

INTERNATIONALE ARBEITSTAGUNG

VORKOMMEN UND ANALYTIK ÄTHERISCHER ÖLE



AM LEHRSTUHL FÜR PHARMAZEUTISCHE
BIOLOGIE DER UNIVERSITÄT WÜRZBURG
UNTER DER LEITUNG VON PROF. DR. K.-H. KUBECZKA

WÜRZBURG, 3. UND 4. 9. 1976

Tagungsprogramm

Donnerstag, den 2.9.1976

ab 19.00 Begrüßungsabend in der Dallenberg-Gaststätte, Würzburg
Mittlerer Dallenbergweg 49 mit Gelegenheit zum Abendessen.
Das Tagungsbüro ist dort ab 19.00 geöffnet.

Freitag, den 3.9.1976

Vormittag

9.00 Eröffnung der Tagung

9.15 Sprecher, Hamburg: Flüchtige Stoffwechselprodukte
aus Mikroorganismen

Heinrich, Hamburg: Feinstruktur ätherisches Öl-erzeugender
Drüsenzellen in höheren Pflanzen

Pause

Hörster, Münster: Monoterpenglykoside und ihre Bedeutung für die
Akkumulation und Biosynthese terpenoider Ölbildner

Hefendehl, Freiburg: Möglichkeiten zur Aufklärung der Biosynthese
ätherischer Öle mit Hilfe genetischer Experimente

Nachmittag

14.00 von Schantz, Helsinki: Gaschromatographische und spektrometrische
Untersuchungen von ätherischen Ölen

Schomburg, Mülheim: Gaschromatographische Analyse komplizierter
Stoffgemische

Masselink, Neuss: Einsatz von Kleinrechnern in Massenspektrometersysteme

Pause

Demonstration einer GC-MS-Kopplung mit angeschlossenem Datensystem der
Firma Finnigan GmbH München,

Besichtigung des Botanischen Gartens und des Lehrstuhls für Pharmazeutische
Biologie

19.45 Treffen zur gemeinsamen Weinprobe in der Staatl. Hofkellerei am
Frankoniabrunnen auf dem Residenzplatz.
(Teilnahmegebühr 20,- DM)

Samstag, den 4.9.1976

Vormittag

9.00 Formaček, Rheinstetten-Forchheim; Einsatzmöglichkeiten der Kohlenstoff-13-Kernresonanz-Spektroskopie bei der Analyse ätherischer Öle

Bruhn, Holzminden; Speichern und Wiederfinden von Referenz Massenspektren mit Hilfe Konventioneller EDV-Programme

Kugler, Essen; Quantitative Analyse ätherischer Öle

Pause

von Schantz, Helsinki; Carbon-Skeleton Chromatographie

Ziegler, Aufsess; Prüfung über Trennfähigkeit und Zersetzungen bei der GC-MS Analyse

Diskussion; Einsatzmöglichkeiten der verschiedenen chromatographischen und spektrometrischen Verfahren bei der Analyse ätherischer Öle

Nachmittag

ab 14.30 Möglichkeit zum genaueren Kennenlernen der GC-MS-Kopplung mit angeschlossenen Datensystem

*Tagungsort: Institut für Botanik und Pharmazeutische Biologie
der Universität Würzburg, Mittlerer Dallenbergweg 64
(Tel. 0931/ 7 30 85), großer Kursraum*

*Tagungsbüro: am Donnerstag, den 2.9.1976 von 19.00 in der Dallenberg
Gaststätte
am Freitag, den 3.9.1976 von 8.30 an in der Eingangshalle
zum Kursraum im Institut für Botanik und
Pharmazeutische Biologie*

Während der Tagung besteht Möglichkeit zur Einnahme eines Mittagessens in der benachbarten Dallenberg-Gaststätte. Voranmeldung in der jeweiligen Vormittagspause.

