok texturáját módosító termék, például plasticizálószer rágógumik előállításához; vagy más kis mennyiségben jelen lévő funkcionális komponens, például vivőanyag vagy higitószer például izesítő készítményekben, gyógyászati készítményekben. Ezek a készítmények például rágógumik, izesített bevonatok, kizárólag sütés céljára alkalmazott olajok és zsirok és hasonló készítmények. E készítményekben a szokásos zsír részben vagy teljesen egy találmány szerinti vegyülettel helyettesíthető, amelynek konzisztenciája a helyettesítendő zsír állagához hasonló, például folyékony, képlékeny vagy szilárd.

Azokra a táplálkozásra alkalmas termékekre, amelyekben a

találmány szerinti zsirutánzó vegyületek a természetes zsír teljes vagy részleges helyettesítésére alkalmazhatók, példaként említjük a következőket: fagyasztott édességek, például szörbet, fagylaltfélék, tejes turmixitalok; puddingok és vajtészta töltetei; margarinok és keverékeik; izesített kenyér- vagy kétszersült-bevonatok; majonéz; salátaöntetek, akár emulgeált, akár nem-emulgeált állapotban; töltött élelmiszertermékek, például krém- vagy tejtermékes töltetek; sajtermékek; folyékony vagy szárított kávétejporok és kávétejszin; sütésre alkalmazott zsirok és olajok; izesített öntetek; sült és aprított hustermékek; hushelyettesítők vagy husszapóritók; habfeltétek; összetett bevonatok; cukormázak és töltetek; kakaóvaj-pótszerek és keverékeik; kandirozott cukor, különösen zsiros kandirozott cukrok, például mogyoróvaját vagy csokoládét tartalmazó kandirozott cukrok; rágógumik; péktermékek, például péksütemények, kenyér, kenyérfajták, cukrászsütemények, kétszersültek, édestészta, kekszfélék; az előbbiekek keverékei vagy premix-termékei; valamint izesítőszer, tápszerek, hatóanyagfelszabadító rendszerek és segédanyagok.

A találmány szerinti karboxil/karboxilát-észterek akár lágy, akár kemény margarinokban alkalmazhatók. A margarinokat általában két fő típus alakjában hozzák forgalomba, ezek: kemény margarin (rudalakban) és a lágy margarin (tubusban). Mindkét típusu margarin folyékony és szilárd alapkomponeenseket tartalmaz. A jelen találmány szerinti zsirutánzó vegyületek egyik előnye, hogy alkalmazásukkal a közönséges margarinok kemény alapállománya részben vagy teljesen kiküszöbölhető, így a többszörösen telítetlen zsirsavak telített zsirsavakhoz vi-

szonyított aránya magasabb, és a transz-izomerek mennyisége csekélyebb a jó minőségű margarintermékekben.

Az (I) általános képletű vegyületekben az R csoport szubsztituálatlan vagy szubsztituált, alifás vagy karbociklusos, általában legfeljebb 20 szénatomos csoport. Ilyen csoportok például: a szaccharóz, fruktóz, glükóz és maltóz származékaiból levezethető csoportok, amelyek gyűrűs szerkezetükben oxigént tartalmaznak: e csoportok a molekula gerincrészt képviselik, és természetesen hidroxilcsoportokat kell tartalmazniuk a zsírsavakkal végbemenő reakció céljára, vagy egy vagy több karboxilátcsoport más módon történő kialakítására, amint ezt az (I) általános képlet mutatja.

Az R' csoportok hasonlóak a természetes zsirokban lévő zsírsavcsoportokhoz, amennyiben a molekula gerincrésséhez kapcsolódnak. Ezek az R' csoportok bármilyen alifás, észter- vagy étercsoportok lehetnek, amelyek zsirutánzó anyagok felépítésére alkalmasak; ilyen alifás csoportok például a zsírsav- és zsíralkoholcsoportok, például a természetes zsirokban is található szerkezettel. A jelen találmány értelmében azonban olyan sav- és alkoholcsoportokat is alkalmazhatunk, amelyek a természetes zsirokban nem szerepelnek. Az alifás csoportok egyenes vagy elágazó szénláncuak, telítettek vagy telítetlenek lehetnek. Ezenfelül a természetes zsirok hidrolízise során kapott zsírsavkeverékek is alkalmazhatók. Az étercsoportok általános képlete $-R''-O-R'''$, amelyben R'' és R''' jelentése általában 1-15, közelebbről 2-10 szénatomos alifás csoport. Az észtercsoportok általános képlete $R''-C(=O)-OR'''$, ahol R'' és R''' jelentése a fentiekben meghatározott.

A találmány szerinti karboxi/karboxilát-észterek "gerinc-része" az észtercsoportok kapcsolódási helye. A gerincrészhez kapcsolódó észtercsoportok karboxi- vagy karboxilátszármazékok; a karboxiszármazékok hasonlóak a természetes trigliceridekben található észtercsoportokhoz, és gerincrészükben kovalensen kötött észter-oxigént tartalmaznak, míg a karboxilátszármazékok konfigurációja pontosan megfordított (mivel a karboxilát-szénatomot tartalmazzák kovalens kötésben a gerincrészben).

A karboxi- és karboxilátcsoportok egyidejű jelenléte egy meghatározott gerincrészen világos megkülönböztetést jelent a technika jelenlegi állása szerint ismert szerkezetű olyan vegyületektől, amelyekről közölték, hogy csekély kalóriatartalmu olaj- és zsirhelyettesítő anyagok. A találmány szerinti vegyületek új szerkezete - amelyet a karboxi- és karboxilátcsoportok egyidejű jelenléte biztosít, számos határozott előnyt jelent a jelenleg ismert olyan anyagokkal szemben, amelyeket zsir- és olajanalógokként igényeltek.

Az előnyös vegyületekben a molekula szén-gerincrészéhez kapcsolódó karboxi- és karboxilátcsoportok az emésztő enzimek hatására végbemenő hasítás szempontjából különböző reakcióképességet mutatnak. Ennek eredménye nemcsak abban áll, hogy effektív kalóriaértékük szabályozható, és biológiai hasznosulásuk korlátozott, hanem abban is, hogy a zsirutánzó vegyület szelektíven alakul át kevésbé zsirszerű (olajszerű) terméké vagy közbenső terméké. A könnyebben emészthető karboxilsavcsoportok - azaz a karboxi-funkciós csoportok - igen kívánatos, esszenciális savszármazékok, vagy táplálkozás szempontjából

előnyös karbonsavak maradékai lehetnek, amilyen például: az olajsav, linolsav, linolensav és az eikozapentaénsav, valamint a rövid szénláncu karbonsavak, például az ecetsav, propionsav, vajsavak, amelyek a kalóriafelszabadulást korlátozzák. A fentebb említett, szabályzott emésztési folyamat terméke kevésbé hidrofób, és ennek megfelelően hidrofilebb a zsirutánzó prekursorhoz képest. Egy ilyen, szabályzott emésztési folyamatból származó terméknek nemcsak az olajszerűsége csekélyebb, hanem emulgeálóképessége is nagyobb. Ez a szabályzott emésztésből származó termék kevésbé hajlamos arra, hogy a gyomor-bélrendszerben tartósan megmaradó olaj legyen, ha ezt a technika állása szerint jelenleg ismert vegyületekkel összehasonlítjuk. Ideális értelemben a találmány szerinti vegyületekből enzimhatásra létesülő hasadási termék megnövekedett emulgeálóképessége kifejezetten elősegíti az emésztést, s így kiküszöböl egy jelentős nehézséget, amely mindeddig gátolta az igen kívánatos, csekély kalóriaértékű szintetikus zsirok és olajok széleskörű kidolgozását és alkalmazását élelmiszerekben és készítményekben.

A találmány szerinti vegyületek előállítására során a karboxilsav- és az alifás alkoholegységeket egymást követően vezethetjük be, s így ilyen jól definiált funkciós és izomer csoport sajátságokkal rendelkező vegyületeket kaphatunk. A molekula felépítésének ez a logikus folyamata - amelynek során standard kémiai módszereket alkalmazunk, amint ezt az alábbi példákban bemutatjuk - lehetővé teszi karboxilsavak és alifás alkoholok természetes vagy szintetikus keverékeinek, valamint jelentősen elágazó szénláncu karboxilsavak és alifás alkoholok

keverékeinek az alkalmazását.

A jelen találmány egyik további előnye, hogy lehetővé teszi új molekulák szerkezetének és zsirutánzó sajátságainak a megtervezését, amelyek molekulatömege és olvadásponttartománya, valamint viszkozitási sajátságai molekuláris szinten pontosan szabályozhatók, s így a természetes zsirok és olajok esetében talált, kivánatos tartományban tarthatók. Ennek következtében a találmány szerinti vegyületekkel az élelmiszertermékekben alkalmazott természetes zsirok és olajok funkciós csoportjai és sajátságai szorosan megközelíthetők.

Ha a molekula gerincét képviselő R csoport lineáris, akkor a találmány szerinti

karboxil/karboxilát-észterek egyik csoportja a (II) általános képlettel jellemezhető, ahol

C jelentése szénatom;

X jelentése: hidrogénatom; hidroxilcsoport; rövid szénláncu, előnyösen 1-4 szénatomos, szubsztituálatlan vagy szubsztituált alifás csoport, és az X csoportok azonosak vagy különbözők lehetnek;

Q jelentése $-C(=O)-O-R'$ (karboxilát) csoport, $-CH_2-C(=O)-O-R'$ (metil-karboxilát) csoport, $-O-C(=O)-R'$ (karboxi) csoport vagy $-CH_2-O-C(=O)-R'$ (metil-karboxi) csoport,

azzal a megkötéssel, hogy mindegyik molekula legalább egy karboxi- vagy metil-karboxi-, és legalább egy karboxilát- vagy metil-karboxilát-csoportot tartalmaz;

R' jelentése (a) általános képletű, szubsztituált vagy szubsztituálatlan szerves csoport, és az R' csoportok azonosak vagy különbözők lehetnek;

- T jelentése: hidrogénatom; vagy legfeljebb 22 szénatomos, 0-5 telítetlen kötést - például C=C kettős kötést vagy C≡C hármas kötést - tartalmazó, szubsztituátlan vagy szubsztituált alifás csoport;
- Z jelentése hidképző (például szénhez kapcsolódó) vegyérték-kötés; vagy hidrogénatom; vagy valamilyen alkoholból származó csoport (alkoholmaradék); vagy $-O-C(=O)-CH_2-T$ általános képletű glikolésztercsoport; vagy étercsoport, azzal a megkötéssel, hogy egy R' csoport csak egyetlen hidképző vegyértékkötést tartalmazhat; és
- a értéke 0-3, előnyösen 0-2;
- b értéke 0-4, előnyösen 0-1;
- d értéke 1 vagy 2;
- e értéke 0-5, előnyösen 1 vagy 2;
- f értéke 0-3, előnyösen 0-2;
- g értéke 0-4, előnyösen 0-1; és
- h értéke 1 vagy 2.

Előnyösen 2-5 Q csoport foglal magában R' csoportként legalább 5 szénatomos, előnyösen 8-22 szénatomos alkil-, alkenil-, alkil-dienil-, alkil-trienil-, vagy alkinilcsoportot.

Általában legalább 5 szénatomos, telített vagy telítetlen alifás részt tartalmazó zsiralkoholokat alkalmazunk. Az előnyös R' csoportok például a vajsav, laurinsav, palmitinsav, sztearinsav, olajsav, linolsav, linolénsav, arachidonsav, dodekánsav, hexánsav, mirisztinsav, heptadekánsav, oktánsav, undekánsav és hexadekánsav szénláncát, vagy természetes zsirokból származó keverékeknek megfelelő hidrogénezett vagy nem hidrogénezett szénláncokat vagy a megfelelő zsiralkoholokból

származó szénláncokat tartalmazzák. Ebből a szempontból előnyös zsiralkohol például az oleil-, linoleil-, linolenil-, sztearil-, palmitil-, mirisztil-, lauril-, kapril-, eikozapentaenil-alkohol. Az előnyös zsirsavak szénláncának hossza és konfigurációja hasonló. Ha R' alifás csoportot jelent - a fenti meghatározás szerint - akkor általában természetes zsirsavakból vagy ezek redukált alkoholtermékeiből származik.

Az előnyös, lineáris gerincű vegyületek a metán-, etán-, propán-, bután-, és pentán-karbonsavakon alapulnak, legalább két karboxilsavcsoportot és legalább egy hidroxilcsoportot tartalmaznak. A karboxilsavcsoportok száma előnyösen legfeljebb eggyel nagyobb, mint a molekula gerincében lévő szénatomok száma, és a hidroxilcsoportok száma előnyösen nem haladja meg a karboxilsavcsoportok számát. Egyes esetekben előnyös, ha a hidroxilcsoportok karboxilsavcsoportokhoz viszonyított aránya 1:2-nél kisebb.

A számos alkalmazás szempontjából előnyös karboxil/karboxilát-észterek olvadásponttartománya körülbelül 37°C alatt van, mivel ezek az anyagok a szájban teljesen megolvadnak, és így a természetes zsirok és olajok érzetét keltik. Egyes termékek esetében viszonylag éles - például 32 és 37°C közötti - olvadásponttartomány kívánatos, mivel ezek a termékek a lehűlés érzetét keltik, és olvadásuk a jó minőségű, szilárd természetes zsirok olvadásával megegyezik.

Az alábbiakban - a korlátozás jellege nélkül - példaként nevezzük meg az (1)-(27) képletű és (28) általános képletű vegyületeket, ahol az R' csoportok jelentése egymástól független, és a fentiekben meghatározott, és i , valamint k értéke

egymástól függetlenül 0 vagy 1. A példaként említett vegyületek kémiai neve az alábbi:

- (1) (sztearoil-oxi)-metándikarbonsav-didecil-észter,
- (2) 2-(sztearoil-oxi)-1,1-etándikarbonsav-didecil-észter,
- (3) 1-(oktanoil-oxi)-etándikarbonsav-1-decil-2-sztearil-
-észter,
- (4) 1-(hexanoil-oxi)-etántrikarbonsav-1-sztearil-2,2-dido-
decil-észter,
- (5) 2-(mirisztoil-oxi)-1,3-propándikarbonsav-dioleil-ész-
ter,
- (6) 3-(heptadekanoil-oxi)-1,2-propándikarbonsav-dioleil-
-észter,
- (7) 4-(oleil-oxi)-1,3-butándikarbonsav-dipalmitil-észter,
- (8) 2-(palmitoil-oxi)-1,4-butándikarbonsav-dimirisztil-
-észter,
- (9) 4-(mirisztoil-oxi)-1,2-butándikarbonsav-1-dodecil-2-
-sztearil-észter,
- (10) 4,5-di(sztearoil-oxi)-1,2,3-pentántrikarbonsav-triole-
il-észter,
- (11) 5-(oktanoil-oxi)-4-metil-4-hidroxi-1,2,3-pentántrikar-
bonsav-trisztearil-észter,
- (12) 3-(oleil-oxi)-1,2,4,5-pentántetrakarbonsav-tetrasztea-
ril-észter,
- (13) 5-(oktanoil-oxi)-1,2,3,4-pentántetrakarbonsav-tetra-
oleil-észter,
- (14) 2-(oleil-oxi)-1,3,4,5-pentántetrakarbonsav-tetrasztea-
ril-észter,
- (15) 2,4-di(metil-palmitoil-oxi)-3-(2,2-dimetil-propanoil-
-oxi)-1,5-di(mirisztoil-oxi)-pentán-2,4-dikarbonsav-

- dioleil-észter,
- (16) 2-(2,2-dimetil-propanoil-oxi)-1,3-propándikarbonsav-di-decil-észter,
- (17) 2-(oleil-oxi)-1,3-propándikarbonsav-dioleil-észter,
- (18) 1-(mirisztoil-oxi)-1,3-propándikarbonsav-dioleil-észter,
- (19) 1-(oleoil-oxi)-1,3-propándikarbonsav-dioleil-észter,
- (20) 3-(oleoil-oxi)-1,5-pentándikarbonsav-dioleil-észter,
- (21) 2-(mirisztoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-dioleil-észter,
- (22) 2-(oleoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-dioleil-észter,
- (23) 2-(palmitoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-didecil-észter,
- (24) 2-(mirisztoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-hexadecil-oleil-észter, ahol R jelentése a $-(CH_2)_{15}CH_3$ és $-(CH_2)_8CH=CH(CH_2)_7CH_3$ csoportok 50:50 arányu keveréke,
- (25) 2-(mirisztoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-didodecil-észter,
- (26) 1,3-di(oleoil-oxi)-2,2-propándikarbonsav-dioleil-észter, valamint
- (27) 1,3-di(oleoil-oxi)-2-metil-2-propánkarbonsav-oleil-észter.

További példaként említjük:

a (29) általános képletű vegyületeket, ahol: R' csoportok jelentése egymástól függetlenül a fentiekben meghatározott; I és J jelentése egymástól függetlenül hidrogénatom, metilcsoport, vagy vegyértékkötés; vagy I és J együttesen hidképző alifás egységet képeznek; és j és k értéke egymástól függetlenül 0 vagy 1; azzal a megkötéssel, hogy az I és J-t magában foglaló láncban a szénatomok száma 3-6, gyűrűs vegyület esetében 5 vagy 6;

a (30) általános képletű vegyületeket, ahol: R' csopor-

tok jelentése egymástól független, és a fentiekben meghatározott;
és i értéke 0, 1, 2

vagy 3;

a (31) általános képletű vegyületeket, ahol R' jelentése a fentiekben meghatározott;

a (32) általános képletű vegyületeket, ahol R' jelentése a fentiekben meghatározott;

a (33) általános képletű vegyületeket, ahol R' jelentése a fentiekben meghatározott;

a (34) általános képletű vegyületeket, ahol R' jelentése a fentiekben meghatározott;

a (35) általános képletű vegyületeket, ahol R' jelentése a fentiekben meghatározott;

a (36) általános képletű vegyületeket, ahol R' jelentése a fentiekben meghatározott;

a (37) általános képletű vegyületeket, ahol R' jelentése a fentiekben meghatározott;

a (38) általános képletű vegyületeket, ahol

A és B jelentése egymástól függetlenül $-CO_2R'$ vagy $-O_2CR'$ általános képletű csoport;

D jelentése hidrogénatom, hidroxilcsoport, $-CO_2R'$ vagy $-O_2CR'$ általános képletű csoport;

R 1-5 szénatomos alifás csoportot jelent; és

R' 4-30 szénatomos, alifás vagy karbociklusos csoport;

A, B és D jelentését úgy választjuk, hogy legalább egyetlen $-CO_2R'$ és $-O_2CR'$ párt tartalmazzon;

a (39) általános képletű vegyületeket, ahol

A, B és L jelentése egymástól függetlenül $-CO_2R'$ vagy $-O_2CR'$

általános képletű csoport;

D, Y, F, D', Y', F' és D'' jelentése egymástól függetlenül hidrogénatom, hidroxil-, metilcsoport, $-CO_2R'$ vagy $-O_2CR'$ általános képletű csoport;

i, j és k értéke egymástól függetlenül 0 vagy 1; és

R' 4-30 szénatomos alifás vagy karbociklusos csoportot jelent,

azzal a megkötéssel, hogy az alkánvegyületen legalább egy $-CO_2R'$ és legalább egy $-O_2CR'$ általános képletű csoport kötődik szubsztituensként; és D', D'', Y' és F' jelentését úgy választjuk, hogy a szénlánc nem tartalmaz egymással szomszédos olyan szénatomokat, amelyek kizárólag hidrogénatomot vagy metilcsoportot, vagy hidrogénatomot és metilcsoportot hordoznak.

