

**M. Sc Abduladhim Moamer M. Albegar**

**Doctoral dissertation**

**Physicochemical characterization of plant oils and their blends - their thermal changes studied by infrared and Raman spectroscopy**

The results presented in the dissertation shows that vibrational spectroscopy combined with chemometric and mathematical procedures can solve the difficult problems important for technological applications of the oils and their blends, as well as their thermal behaviors. The dissertation contains three experimental chapters in which the results of the chemical and spectroscopic studies obtained for different types of oils have been discussed. In each of these parts the vibrational spectroscopy is used for explanation of special phenomena appearing in the chemistry of oils.

The following problems have been analyzed in the dissertation:

**1. Quantitative determination of the iodine values of unsaturated plant oils using infrared and Raman spectroscopy methods**

A new method of the iodine values determination for edible oils has been proposed. The correlation between this spectral parameter and the IV allows to construct a relationship between the spectroscopic and chemometric data of the oils. The use of the characteristic pair of bands for this purposes was not proposed earlier. Moreover, a new theoretical approach to analysis of the results has been proposed. It uses the procedure of the computer deconvolution of spectral contours into Lorentz components, evaluation of the integral intensities of the bands and finding the correlation between the IV and the ratio of the respective band intensities

**2. Additivity of the fatty acids content and smoke point in the composition of plant oil blends for deep-frying and salad-dressing**

The studies are focused on the properties of the blends prepared from a few plant oils. It was shown that the chemical parameters of the final mixture, i.e. saturated, mono-unsaturated and poly-unsaturated acids content and iodine value, can be predicted when the characteristics of individual components are known. These parameters, determined by the chromatographic and IR spectroscopic methods, can constitute input data for theoretical evaluations. These partial values are additive and they approximate final parameters of the blends in a sufficient way. These statements have been verified by experimental determination of the fatty acid profiles and iodine values for palm, coconut, rice bran and rapeseed (canola) oils and the model blends formed from these oils have been used for verification of the assumed in the present work theses. On the other hand, it has been shown that the thermal properties of the blend mixture could not be foreseen from the partial parameters (smoke points) of the constituting oils.

The linear dependencies were obtained for the infrared and Raman spectra and these calibration lines can be used to determine the IV for oils with unknown unsaturation level, and they may be applied for margarines and other fatty materials.

**3. Spectroscopic evidence of thermal changes in plant oils during deep-frying – chemical and infrared studies**

Thermal degradation of palm, coconut, rice bran and rapeseed (canola) oils and model blends made of their mixtures has been studied. The products formed during deep frying were identified using chemical methods and these results were verified with those derived from FT-IR studies. Mathematically processed spectral data were analyzed in terms of the double bonds breaking, decomposition of the carotenoids and reduction of the C=O carbonyl group. Clearly visible changes in the position and intensity of some bands were used for explaining the structural changes of the studied oils.

**Mgr Abduladhim Moamer M. Albegar**

### **Praca doktorska**

#### **Właściwości fizykochemiczne olejów roślinnych i ich mieszanin - metody spektroskopii w podczerwieni i Ramana w badaniach ich zmian termicznych**

Praca doktorska wykorzystuje metody spektroskopii w podczerwieni i Ramana w badaniach olejów roślinnych i ich mieszanin technologicznych. Porównanie danych chemometrycznych z parametrami uzyskanymi z widm oscylacyjnych pozwoliło wyciągnąć wnioski na temat jakości olejów, ich profili tłuszczowych oraz zmian jakie w nich zachodzą w wysokich temperaturach.

Praca zawiera wstęp, opis stosowanych metod fizykochemicznych, trzy główne części eksperymentalne, wnioski i spis literatury. Trzy części eksperymentalne zajmują się następującymi problemami:

#### **1. Wyznaczenie liczby jodowej nienasyconych olejów roślinnych metodami spektroskopii w podczerwieni i Ramana.**

W pracy doktorskiej zaproponowano nową metodę wyznaczania liczby jodowej olejów roślinnych. Wykorzystując parametry spektralne widm oraz porównując je z danymi chemometrycznymi wyprowadzono liniowe zależności między względną intensywnością integralną wybranych pasm a liczbą jodową, charakteryzującą zawartość w oleju nienasyconych kwasów tłuszczowych. Wykorzystano w tej procedurze komputerową dekonwolucję konturów spektralnych na składowe Lorentza.

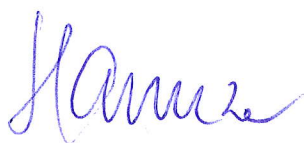
#### **2. Addytywność parametrów chemicznych i punktu dymienia olejów roślinnych w komponowaniu z nich mieszanin olejowych dla głębokiego smażenia i przygotowania sałatek.**

W pracy doktorskiej wykazano iż parametry chemiczne charakteryzujące mieszaniny olejów roślinnych (miksi olejowe), czyli zawartość nienasyconych kwasów tłuszczowych i liczbę jodową, mogą być wyznaczone ze znanych wartości jednostkowych olejów składowych stosując regułę addytywności. W badaniach wykorzystano dane wyznaczone chromatograficznie oraz wyprowadzone z pomiarów widm w podczerwieni; traktowano je w obliczeniach jako dane wejściowe. Do tych analiz wybrano cztery podstawowe oleje roślinne: olej palmowy, kokosowy, ryżowy i rzepakowy. Udowodniono tą drogą iż parametry chemiczne mieszanin olejowych można z dużą precyzją przewidzieć teoretycznie, ale metoda ta nie może być stosowana dla prognozy parametru fizycznego jakim jest punkt dymienia.

Nowe podejście teoretyczne może być stosowane do innych układów tłuszczowych np. tłuszczów zwierzęcych i margaryn.

### **3. Identyfikacja zmian termicznych olejów roślinnych zachodzących podczas głębokiego smażenia.**

Efekty termicznej degradacji wybranych olejów roślinnych i ich modelowych mieszanin badano metodą pomiarów ich widm w podczerwieni. Tworzące się podczas ogrzewania produkty rozkładu olejów identyfikowano analizując zmiany mierzonych widm. Tą drogą analizowano zachowania wiązań C=C kwasów tłuszczowych, dekompozycję karotenoidów oraz redukcje wiązań C=O grupy karboksylowej. Efekty spektroskopowe wykorzystano dla potwierdzenia temperaturowych zmian strukturalnych wynikających z badań chemicznych tych olejów i ich mieszanin.



**Prof. Jerzy Hanuza**



**Abduladhim Moamer M. Albegar**