ARBEITSTAGUNG: VORKOMMEN UND ANALYTIK ÄTHERISCHER ÖLE

3. und 4.9.1976 in Würzburg

Teilnehmerliste

Abou-Mandour, A. Dr.	Lehrstuhl für Pharmazeutische Biologie Mittlerer Dallenbergweg 64, D-8700 Würzburg
Baerheim Svendsen, A., Prof. Dr.	Lab. Farmacognosie Gorleuslaboratorium, Wassenaarsweg 76, Leiden / Niederlande
Bos, R., Dr.	Lab. voor Farmacognosie, Ant. Deusinglaan 2, Groningen / Niederlande
Brandauer, H., Dr.	Aromachemie, D-8551 Aufsess
Brieskorn, C.H., Prof. Dr.	Institut für Pharmazie und Lebensmittelchemie, Am Hubland, D-8700 Würzburg
Bruhn, W., Dr.	Dragoco, D-345 Holzminden
Czygan, F.-C., Prof. Dr.	Lehrst. f. Pharmazeutische Biologie, Mittlerer Dallenbergweg 64, D-8700 Würzburg
Formaček, V., Dr.	Bruker-Physik AG, Am Silberstreifen, D-855 Rheinstetten-Forchheim
Franz, Ch., Dr.	Lehrstuhl für Gemüsebau der TU München, D-8050 Freising-Weißenstephan
Grüb, H., Dr.	Haarmann & Reimer, D-345 Holzminden
Grünsfelder, M., Dr.	Lehrstuhl f. Pharmazeutische Biologie, Mittlerer Dallenbergweg 64, D-8700 Würzburg
Günther, H.O., Dr.	Landesuntersuchungsamt für das Gesundheits- wesen Fachbereich Chemie, Annastraße 16, D-8900 Augsburg
Hammerschmidt, Dr.	Dragoco, D-345 Holzminden
Hartmann, M., Leb.Chem. Ing. grad.	Institut für Pharmazie und Lebensmittelchemie, Am Hubland, D-8700 Würzburg
Hefendehl, F.W., Prof. Dr.	Institut für Pharmazeutische Biologie, Schänzlestraße 9, D-7800 Freiburg/Brsg.
Heinrich, G., Prof. Dr.	Institut für Allgemeine Botanik, Jungiusstraße 6-8, D-2000 Hamburg 36
Hendriks, H., Dr.	Lab. voor Farmacognosie, Ant. Deusinglaan 2 Groningen / Niederlande
Hörster, H., Dr.	Institut für Pharmazeutische Biologie, Hittorfstraße 56, D-4400 Münster/Westf.
Huhtikangas, Dr.	Pharmazeutisches Institut, Fabianinkatu 35 Helsinki 17 / Finnland
Kubeczka, K.-H., Prof. Dr.	Lehrstuhl f. Pharmazeutische Biologie, Mittlerer Dallenbergweg 64, D-8700 Würzburg

Kugler, E., Dr.	Coca-Cola GmbH, Kaninenbergstraße 66 D-4300 Essen
Kutzki, R., Leb.Chem.,	Institut für Pharmazie und Lebensmittelchemie, Am Hubland, D-8700 Würzburg
Liersch, R., Dr.	Botanisches Institut, Schloßgarten 4, D-8520 Erlangen
Masselink, R.,	Finnigan GmbH, Am Steinacker 12, D-4040 Neuss 21-Allerheiligen
von Massow, F., Dr.	Botanisches Institut 1, Kaiserstraße 2, D-7500 Karlsruhe
Nagell, A., Dr.	Pharmazeutische Fabrik, Birkenweg, Postfach 900726, D-6000 Frankfurt/M. 90
Niebergall, H., Prof. Dr.	Institut für Pharmazie und Lebensmittelchemie, Am Hubland, D-8700 Würzburg
Obermann, Dr.	Dragoco, D-345 Holzminden
Pfab, I., Dipl.Biol.,	Institut für Allgemeine Botanik, Jungiusstraße 6-8, D-2000 Hamburg 36
von Schantz, M., Prof. Dr.	Pharmazeutisches Institut, Fabianinkatu 35, Helsinki 17 / Finnland
Schier, W., Dr.	Lehrstuhl f. Pharmazeutische Biologie Mittlerer Dallenbergweg 64, D-8700 Würzburg
Schomburg, G., Dr.	MPI für Kohleforschung, Postfach 01 13 25, D-4330 Mülheim/Ruhr
Schröder, F.-J., Dipl. Ing.	Lehrstuhl für Gemüsebau der TU München, D-8050 Freising-Weißenstephan
Schultze, W., Dipl. Biol.	Lehrstuhl f. Pharmazeutische Biologie, Mittlerer Dallenbergweg 64, D-8700 Würzburg
Schwanbeck, J., Dipl. Biol.	Lehrstuhl f. Pharmazeutische Biologie, Mittlerer Dallenbergweg 64, D-8700 Würzburg
Sprecher, E., Prof. Dr.	Lehrstuhl für Pharmakognosie, Bundesstraße 43, D-2000 Hamburg 13
Stahl, E., Dr.	Lehrstuhl für Pharmakognosie, Bundesstraße 43, D-2000 Hamburg 13
Tattje, D.H.E., Dr.	Lab. voor Farmacognosie, Ant. Deusinglaan 2, Groningen, / Niederlande
Thiele, K.D., Dr.	Lehrstuhl f. Pharmazeutische Biologie, Mittlerer Dallenbergweg 64, D-8700 Würzburg
Ullmann, I., Dr.	Lehrstuhl f. Botanik II, Mittlerer Dallen- bergweg 64, D-8700 Würzburg
Vostrowsky, Dr.	Organisch-Chemisches Institut, D-8520 Erlangen
Ziegler, E.	Aromachemie, D- 8551 Aufsess