Az élelmiszeradalékok céljára legelőnyösebb karboxil/-karboxilát-észterekből a szervezetben lévő emésztőenzimek hatására olyan csoportok hasadnak le, amelyek normális úton metabolizáló zsírsavakat eredményeznek, továbbá karboxilátcsoportok keletkeznek, amelyek hidrofil/lipofil egyensúlya (HLB-értéke) hatásosan mérsékli a maradék olajszerű sajátosságait, s így mérsékli a gyomor-bélcsatorna erős befolyását. Ezek a karboxilát-típusú maradékok önmagukban új vegyületek.

A találmány szerinti eljárást az alábbi, nem korlátozó jellegű kiviteli példákban részletesen ismertetjük. Ha külön megjegyzést nem teszünk, akkor a példákban a részek tömegrészeket a százalékos értékek tömegszázalékokat jelentenek.

1. példa

Ebben a példában bemutatjuk egy találmány szerinti zsir-utánzó anyag előállítását a közbenső termékeken át a céltermékig.

1,3-Acetondikarbonsav-didecil-észter előállítása

0,82 g (0,005 mol) triklór-ecetsav, 33,56 g (0,212 mol, körülbelül 5 mol% felesleg) és 17,42 g (0,100 mol) 1,3-acetondikarbonsav-dimetil-észter keverékét 250 ml térfogatu, egy-nyaku, mágneses keverővel és vákuumvezetékkel ellátott lombikba helyezzük, és körülbelül 20 kPa nyomás alatt tartva erélyes keverés közben 3 órán át 130-140 °C hőmérsékleten melegítjük olajfürdőben. Ezen időtartam alatt 6,37 g (elméletileg 6,41 g) tömegveszteség figyelhető meg. Így körülbelül 44,6 g (lényegében kvantitatív) hozammal homogén, szintelen folyadékot kapunk.

$^1\text{H-NMR}$ szinkép (CDCl_3 , δ ppm): 4,31 (4H, t, $-\text{OCH}_2$); 3,61 (4H, s, $\text{O}=\text{C}-\text{CH}_2-\text{CO}_2$); 1,64 (4H, m, alkoholos $-\text{CH}_2-$); 1,27 (28H, m, alkoholos $-\text{CH}_2-$); 0,88 (6H, t, $-\text{CH}_3$).

2-Hidroxi-1,3-propándikarbonsav-didecil-észter előállítása

Mágneses keverővel, hőmérővel és gázelvezővel ellátott 500 ml-es lombikba 4,36 g (körülbelül 115 mmol) nátrium- $\underline{\text{t}}$ tetrahidrido-borát $\underline{\text{7}}$ -ot, 100 ml körülbelül 5 °C hőmérsékletű jég-viz-keveréket, 17,18 g (40,3 mmol) 1,3-acetondikarbonsav-didecil-észtert és 50 ml pentánt mérünk, majd a kétfázisú keveréket szobahőmérsékleten 3 órán át erélyesen keverjük. A felső fázist elkülönítjük, 100 ml desztillált vízzel mossuk, vízmentes magnézium-szulfáton szárítjuk, és szűrés után a pentá-

nos oldatot vákuumban forgóbepárló készüléken bepároljuk.

Igy 15,2 g szalmaszinű olajat kapunk (a hozam körülbelül 88%).

$^1\text{H-NMR}$ -szinkép (CDCl_3 , δ ppm): 4,44 (1H, kettős kvintett, metin-H); 4,09 (4H, t, O- CH_2), 3,49 (d, $J=4,3$ Hz, 1H, -OH); 2,54 (4H, d, $J=6,3$ Hz, O=C- CH_2 - CO_2); 1,62 (4H, m, alkoholos - CH_2 -); 1,25 (28H, m, alkoholos - CH_2 -); és 0,87 (6H, t, - CH_3).

Homonukleáris COSY vizsgálat alátámasztja az -OH helyével kapcsolatos A_2MX spinrendszert. A termék reagálatlan decil-alkoholt tartalmaz.

2-(2,2-Dimetil-propanoil-oxi)-1,3-propándikarbonsav-
-didecil-észter előállítása

4,28 g előbbi lépésből származó termék (0,01 mol), és 0,012 mol trimetil-acetil-klorid 25 ml tetrahidrofuránnal készült oldatához 5 perc alatt 1,09 g (0,011 mol) trietil-amin és 20 ml tetrahidrofurán elegyét csepegtetjük keverés közben. Az elegyet másnapig keverjük, majd szüréssel 1,0 g fehér, szilárd terméket kapunk (a képződő trietil-ammónium-klorid elméleti tömege 1,38 g). A szürletet bepároljuk, a maradékot 50 ml pentánban oldjuk, az oldatot 100 ml vizes nátrium-karbonát oldattal mossuk, majd vízmentes magnézium-szulfáton száritjuk. Szürés és a pentán lepárlása után 4,18 g halványsárga, olajszerű terméket kapunk (az elméleti tömeg 5,1 g). A termék $^1\text{H-NMR}$ -szinképe (CDCl_3 -ban) azt mutatja, hogy az -OH protonja eltűnt, és 4,52 ppm-nél egy új metin-proton kvintett jelentkezik, ami összhangban van azzal a ténnyel, hogy a cím szerinti vegyület karboxil-funkciós csoportot tartalmaz.

A termék a szájban a növényi olajok ízének érzetét kelti.

2. példa

2-(Mirisztoil-oxi)-1,3-propándikarbonsav-dioleil-észter előállítása

A közbenső termékek előállítása:

1,3-Acetondikarbonsav-dioleil-észter előállítása

Desztilláló feltéttel, hőmérővel és teflonbevonatu keverővel ellátott 2000 ml-es lombikba 9,8 g (0,06 mol) triklór-ecetsavat, 139,3 g (0,80 mol) 1,3-acetondikarbonsav-dimetil-észtert és 451,1 g (1,68 mol) oleil-alkoholt mérünk, a lombikot körülbelül 20 kPa csökkentett nyomás alá helyezzük, és 17 órán át 130-140 °C hőmérsékleten melegítjük. Így világos-narancsszinű, olajszerű anyagot kapunk kvantitatív hozammal. A termék ¹H-NMR-szinképe a várt szerkezettel összhangban van. ¹H-NMR-szinkép (CDCl₃, δ ppm): 5,35 (4H, =C-H); 4,13 (4H, O-CH₂-); 3,61 (4H, O=C-CH₂-CO₂); 2,01, 1,62 és 1,27 (56H, C-CH₂-C); és 0,88 (6H, -CH₃).

2-Hidroxi-1,3-propándikarbonsav-dioleil-észter elő- állítása

Mágneses keverővel és hőmérővel felszerelt 1000 ml-es lombikba 11,23 g (0,3 mol) nátrium-tetrahidrido-borát₇-ot, 400 ml jég-viz-keveréket, 97,06 g (körülbelül 0,15 mol) 1,3-acetondikarbonsav-dioleil-észtert és 200 ml pentánt mérünk. Az elegyet 7 órán át erélyesen keverjük, majd telített nátrium-klorid oldatot és további mennyiségű pentánt adunk hozzá, a szerves réteget elkülönítjük, és 5%-os sósavoldattal, majd desztillált vízzel mossuk. A pentános réteget vizmentes mag-

nézium-szulfáton szárítjuk, szűrjük, bepároljuk. Így 83,9 g (86 mol%) hozammal világos, szalmaszinű olajat kapunk, amelynek $^1\text{H-NMR}$ -szinképe a várt szerkezettel összhangban van.

$^1\text{H-NMR}$ -szinkép (CDCl_3 , δ ppm): 5,35 (4H, =C-H); 4,46 (1H, metin-proton); 4,10 (4H, O-CH₂-); 3,45 (1H, -OH); 2,55 (4H, O=C-CH₂-CO₂); 2,00, 1,63 és 1,26 (56H, C-CH₂-C); és 0,88 (6H, -CH₃). A termék körülbelül 8% nem redukált 1,3-acetondikarbonsav-dioleil-észtert tartalmaz.

2-(Mirisztoil-oxi)-1,3-propándikarbonsav-dioleil-észter előállítása

6,49 g (körülbelül 0,01 mol) 2-hidroxi-1,3-propándikarbonsav-dioleil-észter és 2,92 g (körülbelül 0,012 mol) mirisztoil-klorid elegyét 22 órán át körülbelül 27 kPa vákuumban 110 °C hőmérsékleten melegítjük. Így 8,81 g tiszta, narancsszinű, olajszerű terméket kapunk, ami 95 mol%-nál nagyobb hozamot jelent. A termék $^1\text{H-NMR}$ -szinképe a várt szerkezettel összhangban van.

$^1\text{H-NMR}$ -szinkép (δ , ppm): 5,51 (1H, metin-proton); 5,35 (4H, =C-H); 4,07 (4H, O-CH₂-); 2,70 (4H, O=C-CH₂-CO₂); 2,27, 2,01, 1,61 és 1,27 (8 OH, C-CH₂-C); és 0,88 (9H, -CH₃).

E termék növényi olajokhoz hasonló, olajszerű folyadék.

3. példa

E példában megmutatjuk, hogy a 2. példa szerint előállított zsirutánzó termék élő emlősből származó emésztő enzim hatására szelektív enzimes hidrolizist szenved, és egy lényegesen hidrofílebb jellegű hasadási terméket eredményez, amely

ettől függetlenül emulgeáló sajátságokkal rendelkeznek.

Patkányoknak 10 mg/testsúly-kg mennyiségben 2-(mirisztoil-oxi)-1,3-propándikarbonsav-dioleil-észtert adagolunk gyo-morszondán át, majd 2 nap elmultával az állatok székletét összegyűjtjük. A székletmintát liofilizáljuk, és zárt ampullá-ban tároljuk. A liofilizált székletanyag 1,0 tömegű mintáját mechanikusan őrljük, majd 1 órán át 10 ml 2:1 térf./térf. arányu kloroform/metanol eleggyel keverjük. A kivonatot szűr-jük, egyenlő térfogatu vízzel mossuk, és nitrogénáramban be-pároljuk. A maradékot minimális mennyiségű dietil-éterben old-juk, és az így kapott oldatot 20 x 20 cm méretű szilikagéses vékonyréteg-kromatogramm lemezekre cseppentjük. A kromatog-rammot hexán/éter/ecetsav 40:60:1 térf./térf./térf. arányu eleggyel fejlesztjük ki. Száritás után a vékonyréteg-lemeze-ket rövid időre jódgőzöket tartalmazó kamrába helyezzük, így a csikok láthatókká válnak. Megközelítőleg 1 cm szélességben elkülönítjük a 0,78 R_f -értékű csikot, dietil-éterrel extrahál-juk, és a kivonatot papírszűrőn megsűrjük. Az oldószer lepár-lása után sárga, olajszerű maradékot kapunk, amelyet szinképe utján vizsgálunk.

$^1\text{H-NMR}$ -szinkép (CDCl_3 , δ ppm, 300 MHz teljesítményű mérőmű-szerben): 64 tranziens Fourier-transzformációs elemzése olyan szinképet ad, amely szerint a termék az emésztési hid-rolizistermék (azaz 2-hidroxi-1,3-propándikarbonsav-dioleil-észter) és a változatlan olaj [azaz 2-(mirisztoil-oxi)-1,3-propándikarbonsav-dioleil-észter] 62:38 (mol/mol) arányu keveréke.

4. példa1-(Oleoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-dioleil-észterelőállítása1-Hidroxi-1,2-etándikarbonsav-dioleil-észter előállítása

6,53 g (0,04 mol) triklór-ecetsav katalizátort, 458,0 g (1,70 mol) technikai minőségű oleil-alkoholt (amely 70% egyszerű telítetlen C₁₈-alkoholt tartalmaz) és 134,2 g (1,0 mol) 2-hidroxi-borostyánkősavat 2000 ml térfogatu, kétnyaku, mágneses keverővel, desztilláló feltéttel, vákuumcsővel és szedővel ellátott lombikba mérünk. A lombikban 20 kPa csökkentett nyomást létesítünk, majd elkezdjük a hevítést és keverést. Amidón a pépszerű termék hőmérséklete a 110 °C hőmérsékletet eléri, exoterm reakció indul meg, víz desztillál le, és a dikarbonsav oldódása közben tiszta, halványsárga oldat keletkezik. 30 perc múlva a hőmérsékletet 140 °C-ra növeljük, és a melegítést 17 órán át folytatjuk. Ekkor a reakcióelegyet szobahőmérsékletre hagyjuk lehűlni, majd egy csövön át filmszerűen függőlegesen vezetjük 168 °C hőmérsékleten, 240 Pa nyomáson. Így 514,6 g (95%) halványsárga olajat kapunk.

¹H-NMR-szinkép (CDCl₃, δ ppm): 5,36 (m, 4H, HC=CH); 4,44 (kettős dublett, J=6,0 és 4,8, 1H, metin-proton); 4,20 (átfedő triplettek, 2H, O-CH₂-); 4,11 (t, 2H, O-CH₂-); 3,30-2,75 (nagyon széles rezolválatlan csucs, 1H, -OH); 2,81 (kettős dublett, J=16,3 és 4,9, 1H, fél -CH₂-CO₂-); 2,73 (kettős dublett, J=1,63 és 6,0, 1H, fél -CH₂-CO₂-); 2,02 (m, 8H, C=C-CH₂-); 1,65 (m, 4H, O-C-CH₂-); 1,32 (m, 44H, -CH₂-); és 0,89 (t, 6H, -CH₃); a hidroxil-proton nem ad megkülönböztethető, éles rezonanciát.

^{13}C -NMR-szinkép: 173,5 és 170,8 (C=O); 130,0 és 129,8 (C=C); 67,3, 66,1 és 63,1, 39,0 (10 csucs 21,8 és 33,0 között, -CH₂-); és 14,3 (-CH₃).

1-(Oleoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-dioleil-észter
előállítás

Mágneses keverővel felszerelt 1000 ml-es lombikban 1,29 g (0,01 mol) 4-(dimetil-amino)-piridin, 43,85 g (0,21 mol) N,N'-diciklohexil-karbodiimid és 300 ml diklór-metán keverékéhez 56,49 g (0,20 mol) olajsav és 127,00 g (0,20 mol) 1-hidroxi-1,2-etándikarbonsav-dioleil-észter 100 ml diklór-metánnal készült oldatát adjuk. Azonnal csapadék kiválás kezdődik. A reakcióelegyet 21 órán át szobahőmérsékleten keverjük. A melléktermékként képződött N,N'-diciklohexil-karbamidot leszivatjuk, a szűrletet bepároljuk, és a maradékot 400 ml dietil-éterben oldva 250 ml 5%-os sósavoldattal négyszer mossuk. A szerves oldatot magnézium-szulfáton száritjuk, szűrjük, és az étert lepároljuk. Így 163,0 g halványszínű nyersterméket kapunk, amelyet azonos térfogatu hexánban oldva 265 g szilikagélen kromatografálunk. A hexános eluátumot bepárolva szintelen olajat kapunk.

^1H -NMR-szinkép (CDCl₃, δ ppm): 5,47 (t, J=6,2 Hz, 1H, metin-proton); 5,35 (m, 6H, CH=CH); 4,15, 4,14 és 4,12 (átfedő triplettek, 4H, O-CH₂-); 2,87 (d, J=6,2 Hz, 2H, O-C-CH₂-C=O); 2,37 és 2,38 (átfedő triplettek, 2H, O=C-CH₂-); 2,02, 1,64 és 1,30 (multiplettek, (2H, -CH₂-); és 0,89 (t, 9H, -CH₃). Elemzés a C₅₈H₁₀₆O₆ összegképlet alapján (relatív molekulasúly 899,47):

számított: C 77,45; H 11,88; O 10,67%;
 talált: C 77,22; H 12,01; O (különbség alapján)
 10,77%.

5. példa

1-(Mirisztoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-dioleil-észter előállítása

Mágneses keverővel felszerelt 2000 ml-es lombikban elhelyezett 1,83 g (0,015 mol) 4-(dimetil-amino)-piridin, 68,1 g (0,33 mol) N,N'-diciklohexil-karbodiimid és 300 ml diklórmetán oldatához előbb 68,5 g (0,3 mol) mirisztinsav 400 ml diklórmetános szuszpenzióját, majd azonnal 190,5 g (0,3 mol) 2-hidroxi-borostyánkősav-dioleil-észter 600 ml diklórmetános oldatát adjuk, az elegyet jéggel hűtve 30 percig keverjük, majd szobahőmérsékletre hagyjuk melegedni, és további 90 órán át szobahőmérsékleten tartjuk. A szilárd csapadék formájában kivált diciklohexil-karbamidot leszivatjuk, és a szűrletet bepároljuk, a maradékot 800 ml dietil-éterben oldjuk, 2000 ml 5%-os sósavoldattal mossuk, és vizmentes magnézium-szulfáton szárítjuk. Szűrés és a szűrlet bepárlása után 206,5 g nyers-terméket kapunk, amelyet 100 g heptánban oldva 150 g szilikagélen "flash" kromatográfiának vetünk alá. Az 1000 ml térfogatu heptános eluátum bepárlása után 146,2 g halványsárga olajat kapunk, amelyet vákuumban, gőz-szagmentesítővel kezelve 114,5 g tisztított, olajszerű, cím szerinti terméket kapunk.

$^1\text{H-NMR}$ -szinkép (CDCl_3 , δ ppm): 5,47 (t, $J=6,4$ Hz, 1H, metin); 5,35 (m, 6H, HC=CH); 4,15, 4,14 és 4,12 (átfedő triplettek, 4H, O-CH₂-); 2,87 (d, $J=6,4$ Hz, 2H, O-C-CH₂-C=O); 2,371 és

2,365 (átfedő triplettek, 2H, O=C-CH₂); 2,00, 1,63 és 1,30 (multiplettek, 78H, -CH₂-); és 0,88 (t, 6H, -CH₃).

Elemzés a C₅₄H₁₀O₆ összegképlet alapján (relatív molekula-tömege 845,38):

számított: C 76,72; H 11,92; O 11,36%;

talált: C 76,58; H 11,90; O (különbség alapján)
11,52%.

A fenti cím szerinti vegyületet még az alábbi módon is előállíthatjuk:

266,8 g (1,08 mol) mirisztoil-kloridot és 635,1 g (1,00 mol) 2-hidroxi-borostyánkősav-dioleil-észtert összekeverünk egy 2000 ml térfogatú lombikban, amely mágneses keverővel, hőmérővel és olyan vákuum-szivócsővel van összekötve, amely 74 g (1,32 mol) szemcsés kálium-hidroxidot tartalmaz. A reakcióelegyet 75 °C hőmérsékleten 23 kPa vákuumban melegítjük, ekkor exoterm reakció kezdődik, és gáz fejlődik. A hőmérsékletet 45 perc alatt 115 °C-ra növeljük, és 7 órán át a reakcióelegyet e hőmérsékleten melegítjük. Szobahőmérsékletre való hűtés után a nyers terméket filmformában csövön vezetjük át 106 Pa vákuumban, s így narancsvörös, olajszerű termék alakjában 835,6 g (99%) cím szerinti vegyületet kapunk.

6. példa

1-(Mirisztoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-didodecil-észter előállítása

1-Hidroxi-1,2-etándikarbonsav-didodecil-észter előállítása

Mágneses keverővel, hőmérővel és vákuumdesztilláló fel-

tétellel ellátott 3000 ml-es lombikban összekeverünk 13,2 g (0,08 mol) triklór-ecetsavat, 302,2 g (2,25 mol) D,L-almasavat és 931,9 g (5,00 mol) dodecanolt, majd a készüléket 23 kPa vákuum alá helyezzük, és 135 °C hőmérsékleten 6,5 órán át melegítjük. A reakcióelegyből víz desztillál le. Az elegyet 60 °C-ra hűtjük, és filmformában függőleges csövön vezetjük át 168 °C hőmérsékleten 106 Pa nyomáson. Így 935,6 g (88%) cím szerinti terméket kapunk fehér, szilárd alakban, op.: 27-30 °C.

¹H-NMR szinkép (CDCl₃, δ ppm): 4,49 (kettős dublett, J=6,0 4,5 Hz, 1H, metin-proton); 4,20 (átfedő triplettek, 2H, O-CH₂-); 4,11 (triplett, 2H, O-CH₂-); 2,86 (kettős dublett, J=16,5, 4,5 Hz, 1H, O=C-C-CH₂-C=O fele); 2,78 (kettős dublett, J=16,5, 6,0 Hz, 1H, O=C-C-CH₂-C=O); 1,64 (m, 4H, O-C-CH₂); 1,29 (m, 36H, -CH₂-); és 0,89 (t, 6H, -CH₃). A hidroxil-proton kémiai eltolódása nem teljesen világos.

1-(Mirisztoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-didodecil- -észter előállítása

935,6 g (1,99 mol) 1-hidroxi-1,2-etándikarbonsav-didodecil-észtert 512,3 g (2,05 mol) mirisztoil-kloriddal keverünk 2000 ml-es lombikban, amely mágneses keverővel és hőmérővel és olyan vákuum-szivócsővel van felszerelve, amely 142,8 g (2,55 mol) kálium-hidroxidot tartalmazó csapdához vezet. A készüléket 23 kPa vákuum alá helyezzük, és a reakcióelegyet 75 °C-ra melegítjük. Ekkor gázfejlődés indul meg. A világos olajszerű terméket 45 perc alatt 115 °C-ra melegítjük, és 6 órán át ugyanezen a hőmérsékleten tartjuk. Ekkor 60 °C-ra

hűtjük, és a terméket filmformában függőleges csövön lefelé vezetjük 168 °C hőmérsékleten, 106 Pa nyomáson. Így halvány-sárga folyadék alakjában jutunk a cím szerinti vegyülethez.

¹H-NMR szinkép (CDCl₃, δ ppm): 5,47 (t, 1H, metin-proton); 4,15 és 4,11 (átfedő triplettek, 4H, O-CH₂-); 2,88 (d, 2H, O=C-C-CH₂-C=O); 2,38 (átfedő triplettek, 2H, O=C-CH₂-); 1,62 és 1,29 (multiplettek, 62H, -CH₂-); és 0,89 (triplett, 9H, -CH₃).

7. példa

Ebben a példában olyan, találmány szerinti zsirutánczó vegyület előállítását mutatjuk be, amely a karboxilát-észter csoportjában zsirszerű komponensek keverékét tartalmazza.

2-(Mirisztoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-oleil-hexadecil-
-észter előállítása

1-Hidroxi-1,2-etándikarbonsav-oleil-hexadecil-észter
előállítása

6,6 g triklór-ecetsavat (0,04 mol), 201,1 g (1,50 mol) 2-hidroxi-borostyánkősavat, 283,7 g (1,17 mol) 1-hexadekanolt és 538,4 g (2,01 mol) technikai minőségű oleil-alkoholt mágneses keverővel, hőmérővel, vákuumdesztilláló feltétellel és szedővel felszerelt 2000 ml-es lombikban összekeverünk, majd az elegyet 23 kPa vákuum alá helyezzük, és 142 °C-on 23 órán át melegítjük. Ezalatt a reakcióelegyből víz desztillál le, és tiszta oldat képződik. A nyers terméket filmformában függőleges csövön vezetjük át 168 °C hőmérsékleten, 80 Pa nyomáson. Ilyen körülmények között az el nem reagált alkoholkom-

ponens csaknem teljesen eltávolítható. A kapott terméket szobahőmérsékletre hűtve szilárd anyagot kapunk.

$^1\text{H-NMR}$ szinkép (CDCl_3 , δ ppm): A várt kémiai eltolódásokat mutatja azokkal az intenzitásokkal, amelyek a várt vegyes észter összetétellel összeegyeztethetők; a kapott termék molekulánként átlagosan 1,04 telítetlen zsiralkoholcsoportot, és szennyezésként 2,7% reagálatlan alkoholkomponenst tartalmaz.

2-(Mirisztoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-oleil-hexadecil-
-észter előállítása

Hőmérővel és vákuumcsappal ellátott 1000 ml-es lombikban 108,6 g (0,44 mol) mirisztoil-klorid és 243,9 g (0,40 mol) 1-hidroxi-1,2-etándikarbonsav-oleil-hexadecil-észter elegyét 23 kPa nyomáson 115°C hőmérsékleten 22 órán át melegítjük, majd szobahőmérsékletre hűtjük. Így 354,8 g (kvantitatív) hozammal olajat kapunk, amely szobahőmérsékleten állva megszilárdul.

$^1\text{H-NMR}$ szinkép (CDCl_3 , δ ppm): 5,48 (t, 1H, metin-proton); 5,35 (m, 2H, CH=CH); 4,16 és 4,11 (átfedő triplettek, 4H, O-CH₂-); 2,89 (d, 2H, O₂C-C-CH₂-CO₂); 2,38 (átfedő triplettek, 2H, mirisztoil CH₂-C=O); 2,02 (m, 4H, -CH₂-C=C); 1,63 (m, 6H, alkoholos -CH₂-C-O és mirisztoil -CH₂-C-C=O); 1,31 (m, 68H, -CH₂-); és 0,89 (t, 9H, -CH₃). Ez a szinkép összhangban van egy olyan vegyület szerkezetével, amely az oleil- és a hexadecil-alkohollal képzett észtercsoportot 1:1 arányban tartalmazza.

8. példa2,2-bisz(Oleoil-oxi-metil)-propionsav-oleil-észter elő-
állítás2,2-bisz(Oleoil-oxi-metil)-propionsav előállítás

13,4 g (0,099 mol) 2,2-bisz(hidroxi-metil)-propionát és 36 ml piridin oldatához keverés közben 96,3 g (0,32 mol) olajsavkloridot adunk. Azonnal piridinium-klorid csapadék képződik. A reakcióelegyet szobahőmérsékleten 18 órán át keverjük, utána szilikagélrétegen szűrjük, a szűrletet előbb 5%-os sósavoldattal, utána vízzel mossuk, és vízmentes nátrium-szulfáton szárítjuk. 72,3 g így kapott, közbenső terméket 18 g szilikagéllel, 200 ml 5%-os sósavoldattal és 100 ml dietil-éterrel elegyítünk, és az így kapott szuszpenziót 24 órán át keverjük. Ekkor a szerves fázist elkülönítjük, és filmalakban függőleges csövön vezetjük át 168 °C hőmérsékleten, 106 Pa csökkentett nyomáson az olajsav feleslegének eltávolítása céljából. Maradékként a cím szerinti vegyületet kapjuk.

2,2-bisz(Oleoil-oxi-metil)-propionil-klorid előállítás

39,7 g (0,06 mol), 2,2-bisz(oleoil-oxi-metil)-propionsav és 20 ml (0,27 mol) tionil-klorid elegyét szobahőmérsékleten 18 órán át keverjük, utána a tionil-klorid feleslegét forgóbepárló készülékben eltávolítjuk, s így a cím szerinti, olajszerű savkloridhoz jutunk.

¹H-NMR szinkép (CDCl₃, δ ppm): 5,35 (m, 4H, HC=CH); 4,29 (s, 4H, O-CH₂-); 2,32 (t, 4H, -CH₂-C=O); 2,01 (m, 8H, -CH₂-C=C); 1,61 (m, 4H, -CH₂-C-C=O); 1,39 (s, 3H, propán-CH₃); 1,30 (m, 40H, -CH₂-); és 0,89 (t, 3H, -CH₃).

2,2-bisz(Oleoil-oxi-metil)-propionsav-oleil-észter
előállítása

16,1 g (0,060 mol) oleil-alkohol és 7 ml piridin oldathoz keverés közben 37,8 g (0,055 mol) 2,2-bisz(oleoil-oxi-metil)-propionil-kloridot csepegtetünk, majd a reakcióelegyet 24 órán át keverjük, utána előbb 5%-os sósavoldattal, majd vízzel mossuk, és szilikagélen szűrjük. Az így kapott nyers terméket függőleges csövön filmformában vezetjük át 168 °C hőmérsékleten, 106 Pa csökkentett nyomáson, s így olajszerű alakban kapjuk a cím szerinti végterméket.

$^1\text{H-NMR}$ szinkép (CDCl_3 , δ ppm): 5,35 (m, 6H, HC=CH); 4,22 (s, 4H, gerincrész $\text{CH}_2\text{-O}$); 4,11 (t, 2H, oleil-alkoholos O-CH_2), 2,29 (triplett, 4H, $-\text{CH}_2\text{-C=O}$), 2,01 (m, 12H, C=C-CH_2); 1,61 (m, 6H, $-\text{CH}_2-$); 1,31 (m, 62H, $-\text{CH}_2-$); 1,23 (s, 3H, propán $-\text{CH}_3$); és 0,89 (t, 9H, $-\text{CH}_3$).

9. példa

2-(Oleoil-oxi)-glutársav-dioleil-észter / más néven
1-(oleoil-oxi)-1,3-propándikarbonsav-dioleil-észter 7
előállítása

2-Keto-glutársav-dioleil-észter előállítása

Desztilláló feltéttel, hőmérővel, és teflonos bevonatu keverővel ellátott 500 ml-es lombikban 2,1 g (0,01 mol) triklór-ecetsav, 25,0 g (0,17 mol) 2-keto-glutársav és 95,9 g (0,36 mol) oleil-alkohol elegyét körülbelül 20 kPa csökkentett nyomás alá helyezzük, és 130-140 °C hőmérsékleten 20 órán át melegítjük. Így barna, olajszerű terméket kapunk.

$^1\text{H-NMR}$ szinkép (CDCl_3 , δ ppm): 5,35 (m, 4H, HC=CH); 4,25 (t, 2H, $-\text{CH}_2-\text{O}$); 4,05 (t, 2H, $-\text{CH}_2-\text{O}$); 3,15 (t, 2H, $-\text{CH}_2-\text{C}=\text{O}$); 2,65 (t, 2H, $-\text{CH}_2-\text{C}=\text{O}$); 2,02, 1,73, 1,62, 1,30 (multiplettek, 56H, C- CH_2 -C); és 0,88 (t, 6H, $-\text{CH}_3$).

2-Hidroxi-glutársav-dioleil-észter előállítása

14,4 g (0,38 mol) nátrium- $\text{B}(\text{OH})_4^-$ tetrahidrido-borát₇ és 300 ml jég-viz-keverék elegyéhez 300 ml dietil-éterben oldott 164,1 g (0,25 mol) 2-keto-glutársav-dioleil-észtert adunk, és a reakciókeveréket 22 órán át szobahőmérsékleten keverjük mágneses keverővel és visszafolyató hűtővel ellátott 2000 ml-es lombikban (exoterm reakció megy végbe). Az éteres fázist elkülönítjük, rendre háromszor mossuk 200 ml 5%-os sósavoldattal, utána háromszor mossuk 200 ml desztillált vízzel, majd vizmentes nátrium-szulfáton szárítjuk. Szűrés után a szerves oldatot forgóbepárló készülékben bepároljuk, s így világos olaj alakjában 154,6 g cím szerinti vegyületet kapunk. Ezt tovább tisztítjuk úgy, hogy filmformában függőleges csövön vezetjük át 168 °C hőmérsékleten, 133 Pa csökkentett nyomáson. Így a cím szerinti vegyülethez jutunk.

$^1\text{H-NMR}$ -szinkép (CDCl_3 , δ ppm): 5,35 (m, 4H, HC=CH); 4,19 (átfedő t és m, 3H, $-\text{CH}_2-\text{O}$ és metin-proton); 4,08 (t, 2H, $-\text{CH}_2-\text{O}$); 2,92 (széles d, 1H, OH); 2,48 (látszólagos oktett, O=C-C- CH_2 -C-C=O); 2,02 (m, 8H, $-\text{CH}_2-\text{C}=\text{C}$); 1,97 (m, 1H, O=C-C- CH_2 -C-C=O fele); 1,63 és 1,31 (multiplettek, 48H, $-\text{CH}_2-$); és 0,89 (t, 6H, $-\text{CH}_3$).

2-(Oleoil-oxi)-glutársav-dioleil-észter előállítása

20,0 g (0,03 mol) 2-hidroxi-glutársav-dioleil-észtert, 8,8 g (0,03 mol) olajsavat és 0,37 g (0,003 mol) 4-(dimetil-amino)-piridint minimális mennyiségű diklór-metánban oldunk, és az így kapott oldatot mágneses keverővel felszerelt 500 ml-es lombikban 6,4 g (0,03 mol) N,N'-diciklohexil-karbodiimid diklór-metános oldatához adjuk. Összesen 110 ml oldószert használunk, és a reakcióelegyet másnapig szobahőmérsékleten keverjük, majd a diciklohexil-karbamidot szivatással szűrjük, és a szűrletet bepároljuk. A maradékot 250 ml dietil-éterben oldjuk, háromszor mossuk 200 ml 5%-os sósavoldattal, majd háromszor desztillált vízzel. vízmentes nátrium-szulfáton végzett szűrés után az éteres oldatot szűrjük, és bepároljuk. Így világos, narancsszinű olaj alakjában 24,6 g (87%) cím szerinti vegyületet kapunk. Ezt a terméket szilikagélen "flash" kromatográfiának vetjük alá, eluálószerként hexán és etil-acetát 18:1 arányú elegyét alkalmazzuk. Az eluátum bepárlása után a cím szerinti vegyületet világos, sárgaszínű olaj alakjában kapjuk.

$^1\text{H-NMR}$ szinkép (CDCl_3 , δ ppm): 5,35 (m, 6H, HC=CH); 5,03 (kettős dublett, 1H, metin-proton); 4,13 és 4,08 (átfedő triplettek, 4H, $-\text{CH}_2-\text{O}$); 2,48-2,12 (átfedő multiplettek, 6H, $\text{O}=\text{C}-\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{C}=\text{O}$ és $-\text{CH}_2-\text{C}=\text{O}$); 2,02 (m, 12H, $-\text{CH}_2-\text{C}=\text{C}$); 1,63 és 1,31 (multiplettek, 70H, $-\text{CH}_2-$); és 0,89 (t, 9H, $-\text{CH}_3$).

10. példa2-(Mirisztoil-oxi)-glutársav-dioleil-észter előállítása

A 9. példában leírt eljárást követjük, azonban olajsav helyett mirisztinsavat alkalmazunk.

$^1\text{H-NMR}$ szinkép (CDCl_3 , δ ppm): 5,35 (m, 4H, HC=CH); 5,03 (ketős dublett, 1H, metin-proton); 4,13 és 4,08 (átfedő triplettek, 4H, $-\text{CH}_2-\text{O}$); 2,48-2,12 (átfedő multiplettek, 6H, $\text{O}=\text{C}-\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{C}=\text{O}$ és $-\text{CH}_2-\text{C}=\text{O}$); 2,02 (m, 8H, $-\text{CH}_2-\text{C}=\text{C}$); 1,63 és 1,31 (multiplettek, 70H, $-\text{CH}_2-$); és 0,89 (t, 9H, $-\text{CH}_3$).

11. példa1,3-bisz(Oleoil-oxi)-2,2-propándikarbonsav-dioleil-észter előállítása

Malonsav-dioleil-észter előállítása

Mágneses keverővel, hőmérővel, vákuumdesztilláló feltétellel és csapdával ellátott 1000 ml-es lombikban elhelyezett 62,4 g (0,60 mol) malonsav, 329,4 g (1,28 mol) 65%-os oleil-alkohol és 7,5 g (0,045 mol) triklór-ecetsav elegyét körülbelül 20 kPa vákuum alá helyezzük, és Variac szabályozható hőmérsékletű hevítőköpennyel 7 órán át 180°C hőmérsékleten melegítjük. Körülbelül 135°C hőmérsékleten a reagáló komponensek elegyednek, és vízvesztéssel exoterm reakció megy végbe. Szobahőmérsékletre hűtés után kvantitatív hozammal barna, olajszerű terméket kapunk. E termékből az alkohol feleslegét úgy távolítjuk el, hogy a nyers terméket filmformában függőleges csövön lefelé vezetjük át 168°C hőmérsékleten, 106 kPa vákuumban. Így a cím szerinti terméket 85,7% hozammal kapjuk. E terméket tovább tisztítjuk "flash" kroma-

tográfiaival szilikagélen, eluálószerként hexánt használunk. Így halványsárga, olajszerű termék alakjában kapjuk a cím szerinti terméket.

$^1\text{H-NMR}$ szinkép (CDCl_3 , δ ppm): 5,37 (m, 3,25H, HC=CH); 4,15 (t, 4H, $-\text{CH}_2-\text{O}$); 3,38 (s, 2H, $\text{O}_2\text{C}-\text{CH}_2-\text{CO}_2$); 2,03 (m, 6,35H, $-\text{CH}_2-\text{C}=\text{C}$); 1,66 (látszólagos kvintett, 4H, $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}$); 1,32 (átfedő multiplettek, 44H, C- CH_2 -C); és 0,88 (t, 6H, $-\text{CH}_3$).

1,3-Dihidroxi-propán-2,2-dikarbonsav-dioleil-észter előállítása

Mágneses keverővel és adagolótölcsérrel felszerelt 1000 ml-es lombikban 41,8 ml (0,515 mol) 37%-os vizes formalinoldatot 2,088 g (0,08 mol) kálium-hidrogén-karbonáttal összekeverünk, majd keverés közben 15 perc alatt 150,0 g (0,248 mol) malonsav-dioleil-észtert csepegtetünk hozzá. A reakcióelegyet szobahőmérsékleten további 20 órán át keverjük, majd 100 ml dietil-éterrel higitjuk, és az emulzió megtörése végett háromszor 150 ml vizes konyhasóoldattal mossuk. Az étees oldatot vizmentes magnézium-szulfáton szárítjuk, szűrjük, bepároljuk. Így 63,2% cím szerinti vegyületet kapunk.

$^1\text{H-NMR}$ szinkép (CDCl_3 , δ ppm): 5,37 (m, 3,42H, HC=CH); 4,80 (s, 0,5H, szennyezés csucsa); 4,19 és 4,12 (átfedő t és s, 8H, $-\text{CH}_2-\text{O}$); 2,90 (széles s, 2,0H, $-\text{OH}$); 2,02 (m, 6,68H, $-\text{CH}_2-\text{C}=\text{C}$); 2,90 (széles s, 2,0H $-\text{OH}$); 2,02 (m, 6,68H, $-\text{CH}_2-\text{C}=\text{C}$); 1,65 (m, 4H, $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}$); 1,33 (átfedő multiplettek, 44H, C- CH_2 -C); és 0,89 (t, 6H, $-\text{CH}_3$).

1,3-bisz(Oleoil-oxi)-2,2-propándikarbonsav-dioleil-
-észter előállítása

Mágneses keverővel, desztilláló feltéttel és szedővel ellátott 500 ml-es lombikban 48,88 g (0,162 mol) technikai minőségű olajsavklorid és 50,00 g (0,075 mol) 1,3-dihidroxil-2,2-propándikarbonsav-dioleil-észter elegyét körülbelül 20 kPa vákuum alá helyezünk, majd Variac típusú szabályozható hőmérsékletű hevitőköpennyel 110 °C hőmérsékleten 24 órán át melegítjük. Lehűlés után a nyers terméket filmformában függőleges csövön vezetjük lefelé 168 °C hőmérsékleten 106 Pa vákuumban, a reagálatlan savklorid eltávolítása végett. Így 85,62 g (92,1%) cím szerinti tetraésztert kapunk. Tisztítás céljából e terméket "flash" kromatográfiának vetjük alá szilikagélen, eluálsózerként hexánt alkalmazunk. A hexános oldat bepárlása után a cím szerinti vegyületet halványsárga, olajszerű termék alakjában kapjuk.

$^1\text{H-NMR}$ szinkép (CDCl_3 , δ ppm): 5,37 (m, 8H, HC=CH); 4,58 (s, 4H, $-\text{CH}_2-\text{O}$); 4,16 (t, 4H, $\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}$); 2,29 (t, 4H, $\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{C}=\text{O}$); 2,02 (m, 12H, $\text{CH}_2-\text{C}=\text{O}$); 1,63 (m, 4H, $\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}$); 1,32 (átfedő multiplettek, 44H, C- CH_2-C) és 0,89 (t, 12H, $-\text{CH}_3$); valamint csucskok, amelyek oleil-oleát szennyezést jeleznek 4,08-nál (t), valamint 2,29-nél (t); és ismeretlen szennyezést 2,46-nál (t).

12. példa

1-(Palmitoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-didecil-észter
előállítása

1-Hidroxi-1,2-etándikarbonsav-didecil-észter előállítása

Mágneses keverővel, hőmérővel, vákuumdesztilláló feltétel és szedővel ellátott lombikban 7,9 g (0,049 mol) triklór-ecetsav, 506,5 g (3,2 mol) decil-alkohol és 201,1 g (1,5 mol) 2-hidroxi-borostyánkősav elegyét 23 kPa vákuum alá helyezzük, és a reakcióelegyet 110 °C-ra melegítjük. Ekkor exoterm reakció kezdődik, viz desztillál le, és a reakcióelegy homogénné válik. Az elegy hőmérsékletét 140 °C-ra növeljük, és 70 órán át ezen a hőmérsékleten tartjuk. Szobahőmérsékletre hűtés után a nyers terméket függőleges csövön filmformában lefelé vezetve 98 °C hőmérsékleten, 123 Pa vákuumban eltávolítjuk a reagálatlan alkoholt, s így halvány-narancsszinű olaj alakjában 590,3 g (95%) cím szerinti terméket kapunk.

¹H-NMR szinkép (CDCl₃, δ ppm): 4,49 (kettős dublett, J=6,0 és 4,7 Hz, 1H, metin-proton); 4,20, 4,19 és 4,10 (átfedő tripletek, 4H, -CH₂-O); 3,25 (nagyon széles csucs, 1H, -OH); 2,85 (kettős dublett, J=16,4 és 4,7 Hz, 1H, O=C-C-CH₂-C=O fele); 2,79 (kettős dublett, J=16,4 és 6,0 Hz, 1H, O=C-C-CH₂-C=O fele); 1,63 és 1,30 (m, 32H, -CH₂-); és 0,89 (t, 6H, -CH₃).

1-(Palmitoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-didecil-észter előállítása

Hőmérővel, vákuumcsappal és mágneses keverővel ellátott 1000 ml-es lombikban 289,96 g (0,70 mol) 1-hidroxi-1,2-etándikarbonsav-didecil-észter és 202,04 g (0,735 mol) palmitoil-klorid keverékét 23 kPa vákuum alá helyezzük, és 85 °C-ra melegítjük. Ekkor exoterm reakció indul meg, és a hőmérséklet 113 °C-ra emelkedik gázfejlődés (HCl) közben. A reakcióelegyet

7 órán át 115 °C-on tartjuk, majd szobahőmérsékletre hűtve kapjuk a cím szerinti terméket.

¹H-NMR szinkép (CDCl₃, δ ppm): 5,48 (t, 1H, metin-proton); 4,15 (átfedő triplettek, 2H, -CH₂-O); 4,11 (t, 2H, -CH₂-O); 2,88 (d, 2H, O=C-C-CH₂-C=O); 2,38 (átfedő triplettek, 2H, O=C-CH₂-); 1,62 és 1,29 (multiplettek, 58H, -CH₂-); és 0,89 (t, 9H, -CH₃).

13. példa

E példában bemutatjuk a találmány szerinti új zsirutánzó vegyületek kalóriahasznosulásának a vizsgálatát gondosan kontrollált állattetési vizsgálatban.

A szintetikus zsirutánzó vegyületek kalóriahasznosulásának in vivo mérése céljából kísérletileg kell megállapítanunk a táplálékkal bevitt összes kalóriamennyiség és az állat testtömegszaporulatának a viszonyát. Ezt úgy végezzük, hogy megállapítjuk különböző koncentrációban valamilyen összehasonlító (referens) anyagot - például kukoricaolajat - tartalmazó, táplálkozási szempontból egyensúlyozott étrend fogyasztása során fellépő testtömegszaporulatot, aminek során a referens anyag kalóriahasznosulása ismert. A táplálékkal bevitt összes kalóriamennyiség és a testtömegszaporulat korrelációja kitűnő ($r = 0,99$).

Ismeretlen anyag kalóriahasznosulását úgy értékeljük ki, hogy az ismeretlen anyag mért tömegét visszük be a referens anyag helyett, és megfigyeljük a testtömeg szaporulatát. A testtömegszaporulatot összefüggésbe hozzuk az összes kalóriamennyiséggel, aminek során a referensre előzőleg megállapított

korrelációt alkalmazzuk. A bevitt kalóriák számított mennyiségét az ismeretlen anyag tömegével osztva megkapjuk az ismeretlen anyag 1 grammjára vonatkoztatott látszólagos kalóriaértéket.

E vizsgálatban him Sprague-Dawley patkányokat alkalmaztunk. A vizsgálat időtartama 14 nap volt. Az étrendi követelményeket úgy állapítottuk meg, hogy megfigyeltük az állatok élelmiszerfogyasztását korlátozás nélküli esetben. Az összes étrendeket úgy állítottuk össze, hogy 50%-ban tartalmazták a megállapított étrendi követelményeket, és ezen kívül a referens vagy ismeretlen anyagot kiegészítőként. Ezeknek a vizsgálatoknak a során a vizsgálati állatok jó egészségi állapotára súlyt helyeztünk.

A fenti vizsgálat során a 2. példa szerint előállított 2-(mirisztoil-oxi)-1,3-propándikarbonsav-dioleil-észter kalória-hasznosulása 1,6 kcal/g értéknek adódott (ez egy teljesen emészthető zsír kalória hasznosulásának körülbelül 18%-a).

14. példa

Vizsgáltuk az 5. példa szerint előállított zsirutánzó vegyület kalória-hasznosulási értékét a fenti 13. példában leírt vizsgálati módszerrel, és azt találtuk, hogy az 1-(mirisztoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-dioleil-észter kalória-hasznosulási értéke az állatetetés kísérletben 0,4 kcal/g (ez megközelítőleg 4%-a egy teljesen emészthető zsír kalória-hasznosulási értékének).

15. példa

Vizsgáltuk a 6. példa szerint előállított zsirutánzó

vegyület kalóriaahasznosulási értékét a 13. példában leirt módszerrel, és azt találtuk, hogy az (1-mirisztoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-didodecil-észter kalóriaahasznosulási értéke az állatetetési kísérletben 2,7 kcal/g (ez megközelítőleg 30%-a egy teljesen emészthető zsír kalóriaahasznosulási értékének).

16. példa

Vizsgáltuk a 12. példa szerint előállított zsirutánzó vegyület kalóriaahasznosulási értékét a 13. példában leirt módszerrel, és azt találtuk, hogy az (1-palmitoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-didecil-észter kalóriaahasznosulási értéke az állatetetési kísérletben 3,7 kcal/g (ez megközelítőleg 415-a egy teljesen emészthető zsír kalóriaahasznosulási értékének).

17. példa

Lényegében az 1. és 2. példákban részletesen leirt eljárást követve 1,3-acetondikarbonsav-metil-észtert 2 mólegyenérték - egyenlő mennyiségben vett - oleil-alkohollal és palmitil-alkohollal reagáltatunk. Az így kapott terméket éteres-vizes emulzióban nátrium- γ -tetrahidrido-borát γ -tal redukáljuk, és a kapott termék elkülönítése után 1 mólegyenérték mennyiségben vett 2:1:1 molarányu mirisztoil-, sztearoil-, és butiril-klorid keverékkel reagáltatjuk. Így olyan zsirutánzó termékhez jutunk, amelynek sajátságai a vajból származó természetes zsír tulajdonságaihoz hasonlítanak.

18. példaKrémtöltelék előállítása

Körülbelül 18 kg 17. példa szerint előállított zsirutánzó vegyületet (op.: 32-35 °C) 82 kg lefölözött tejjel közönséges tejhomogenizálóban homogenizálva krémtöltelék-készítményt kapunk.

19. példaFagylalt előállítása

68 rész 18. példában előállított krémtölteléket 15 rész kondenzált lefölözött tejjel, 15 rész cukorral, 0,5 rész zselatinnal, 1,0 rész arómaanyaggal és 0,25 rész színezékkel összekeverve fagylaltkeveréket kapunk, amelyet a szokásos módon feldolgozva módosított fagylalttermékhez jutunk.

20. példaTöltött tejkészítmény előállítása

Körülbelül 100 rész 18. példa szerint előállított krémtöltelék-készítményt körülbelül 620 rész lefölözött tejjel keverve töltött tejkészítményt kapunk.

21. példaSajttermékek előállítása

A 20. példa szerint előállított töltött tejkészítményt ugyanugy kezeljük, mint a természetes tejet a közönséges sajt-készítő eljárás során (például a cheddar- vagy svájci sajt készítése során). A töltött tejkészítmény zsirutánzó komponenséhez ezen eljárásban való felhasználása előtt - a sajtter-

mékek zamatának erősítése céljából - előnyösen 10% gyapotolajat adunk.

22. példa

Vajkrémes bevonatot állítunk elő az alábbi komponensekből:

<u>Komponensek</u>	<u>g</u>
Cukor	227,0
A 2. példa szerinti zsirutánzó vegyület	70,8
Viz	28,4
Zsirszegény tejpor	14,0
Emulgeálószer (csak dialkil-gliceril-éter keverékeknél)	1,4
Só	1,0
Vanília	1,0

A komponenseket közepes fordulatszámú keverőberendezésben krémmé alakítjuk.

23. példa

Vaniliás ostyák előállítása

25 rész (képlékeny) zsirutánzó vegyületet 100 rész liszttel, 72 rész granulált cukorral, 5 rész nagy fruktóztartalmu kukoricasziruppal, 1 rész zsirszegény tejporral, 1 rész sóval, 0,1 rész ammónium-hidrogén-karbonáttal, 1 rész szárított tojás-sárgájával, 0,1 rész nátrium-hidrogén-karbonáttal és 55 rész vízzel keverünk. Az így kapott tésztát hengerek között vezetjük át, 0,6 cm vastagságu darabokra vágjuk, majd a szokásos

eljárással megsütve jutunk a vaniliás ostyához.

24. példa

Kókuszdíóolajat utánzó termék előállítása

10 rész 1. példa szerinti' eljárással előállított 2-hidroxil-1,3-propándikarbonsav-didodecil-észtert 1,4 rész palmitoil-kloriddal, 1,4 rész olajsavkloriddal, 1 rész kapriloil-kloriddal és 1 rész dekanoil-kloriddal csökkentett nyomáson, 115 °C hőmérsékleten 22 órán át reagáltatva olyan zsirutánzó terméket kapunk, amelynek sajátságai megegyeznek a természetes kókuszdíóolaj tulajdonságaival.

25. példa

Meghintett sóskekszkészítmény előállítása

100 rész lisztből, 5 rész cukorból, 1,5 rész malátából, 7,5 rész 24. példa szerint előállított zsirutánzó vegyületből, 1 rész sóból, 0,9 rész nátrium-hidrogén-karbonátból, 2,5 rész sovány tejporból, 2,5 rész nagy fruktóztartalmu kukoricaszirupból, 0,75 rész mono-kalcium-foszfátból és 28 rész vízből készített tésztát lemezzé alakítunk, majd sütéssel sóskekszkészítménnyé alakítjuk.

A fenti leírás célja a tapasztalt szakember kitanítása a jelen találmány gyakorlati kivitelezésére. A példákban kifejtett szintetikus eljárások és az új vegyületek szerkezetének ismeretében az átlagos tapasztalattal rendelkező szakember a találmány szerint igényelt vegyületeket szintetizálhatja. A leírásnak nem célja mindazoknak a nyilvánvaló módosításoknak és változatoknak a részletezése, amelyek a jártas

szakember számára a leírás olvasása során amúgy is világosak. Valamennyi ilyen, nyilvánvaló módosítás és változat a találmány oltalmi körébe tartozik, amelyeket az alábbi igénypontokban definiálunk.

Szabadalmi igénypontok

1. Eljárás az (I) általános képletű zsirutánzó vegyületek előállítására, ahol az (I) képletben

R jelentése szerves csoport;

R' jelentése 1-30 szénatomos alifás, észter- vagy étercsoport, és az R' csoportok azonosak vagy különbözők lehetnek;

valamint

m és n egész számok, amelyek értéke legalább 1, és m és n

összege legalább 2,

azzal jellemezve, hogy egy (III) általános képletű reagenst - amelyben R, R' és m jelentése a fentiekben meghatározott -



egy R'-C-X általános képletű vegyülettel, amelyben R' jelentése a fentiekben meghatározott, és X halogénatomot jelent, vagy

egy R'-CO₂H általános képletű vegyülettel, amelyben R' jelentése a fentiekben meghatározott -

reagáltatunk.

2. Az 1. igénypont szerinti eljárás, azzal jellemezve, hogy egy (IV) általános képletű prekursor-vegyületet - ahol R, R', m és n jelentése ugyanaz, mint az (I) általános képletben - valamilyen vegyes alkálifém-hidriddel vagy alkálifém-hidrogén-karbonáttal a (III) általános képletű reagens kialakítására alkalmas körülmények között reagáltatunk.

3. A 2. igénypont szerinti eljárás, azzal jellemezve, hogy egy (V) általános képletű kiinduló vegyüle-

tet - amelyben R^0 jelentése hidrogénatom vagy 1-3 szénatomos alifás csoport - egy $R'-OH$ általános képletű vegyülettel - ahol R' jelentése ugyanaz, mint az (I) általános képletben - a (IV) általános képletű prekursor-vegyület kialakítására alkalmas körülmények között reagáltatunk.

4. A 2. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy egy (VI) általános képletű kiinduló vegyületet, amelyben R , m és n jelentése ugyanaz, mint az (I) képletben, és R^0 jelentése 1-3 szénatomos alifás csoport - egy $R'-OH$ általános képletű vegyülettel - amelyben R' jelentése ugyanaz, mint az (I) általános képletben - a (III) általános képletű reagens kialakítására alkalmas körülmények között reagáltatunk.

5. A 3. igénypont szerinti eljárás 2-(2,2-dimetil-propionil-oxi)-1,3-propándikarbonsav-didecil-észter előállítására, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy (III) általános képletű reagensként 2-hidroxi-1,3-propándikarbonsav-didecil-észtert, (IV) általános képletű prekursoroként 1,3-acetondikarbonsav-didecil-észtert, (V) általános képletű kiinduló anyagként 1,3-acetondikarbonsav-dimetil-észtert, $R'-OH$ általános képletű vegyületként decil-alkoholt, vegyes alkálifém-hidridként nátrium--tetrahidrido-borát₇-ot és

$$R'-\overset{O}{\parallel}C-X$$
 általános képletű savkloridként trimetil-acetil-kloridot alkalmazunk.

6. A 3. igénypont szerinti eljárás 2-hidroxi-1,3-propándikarbonsav-dioleil-észter reagens előállítására, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy (IV) általános képletű prekursoroként 1,3-acetondikarbonsav-dioleil-észtert, (V) általános

képletű kiinduló vegyületként 1,3-acetondikarbonsav-dimetil-
-észtert, R'-OH általános képletű vegyületként oleil-alkoholt,
vegyes alkálifém-hidridként nátrium-7-tetrahidrido-borát₇-ot
és R'- $\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{X}$ általános képletű savkloridként mirisztoil-kloridot
alkalmazunk.

7. A 4. igénypont szerinti eljárás 1-(oleoil-oxi)-1,2-
-etándikarbonsav-dioleil-észter előállítására, a z z a l
j e l l e m e z v e , hogy (III) általános képletű reagensként
1-hidroxi-1,2-etándikarbonsav-észtert, (VI) általános képletű
kiinduló anyagként 2-hidroxi-borostyánkősavat, R'-OH általános
képletű vegyületként oleil-alkoholt és R'-CO₂H általános kép-
letű savként olajsavat alkalmazunk.

8. Az 1. igénypont szerinti eljárás 1-(mirisztoil-oxi)-
-1,2-etándikarbonsav-dioleil-észter előállítására, a z z a l
j e l l e m e z v e , hogy az előállítás során mirisztinsavat vagy
mirisztoil-kloridot alkalmazunk.

9. A 4. igénypont szerinti eljárás 1-(mirisztoil-oxi)-
-1,2-etándikarbonsav-didodecil-észter előállítására, a z z a l
j e l l e m e z v e , hogy (III) általános képletű reagensként 1-
-hidroxi-1,2-etándikarbonsav-didodecil-észtert, kiinduló ve-
gyületként (DL)-almasavat, R'-OH általános képletű vegyületként
dodekanolt és

R'- $\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{X}$ általános képletű vegyületként mirisztoil-kloridot al-
kalmazunk.

10. A 4. igénypont szerinti eljárás 1-(mirisztoil-oxi)-
-1,2-etándikarbonsav-decil-hexadecil-észter előállítására,
a z z a l j e l l e m e z v e , hogy (III) általános képletű rea-

gensként 1-hidroxi-1,2-etándikarbonsav-oleil-hexadecil-észtert, kiinduló anyagként almasavat, $R'-OH$ általános képletű vegyületként oleil-alkoholt, és $R'-C-X$ általános képletű vegyület-

$$\begin{array}{c} \parallel \\ O \end{array}$$

ként mirisztoil-kloridot alkalmazunk.

11. A 3. igénypont szerinti eljárás 2-(oleoil-oxi)-glutársav-dioleil-észter előállítására, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy (III) általános képletű reagensként 2-hidroxi-glutársav-dioleil-észtert, (IV) általános képletű prekuzorként 2-keto-glutársav-dioleil-észtert, (V) általános képletű kiinduló anyagként 2-keto-glutársavat, $R'-OH$ általános képletű vegyületként oleil-alkoholt, vegyes alkálifém-hidridként nátrium- B^- tetrahidrido-borát $_7$ -ot és $R'-CO_2H$ általános képletű savként olajsavat alkalmazunk.

12. A 3. igénypont szerinti eljárás 2-(mirisztoil-oxi)-glutársav-dioleil-észter előállítására, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy (III) általános képletű reagensként 2-hidroxi-glutársav-dioleil-észtert, (IV) általános képletű prekuzorként 2-keto-glutársav-dioleil-észtert, (V) általános képletű kiinduló anyagként 2-keto-glutársavat, $R'-OH$ általános képletű vegyületként oleil-alkoholt, vegyes alkálifém-hidridként nátrium- B^- tetrahidrido-borát $_7$ -ot és $R'-CO_2H$ általános képletű savként olajsavat alkalmazunk.

13. A 11. igénypont szerinti eljárás 1,3-di(oleoil-oxi)-2,2-propándikarbonsav-dioleil-észter előállítására, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy (III) általános képletű reagensként 1,3-dihidroxi-2,2-propándikarbonsav-dioleil-észtert,

$\text{R}'-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{X}$ általános képletű savkloridként olajsavkloridot, első prekurzorként malonsav-dioleil-észtert és második prekurzorként formaldehidet alkalmazunk.

14. A 4. igénypont szerinti eljárás 1-(palmitoil-oxi)-1,2-etándikarbonsav-didecil-észter előállítására, azzal jellemezve, hogy (III) általános képletű reagensként 1-hidroxi-1,2-etándikarbonsav-didecil-észtert, (VI) általános képletű kiinduló vegyületként almasavat, $\text{R}'-\text{OH}$ általános képletű vegyületként decil-alkoholt és

$\text{R}'-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{X}$ általános képletű savkloridként mirisztoil-kloridot alkalmazunk.

15. Az 1. igénypont szerinti eljárás olyan (I) általános képletű vegyületek előállítására, ahol az R csoport legfeljebb 20 szénatomot tartalmaz, azzal jellemezve, hogy olyan (III) általános képletű reagenst alkalmazunk, amelyben az R csoport legfeljebb 20 szénatomos.

16. Az 1. igénypont szerinti eljárás olyan (I) általános képletű vegyületek előállítására, ahol m és n értékének az összege 3-tól 25-ig terjed, azzal jellemezve, hogy a megfelelő (III) általános képletű reagenst alkalmazzuk.

17. A 16. igénypont szerinti eljárás olyan (I) általános képletű vegyületek előállítására, ahol m és n értékének az összege legfeljebb 12, azzal jellemezve, hogy a megfelelő (III) általános képletű reagenst alkalmazzuk.

18. A 16. igénypont szerinti eljárás, azzal jellemezve, hogy m-nek n-hez viszonyított aránya 1:10-től

3:1-ig terjed, a z z a l j e l l e m e z v e , h o g y a m e g f e l e l ő (III) általános képletű reagenst alkalmazzuk.

19. Az 1. igénypont szerinti eljárás olyan (I) általános képletű vegyületek előállítására, ahol az

$(R'-\overset{\text{O}}{\parallel}{C}-O)-$ általános képletű csoport jelentése $(R'-O-\overset{\text{O}}{\parallel}{C}-R')$ általános képletű csoport, a z z a l j e l l e m e z v e , h o g y olyan (III) általános képletű reagenst alkalmazunk, amelyben az (OH) csoport jelentése $-(R'OH)$ általános képletű csoport.

20. A 19. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , h o g y e g y (VIII) általános képletű első prekuzort és egy (IX) általános képletű $R'=O$ második prekuzort a (VII) általános képletű reagens kialakítására alkalmas körülmények között reagáltatunk.

21. A 19. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , h o g y e g y (X) általános képletű kiinduló vegyületet - amelyben R^O hidrogénatomot vagy 1-3 szénatomos alifás csoportot jelent - egy $R'-OH$ általános képletű vegyülettel a (VII) általános képletű reagens kialakítására alkalmas körülmények között reagáltatunk.

22. Eljárás a (XI) általános képletű reagensvegyületek előállítására - ahol a (XI) képletben

R jelentése szerves csoport;

R' jelentése 1-30 szénatomos alifás, észter- vagy étercsoport,

és az R' csoportok azonosak vagy különbözők lehetnek; és

m és n egész számok, amelyek értéke legalább 1, és m és n

összege legalább 2 -

a z z a l j e l l e m e z v e , h o g y e g y (XII) általános képletű

vegyülettel, amelyben X halogénatomot jelent, a (XI) általános képletű reagens vegyület kialakítására alkalmas körülmények között reagáltatunk.

23. A 22. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy egy (XI) általános képletű reagenst R'-OH általános képletű vegyülettel a (XIII) általános képletű vegyületek kialakítására alkalmas körülmények között reagáltatunk.

24. A 23. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy egy (XIV) általános képletű kiinduló vegyületet egy R'X általános képletű vegyülettel, ahol X halogénatomot jelent - a kívánt prekursorvegyület kialakítására alkalmas körülmények között reagáltatunk.

25. A 24. igénypont szerinti eljárás, 2,2-bisz(oleoil-oxi-metil)-propionsav-oleil-észter előállítására, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy (XI) általános képletű reagensként 2,2-bisz(oleoil-oxi-metil)-propionil-kloridot, prekuzorként 2,2-bisz(oleoil-oxi-metil)-propionsavat, (XIV) általános képletű kiinduló vegyületként 2,2-bisz(hidroxi-metil)-propionsavat, R'X általános képletű vegyületként olajsavkloridot, SOX₂ általános képletű vegyületként tionil-kloridot és R'-OH általános képletű vegyületként oleil-alkoholt alkalmazunk.

26. Eljárás táplálkozásra alkalmas készítmények (élelmiszerkészítmények) előállítására, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy azoknak a táplálkozásra alkalmas komponenseiben zsirutánzó vegyületként zsir helyettesítésére egy (I) általános képletű vegyületet alkalmazunk, ahol az (I) képletben R, R', m és n jelentése az 1. igénypontban meghatározott.

27. A 26. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként (sztearoil-oxi)-metándikarbonsav-didecil-észtert alkalmazunk.

28. A 26. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként 2-(sztearoil-oxi)-1,1-etándikarbonsav-didecil-észtert alkalmazunk.

29. A 26. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként 1-(oktanoil-oxi)-etándikarbonsav-1-decil-2-sztearil-észtert alkalmazunk.

30. A 26. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként 1-(hexanoil-oxi)-etántrikarbonsav-1-sztearil-2,2-didodecil-észtert alkalmazunk.

31. A 26. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként 2-(mirisztoil-oxi)-1,3-propándikarbonsav-dioleil-észtert alkalmazunk.

32. A 26. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként 3-(heptadekanoil-oxi)-1,2-propándikarbonsav-dioleil-észtert alkalmazunk.

33. A 26. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként 4-(oleoil-oxi)-1,3-butándikarbonsav-dipalmitil-észtert alkalmazunk.

34. A 26. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként 2-(palmitoil-oxi)-1,4-butándikarbonsav-dimirisztil-észtert alkalmazunk.

35. A 26. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként 4-(mirisztoil-oxi)-1,2-butándikarbonsav-1-dodecil-2-sztearil-észtert al-

kalmazunk.

36. A 26. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként 4,5-di(sztearoil-oxi)-1,2,3-pentántrikarbonsav-trioleil-észtert alkalmazunk.

37. A 26. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e . hogy zsirutánzó vegyületként 5-(oktanoil-oxi)-4-metil-4-hidroxi-1,2,3-pentántrikarbonsav-trisztearil-észtert alkalmazunk.

38. A 26. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként 2-(2,2-dimetil-propionil-oxi)-1,3-propándikarbonsav-didecil-észtert alkalmazunk.

39. A 26. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként 1,3-di(oleoil-oxi)-2,2-propándikarbonsav-dioleil-észtert alkalmazunk.

40. A 26-39. igénypontok bármelyike szerinti eljárás vizes és zsiros fázist tartalmazó, margarinpótló élelmiszerkészítmény előállítására, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy a megfelelő (I) általános képletű zsirutánzó vegyület a zsiros fázisban van.

41. A 26-39. igénypontok bármelyike szerinti eljárás élelmiszerkészítményként sütésre alkalmas zsirtermék előállítására, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy abban zsirutánzó vegyületként egy megfelelő (I) általános képletű vegyületet alkalmazunk.

42. A 26-39. igénypontok bármelyike szerinti eljárás táplálkozásra alkalmas készítményként valamely gyógyászati készítmény előállítására, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy

abban egy megfelelő (I) általános képletű vegyületet alkalmazunk.

43. A 26.-39. igénypontok bármelyike szerinti eljárás csökkent kalóriaértékű zsirt vagy olajat tartalmazó, táplálkozásra alkalmas készítmények (élelmiszerkészítmények) előállítására, azzal jellemezve, hogy a zsír vagy olaj legalább egy részét egy megfelelő (I) általános képletű zsirutánzó vegyülettel helyettesítjük.

44. A 26-39. igénypontok bármelyike szerinti eljárás csökkent kalóriaértékű zsirt vagy olajat tartalmazó, táplálkozásra alkalmas készítmények (élelmiszerkészítmények) előállítására, azzal jellemezve, hogy a zsirt vagy olajat egy megfelelő (I) általános képletű zsirutánzó vegyülettel helyettesítjük.

45. A 26-39. igénypontok bármelyike szerinti eljárás margarinkészítmény előállítására, azzal jellemezve, hogy abban egy megfelelő (I) általános képletű zsirutánzó vegyületet alkalmazunk.

46. Eljárás táplálkozásra alkalmas készítmények (élelmiszerkészítmények) előállítására, azzal jellemezve, hogy azok táplálkozásra alkalmas komponenseiben zsirutánzó vegyületként egy (II) általános képletű vegyületet alkalmazunk, ahol a (II) képletben

C jelentése szénatom;

X jelentése: hidrogénatom; hidroxilcsoport; rövid szénláncu, előnyösen 1-4 szénatomos, szubsztituálatlan vagy szubsztituált alifás csoport, és az X csoportok azonosak vagy különbözők lehetnek;

Q jelentése $-C(=O)-O-R'$ (karboxilát) csoport, $-CH_2-C(=O)-O-R'$ (metil-karboxilát) csoport, $-O-C(=O)-R'$ (karboxi) csoport vagy $-CH_2-O-C(=O)-R'$ (metil-karboxi) csoport,

azzal a megkötéssel, hogy mindegyik molekula legalább egy karboxi- vagy metil-karboxi-, és legalább egy karboxilát- vagy metil-karboxilát-csoportot tartalmaz;

R' jelentése (a) általános képletű, szubsztituált vagy szubsztituálatlan szerves csoport, és az R' csoportok azonosak vagy különbözők lehetnek;

T jelentése hidrogénatom, vagy szubsztituált vagy szubsztituálatlan alifás csoport;

Z jelentése hidképző, szénatomot szénatomhoz kapcsoló csoport, vagy hidrogénatom; vagy valamilyen alkoholból származó csoport (alkoholmaradék); vagy $-O-C(=O)-CH_2-T$ általános képletű glikolésztercsoport; vagy étercsoport, azzal a megkötéssel, hogy egy R' csoport csak egyetlen hidképző vegyértékkötést tartalmazhat; és

a értéke 0-3;

b értéke 0-4;

d értéke 1 vagy 2;

e értéke 0-5;

f értéke 0-3;

g értéke 0-4; és

h értéke 1 vagy 2.

47. A 46. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként olyan (II) általános képletű vegyületet alkalmazunk, ahol a (II) képletben a értéke 0-2;

- b értéke 0-1;
 d értéke 1 vagy 2;
 e értéke 1 vagy 2;
 f értéke 0-2;
 g értéke 0-1; és
 h értéke 1 vagy 2.

48. A 46. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként egy (XV) általános képletű vegyületet alkalmazunk.

49. A 46. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként egy (XVI) általános képletű vegyületet alkalmazunk.

50. A 46. igénypont szerinti eljárás, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként egy (XVII) általános képletű vegyületet alkalmazunk.

51. Eljárás az emberi fogyasztásra alkalmas zsirok izletességi követelményeit kielégítő élelmiszerkészítmények előállítására a kalória felvétel korlátozása mellett, a z z a l j e l l e m e z v e , hogy emberek táplálására olyan, táplálkozásra alkalmas terméket alkalmazunk, amelyben zsirutánzó vegyületként egy (I) általános képletű vegyületet használunk, ahol az (I) képletben R, R', m és n jelentése az 1. igénypontban meghatározott; és

az $(R'-\overset{O}{\parallel}C-O)$ csoport az [R] egységről az emberi emésztőrendszerben viszonylag könnyen lehasad, s így a kalóriabevitelhez hozzájárul; míg

az $(\overset{O}{\parallel}C-O-R')$ csoport e hasítással szemben igen ellenálló, és

ennek következtében a kalóriabevitelhez csak korlátozott mértékben járul hozzá.

52. Az 51. igénypont szerinti eljárás vizes és zsiros fázist tartalmazó margarinpótló élelmiszerkészítmény előállítására, azzal jellemezve, hogy az (I) általános képletű zsirutánzó vegyület a zsiros fázisban van.

53. Az 51. igénypont szerinti eljárás élelmiszerkészítményként sütésre alkalmas zsirtermék előállítására, azzal jellemezve, hogy abban zsirutánzó vegyületként egy (I) általános képletű vegyületet alkalmazunk.

54. Az 51. igénypont szerinti eljárás táplálkozásra alkalmas készítményként valamely gyógyászati készítmény előállítására, azzal jellemezve, hogy abban egy (I) általános képletű zsirutánzó vegyületet alkalmazunk.

55. Az 51. igénypont szerinti eljárás csökkent kalóriaértékű zsirt vagy olajat tartalmazó, táplálkozásra alkalmas készítmények (élelmiszerkészítmények) előállítására, azzal jellemezve, hogy a zsír vagy olaj legalább egy részét egy (I) általános képletű zsirutánzó vegyülettel helyettesítjük.

56. Az 51. igénypont szerinti eljárás csökkent kalóriaértékű zsirt vagy olajat tartalmazó, táplálkozásra alkalmas készítmények (élelmiszerkészítmények) előállítására, azzal jellemezve, hogy a zsirt vagy olajat egy (I) általános képletű zsirutánzó vegyülettel helyettesítjük.

57. Az 51. igénypont szerinti eljárás margarinkészítmény előállítására, azzal jellemezve, hogy abban egy megfelelő (I) általános képletű zsirutánzó vegyületet alkal-

mazunk.

58. Eljárás az emberi fogyasztásra alkalmas zsirok iz-
letességi követelményeit kielégítő élelmiszerkészítmények elő-
állítására a kalóriafelvétel korlátozása mellett, a z z a l
j e l l e m e z v e , hogy emberek táplálására olyan táplálkozásra
alkalmas terméket alkalmazunk, amelyben zsirutánzó vegyület-
ként egy (II) általános képletű vegyületet használunk, ahol a
(II) képletben C, X, Q, a, b, d, e, f, g és h jelentése a
46. igénypontban meghatározott.

59. Az 58. igénypont szerinti eljárás, a z z a l
j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként olyan (II) ál-
talános képletű vegyületet alkalmazunk, ahol a (II) képletben
a, b, d, e, f, g és h értéke ugyanaz, mint a 47. igénypontban.

60. Az 58. igénypont szerinti eljárás, a z z a l
j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként egy (XV) ál-
talános képletű vegyületet alkalmazunk.

61. Az 58. igénypont szerinti eljárás, a z z a l
j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként egy (XVI) ál-
talános képletű vegyületet alkalmazunk.

62. Az 58. igénypont szerinti eljárás, a z z a l
j e l l e m e z v e , hogy zsirutánzó vegyületként egy (XVII) ál-
talános képletű vegyületet alkalmazunk.

60 lap
16 lap leplel

76

A meghatalmazott:

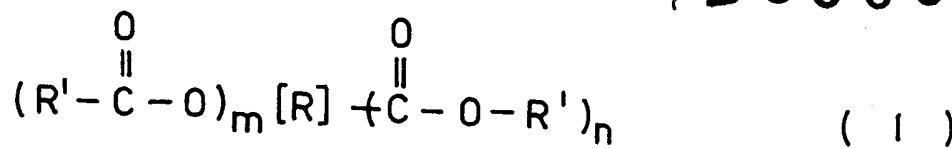
 
DANUBIA
Szabadalmi és Védjegy Iroda Kft.
5.

5529/88

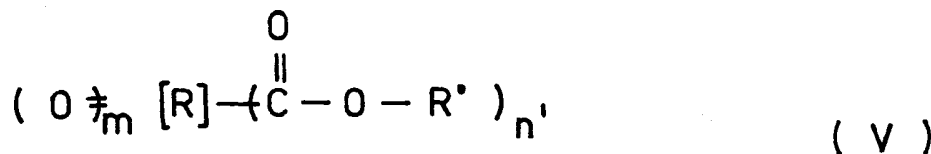
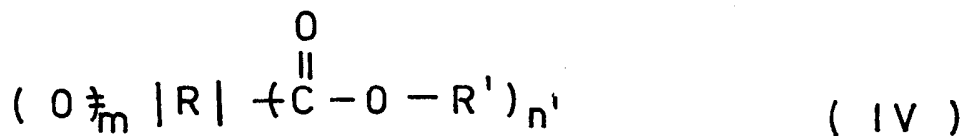
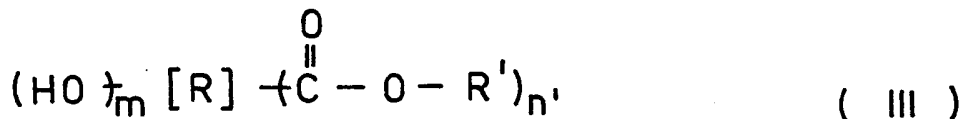
12193

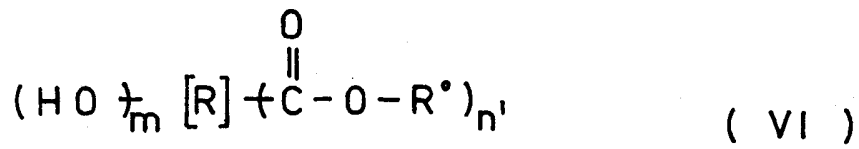
16/1

55968

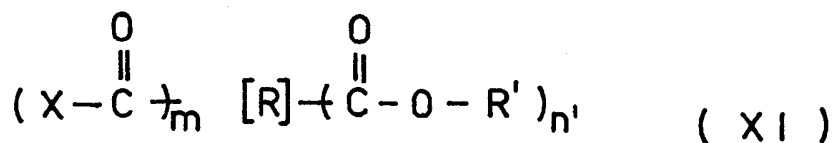
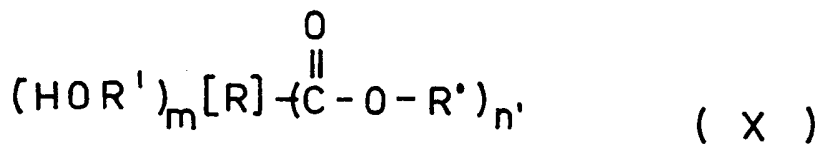
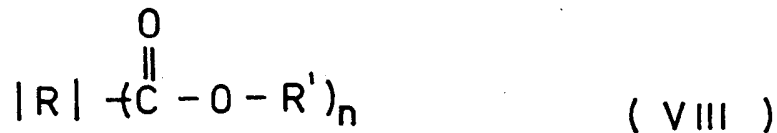
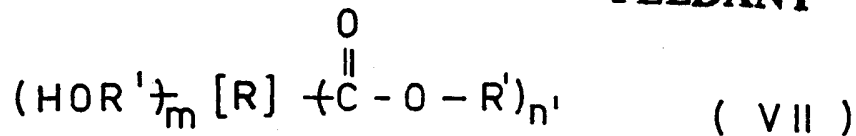


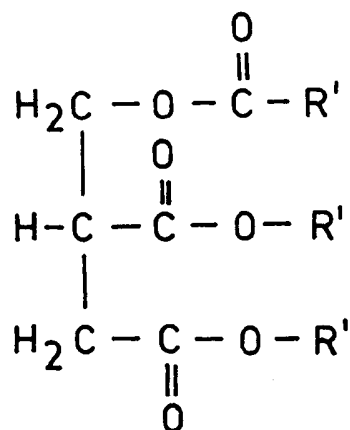
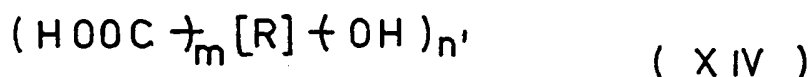
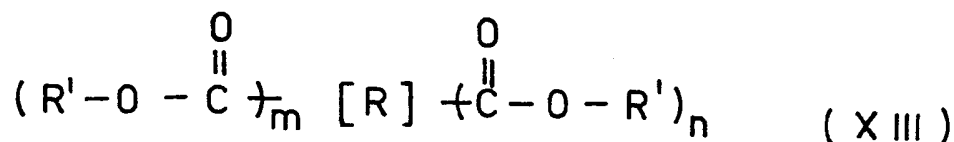
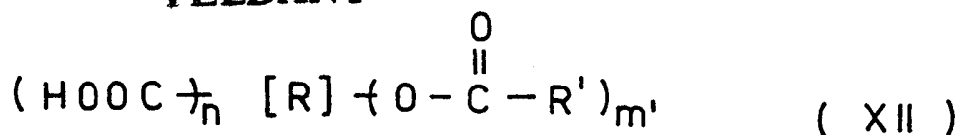
**KÖZZÉTÉTELI
PÉLDÁNY**



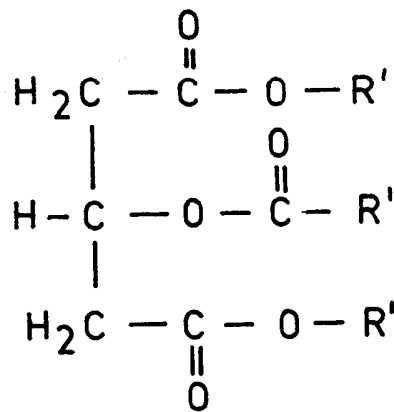


**KÖZZÉTÉTELI
PÉLDÁNY**



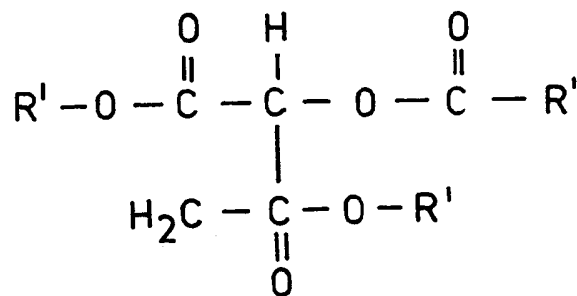


(XV)

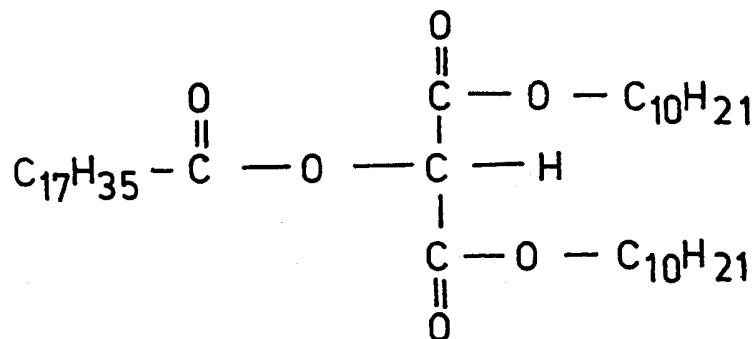


**KÖZZÉTÉTELI
PÉLDÁNY**

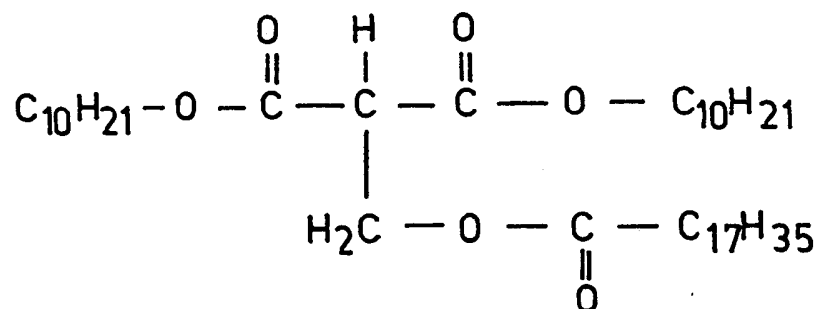
(XVI)



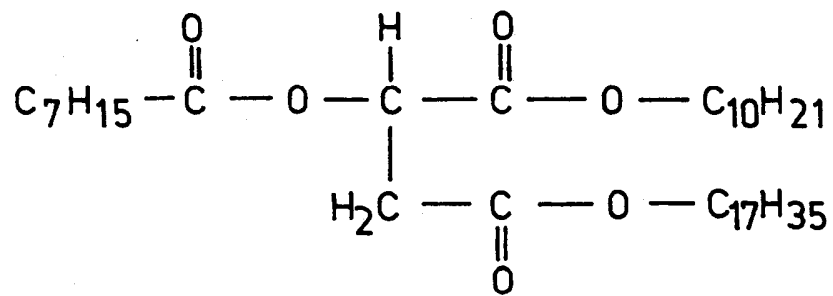
(XVII)



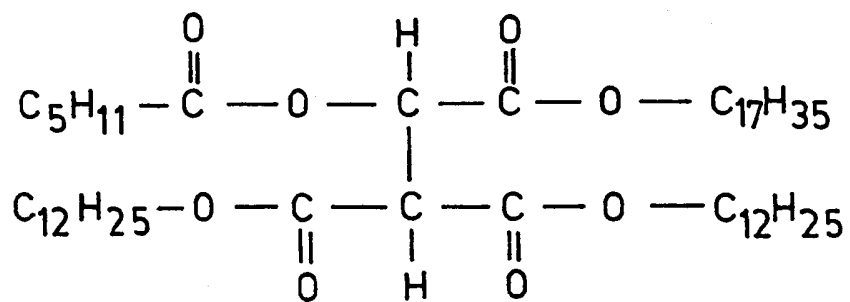
(1)



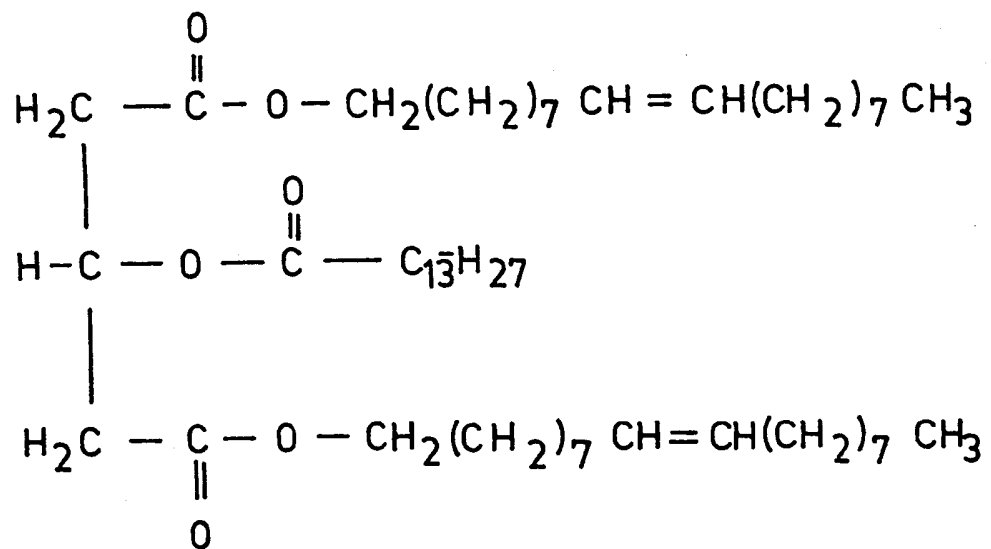
(2)



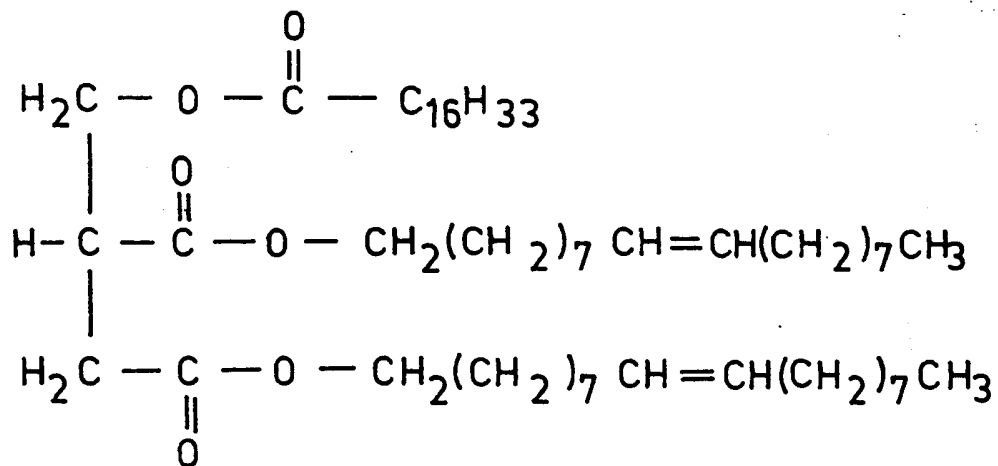
(3)



(4)

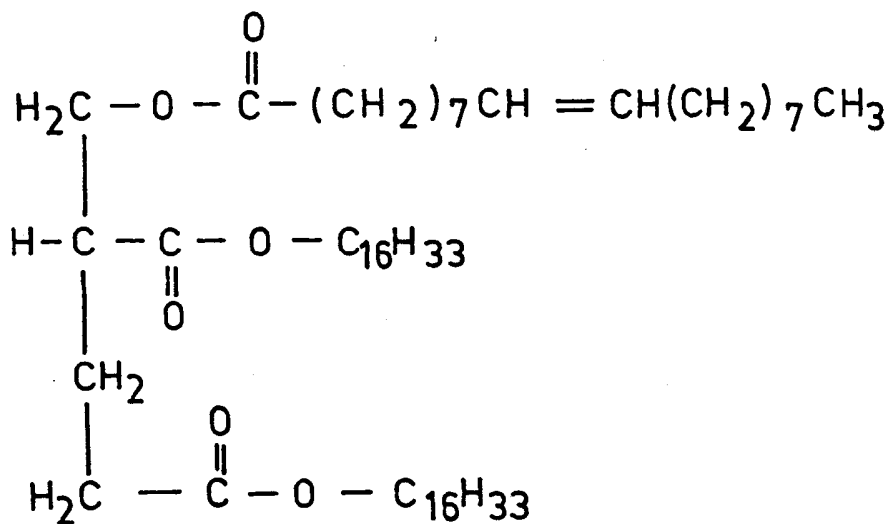


(5)

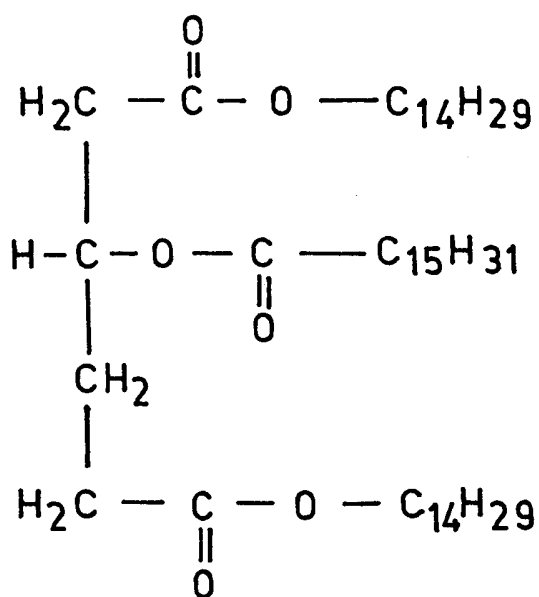


(6)

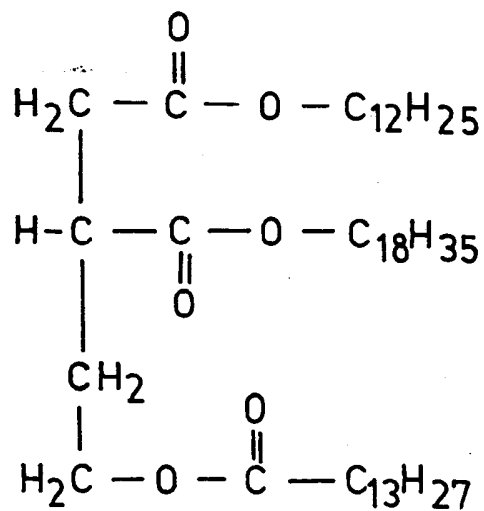
KÖZZÉTÉTELI PÉLDÁNY



(7)

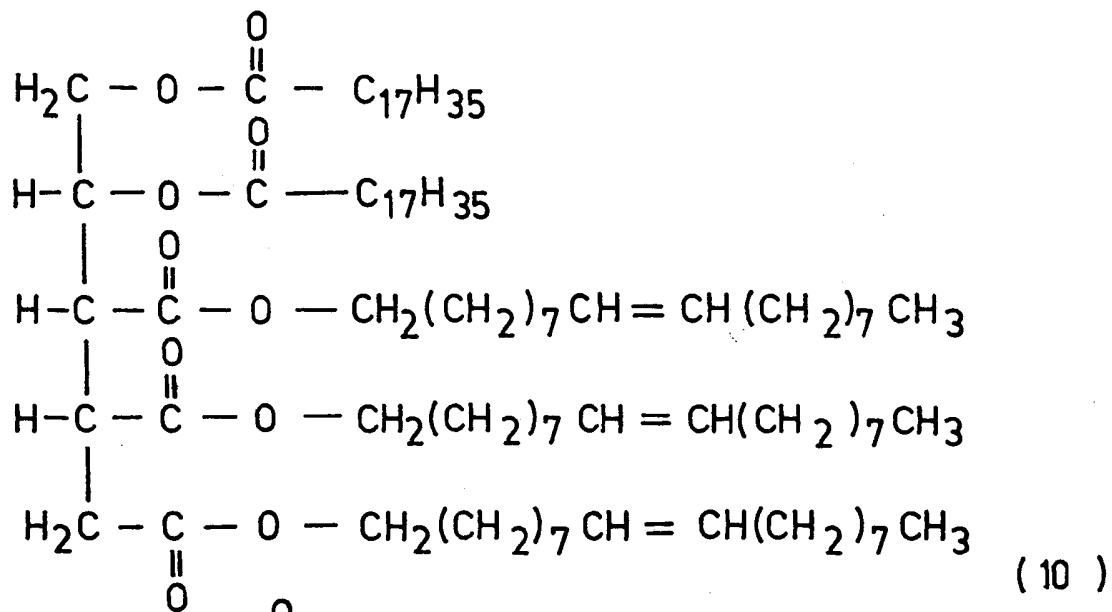


(8)

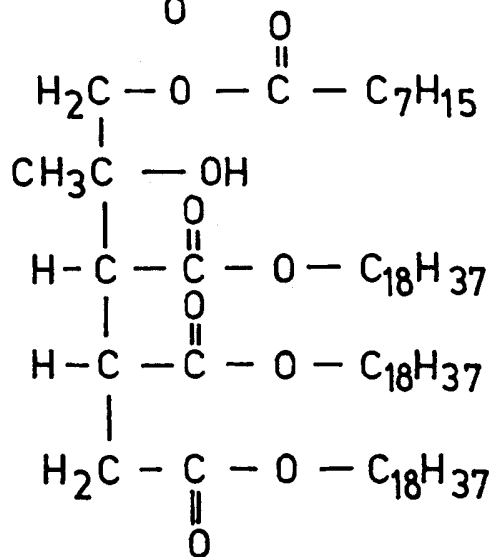


**KÖZZÉTÉTELI
PÉLDÁNY**

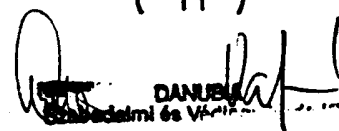
(9)

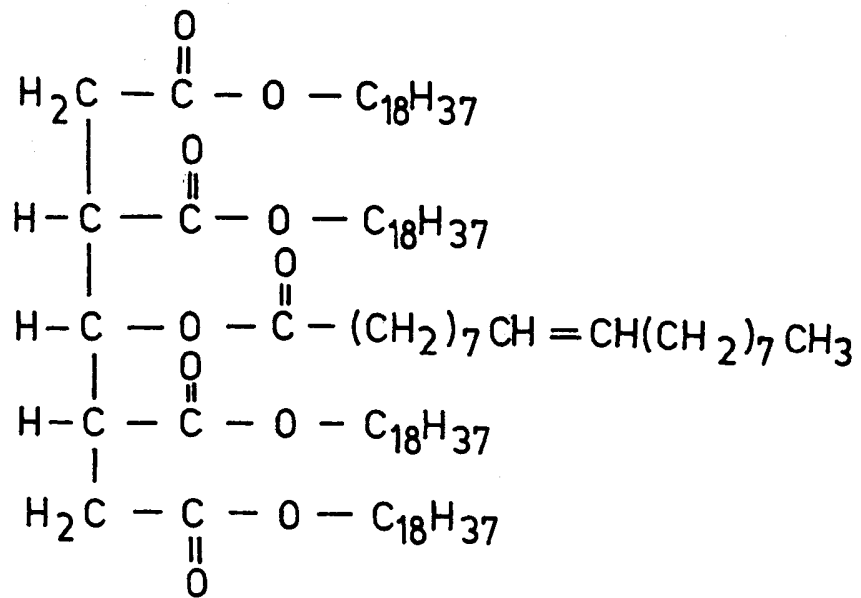


(10)



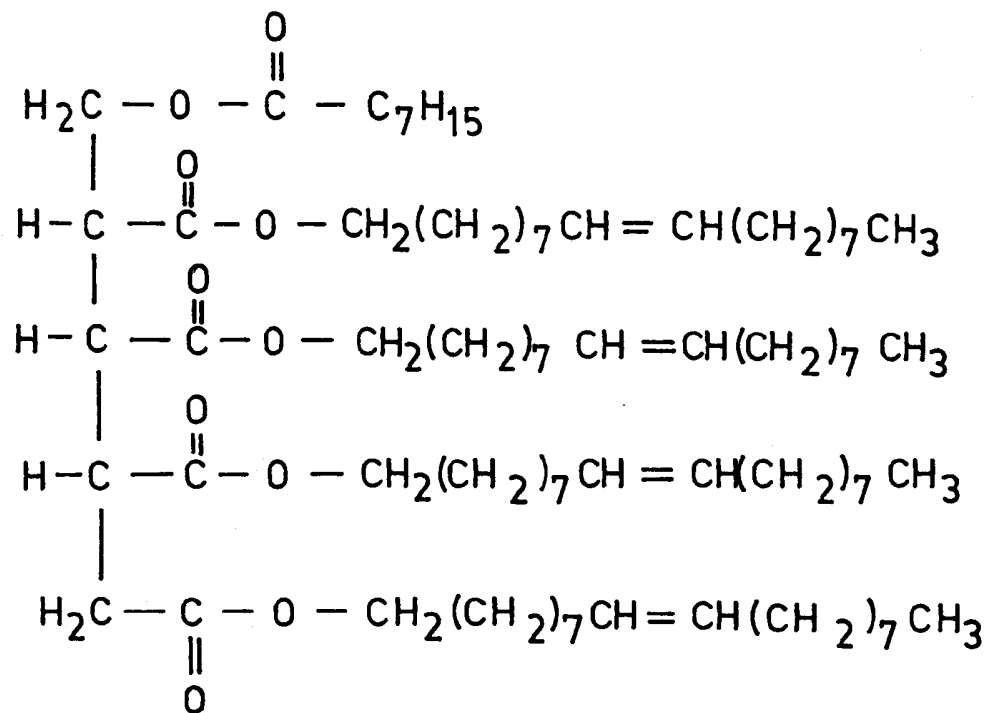
(11)


DANIEL
Közvetési és Védő




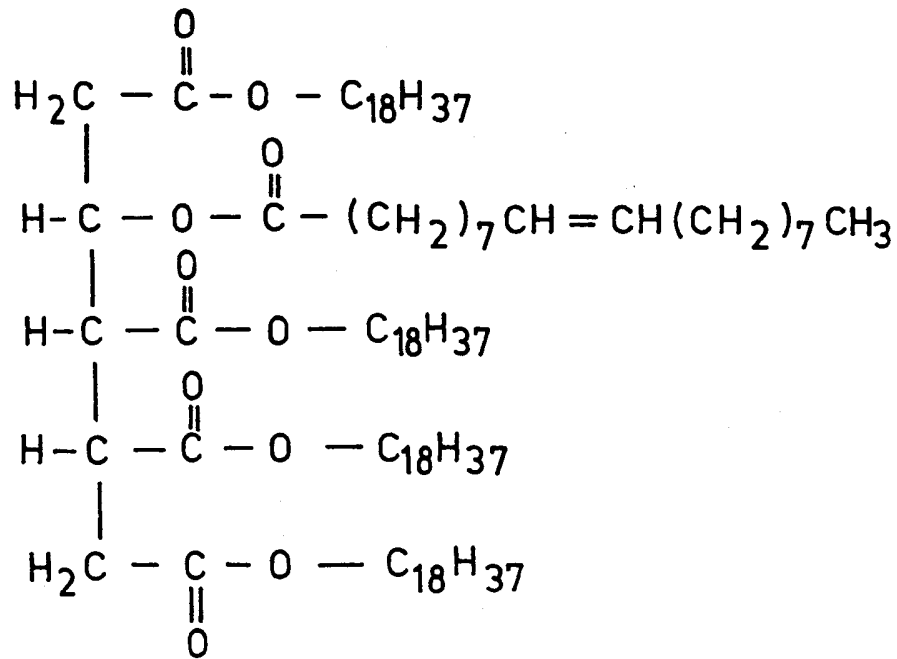
(12)

**KÖZZÉTÉTELI
PÉLDÁNY**



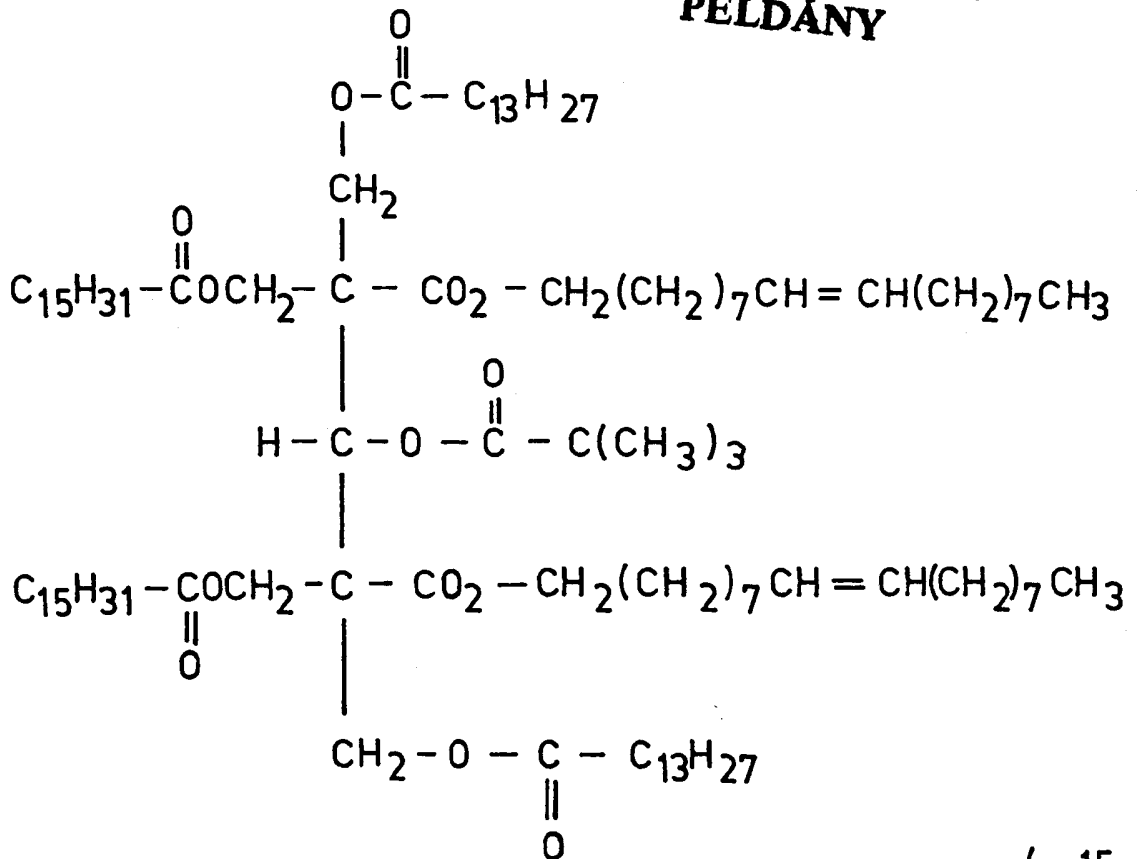
(13)


 DANUBIA
 Szabványozási és Védjegyi Intézet Kft.
 8.

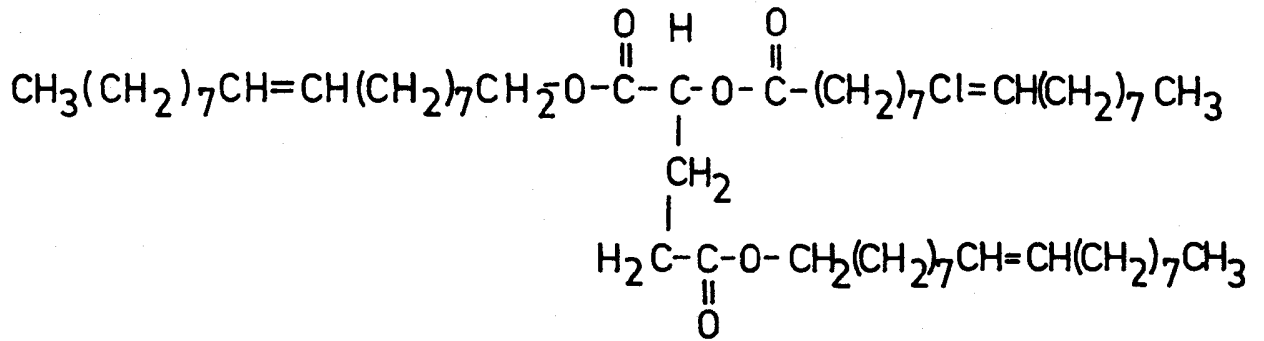


(14)

**KÖZZÉTÉTELI
PÉLDÁNY**

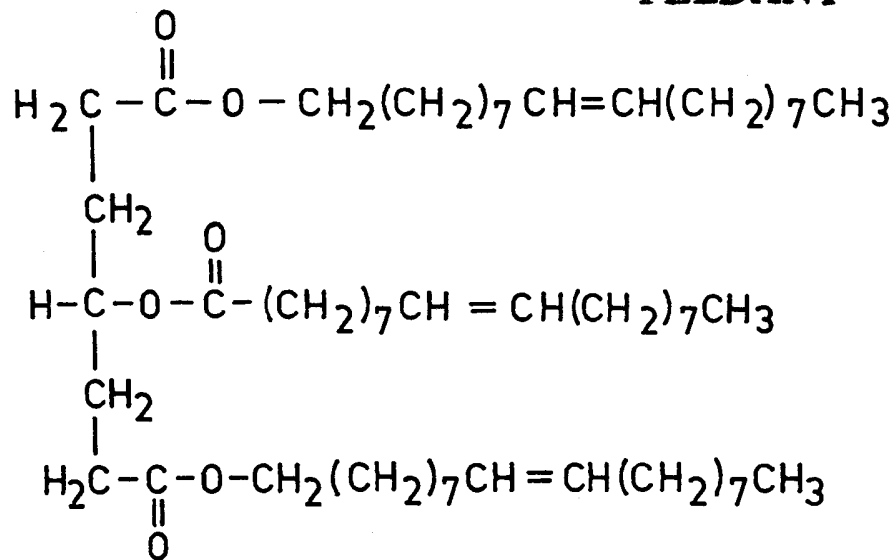


(15)

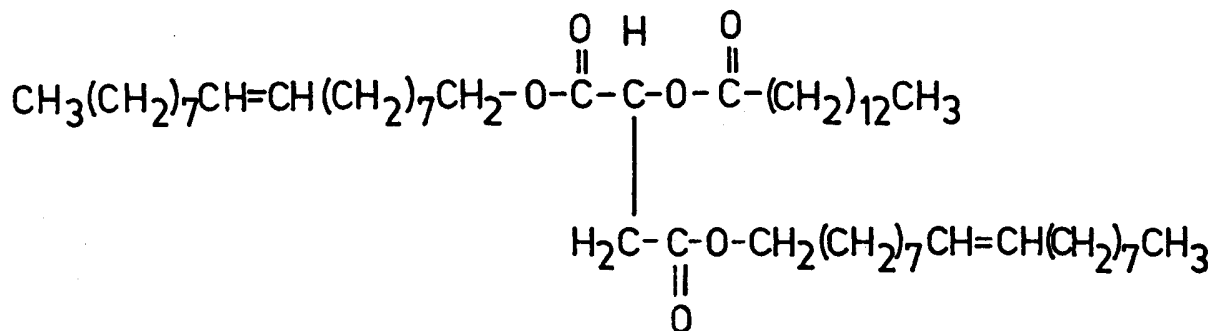


(19)

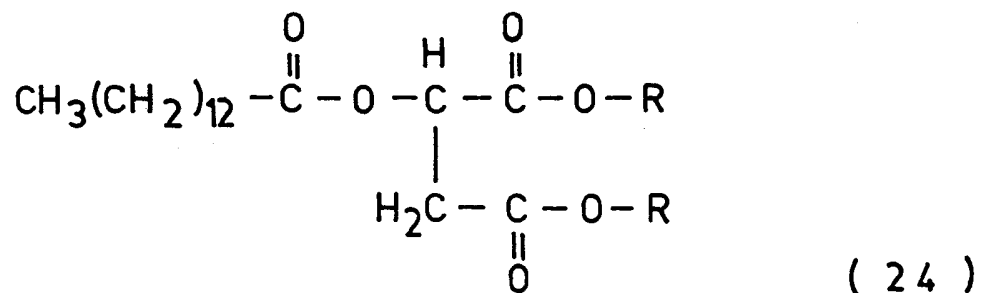
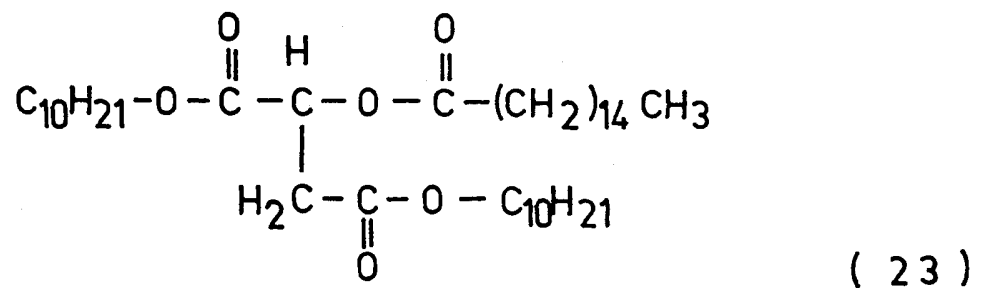
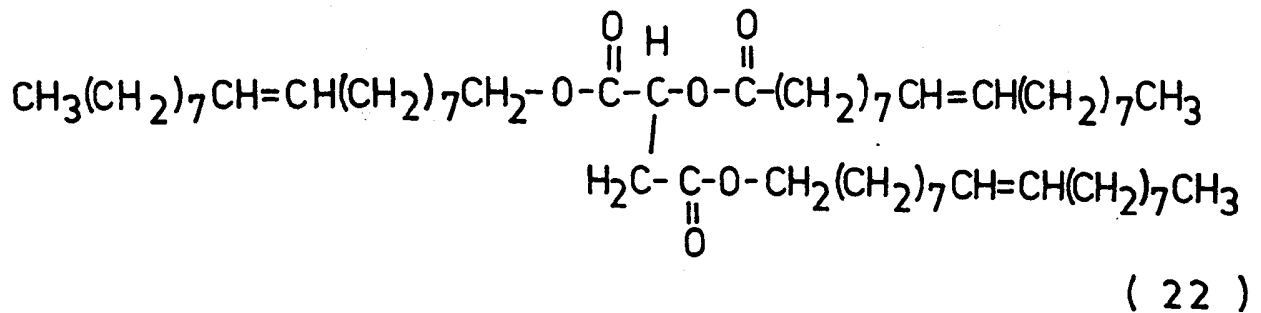
**KÖZZÉTÉTELI
PÉLDÁNY**



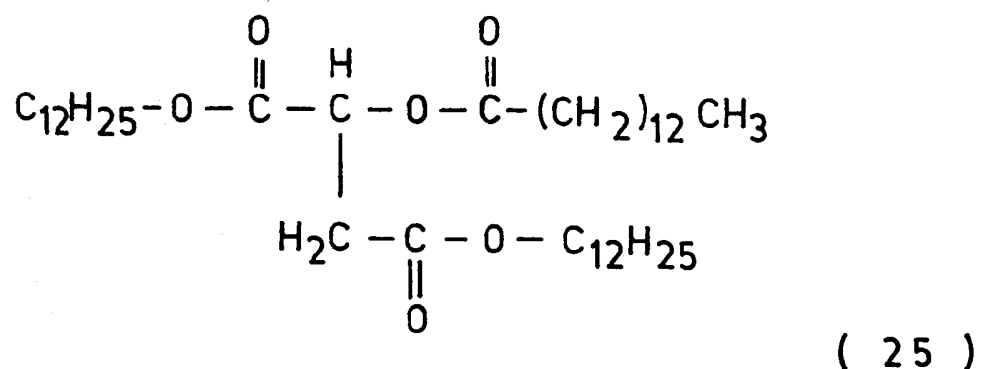
(20)

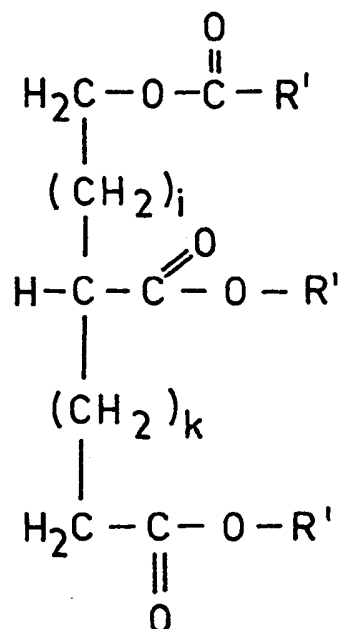
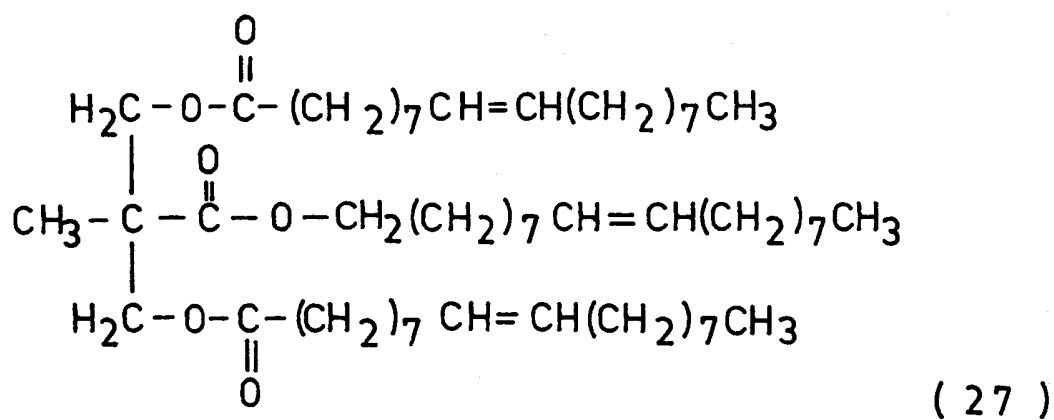
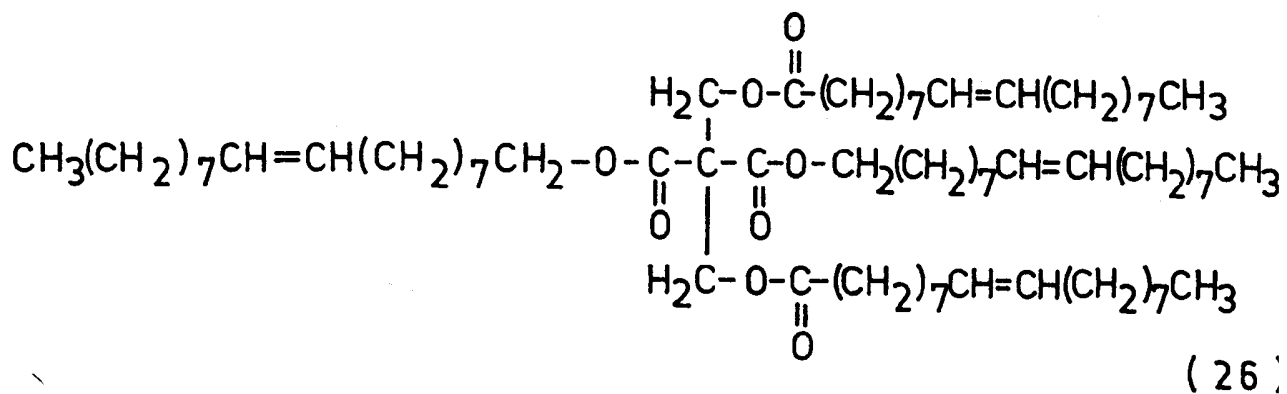


(21)



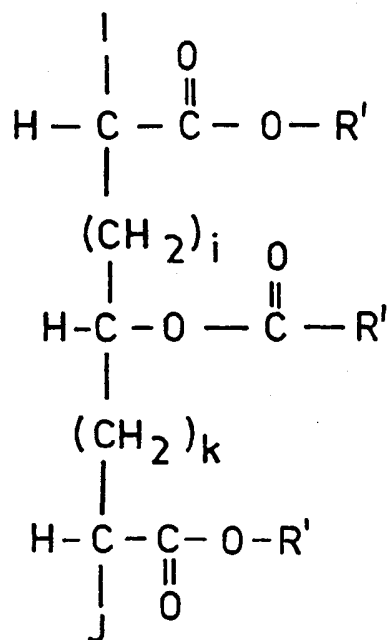
**ÖZÉTÉTELI
ÉLDÁNY**



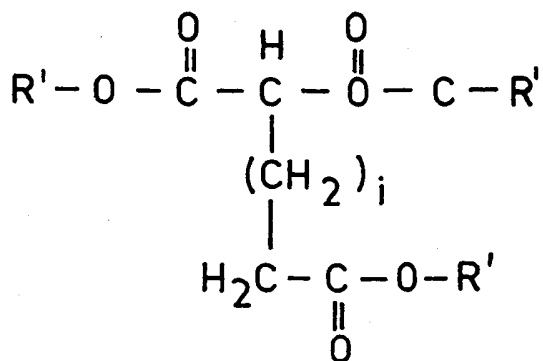


**KÖZZÉTÉTELI
PÉLDÁNY**

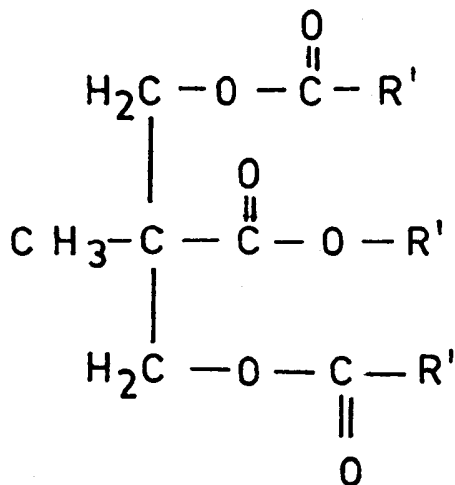
(28)



(29)



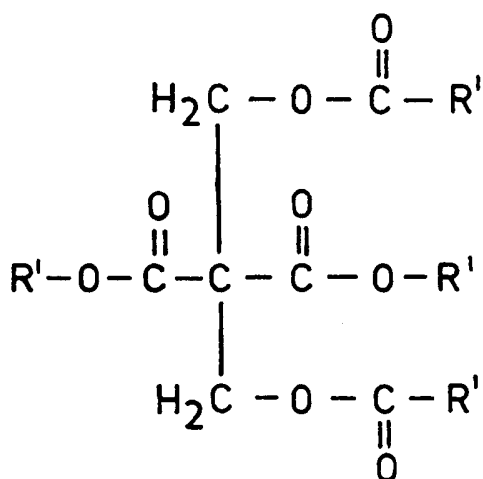
(30)



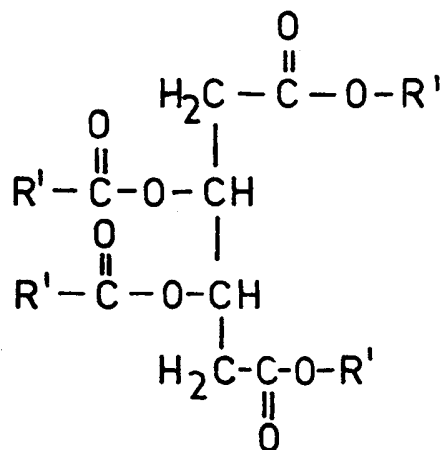
(31)

**KÖZZÉTÉTELI
PÉLDÁNY**

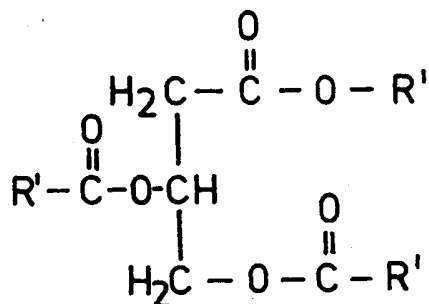
Aug
DANIÉLA
Szabadalmi és Védjegy Iróda Kft.
B.



(32)

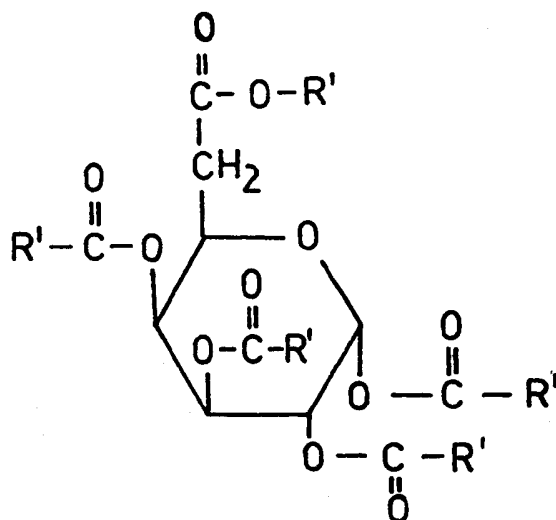


(33)



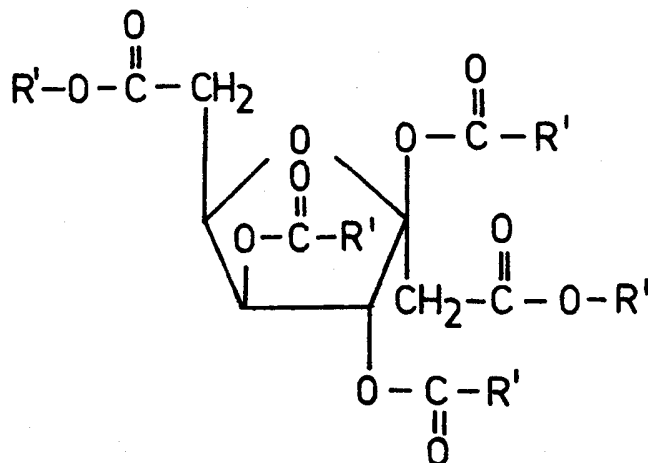
**KÖZZÉTÉTELI
PÉLDÁNY**

(34)



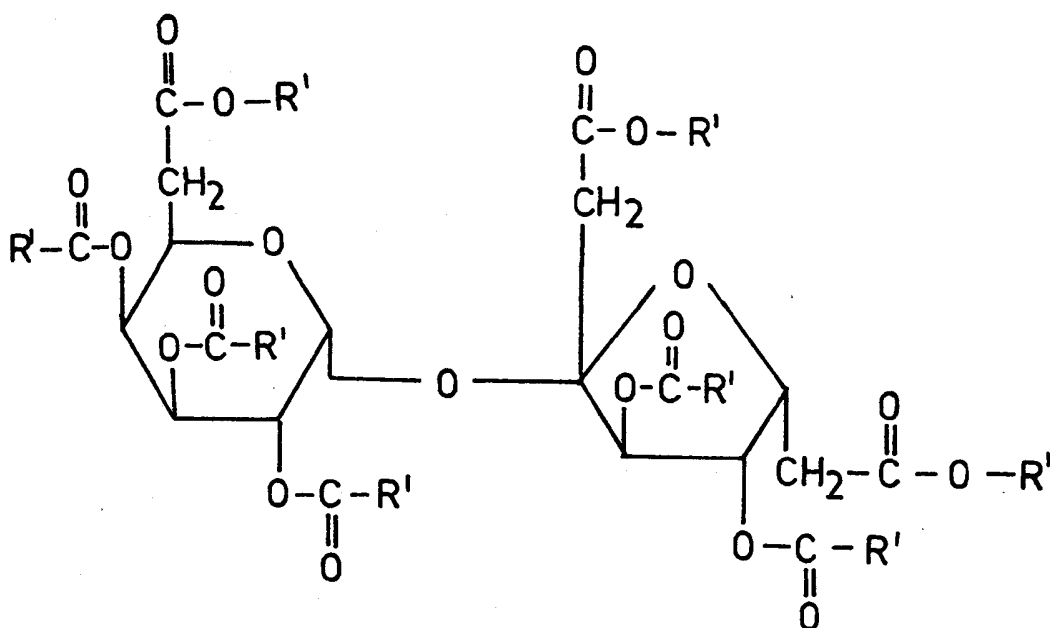
(35)

Aut
 DANUBIA
 KÖZLEMÉNY-ÉS VÉDELMI IRODA KFT.

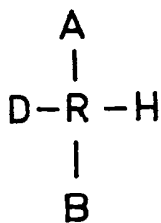


**KÖZZÉTÉTELI
PÉLDÁNY**

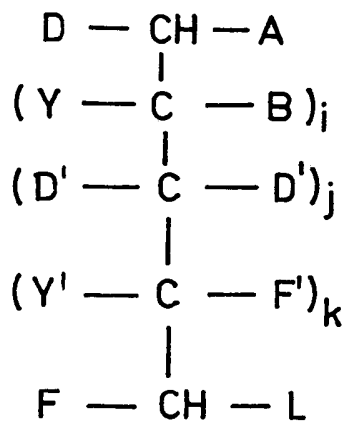
(36)



(37)



(38)



(39)