INTERNATIONALE ARBEITSTAGUNG

VORKOMMEN UND ANALYTIK

ÄTHERISCHER ÖLE

Würzburg

3. und 4. September 1976

Kurzreferate

der Diskussionsvorträge

**"Das Speichern und Wiederfinden von Referenzmassenspektren
mit konventionellen EDV-Programmen"**

W. Bruhn

Dragoco, D-345 Holzminden

Es wird über den Aufbau einer eigenen Spektrendatei berichtet, die sich seit Jahren in der Praxis aus folgenden Gründen bewährt hat:

1. sie ist auf den speziellen Problembereich des Benutzers zugeschnitten
2. ein 8-intensivste Peaks-Atlas wird nur benutzt, um das originalReferenzspektrum rasch aufzufinden
3. das Drucken und "up-daten" der Listen erfolgt mit konventionellen EDV-Sortierprogrammen und erfordert wenig Rechenzeit
4. die Folge davon sind geringe Kosten und geringer Personalbedarf
5. sie schließt die Lücke zwischen den käuflichen Spektrensammlungen und dem Bedarf des Benutzers
6. sie erspart weitgehend ein on-line-Datensystem am Massenspektrometer.

Einzelheiten werden mitgeteilt und zur Diskussion gestellt.

**Einsatzmöglichkeiten der Kohlenstoff-13-Kernresonanz-
Spektroskopie bei der Analyse ätherischer Öle.**

V. Formaček

Bruker - Physik AG, Rheinstetten - Forchheim

Nach einer kurzen Einführung in die Grundlagen der Protonen- und Kohlenstoff-13-Kernresonanz-Spektroskopie ($^1\text{H-NMR}$; $^{13}\text{C-NMR}$) wird ein Überblick über die verschiedenen Aufnahmetechniken gegeben. Dabei werden die Frequenzsweep- oder Continuous-Wave-Methode (CW) der Impuls-Fourier-Transform-Methode (FT) gegenübergestellt und die unterschiedlichen Techniken der Protonenentkopplung wie "Broad Band Decoupling" (BB), "Off-Resonance" (OR) und "Gated Decoupling" (GD) erläutert. An Hand verschiedener Beispiele werden die Empfindlichkeit und die Grenzen der modernen FT-NMR-Spektroskopie aufgezeigt.

Im zweiten Teil wird auf die speziellen Probleme der ätherischen Ölanalytik eingegangen. Dabei werden sowohl die Spektren einzelner Ölkomponenten als auch Aufnahmen von Stoffgemischen und Gesamtölen eingehend diskutiert.

Auf Möglichkeiten des Einsatzes der $^{13}\text{C-NMR}$ -Spektroskopie bei der Aufklärung von Biosynthesewegen wird abschließend hingewiesen.

Feinstruktur ätherisches Öl erzeugender Drüsenzellen in höheren Pflanzen

G. Heinrich

Institut für Allgemeine Botanik der Universität, D-2000 Hamburg 36

Mit Hilfe elektronenoptischer Untersuchungen und parallel durchgeführter Markierungsexperimente wird der Versuch unternommen zu klären, welche Stoffe in eine pflanzliche Drüsenzelle eintreten, welche Stoffwechselprozesse sich in der Drüsenzelle an welchen Strukturen abspielen und welches Schicksal bereits ausgeschiedene flüchtige Stoffwechselprodukte in der Drüse erleiden. Dabei zeigte sich, daß offensichtlich unterschiedliche Mechanismen der ätherischen Ölbildung existieren und zwischen der Terpenakkumulation in mesophyllären und epidermalen Drüsenzellen zu unterscheiden ist. noch einem anderen Typus gehört die Ausscheidung von Methylketonen in Rutaceen an. Während bei der Terpenbildung in Drüsenzellen des Mesophylls ätherisches Öl häufig in Plastiden zu finden ist, trifft dies nicht für die epidermalen, terpenerzeugenden Drüsenzellen zu.

Schließlich deuten zu den elektronenoptischen Untersuchungen parallel durchgeführte chromatographische Analysen darauf hin, daß auch verschiedentlich unterschiedliche Bildungsorte für Mono- und Sesquiterpene in einunddemselben Pflanzenorgan zu postulieren sind. In den untersuchten Objekten deuten die Befunde darauf hin, daß Monoterpene plastidären Ursprungs sind, während die Sesquiterpene im Cytoplasma gebildet werden. Eine Beteiligung der Dictyosomen an der ätherischen Ölbildung ist dagegen im Gegensatz zur verbreiteten Lehrmeinung auszuschließen. Man könnte demnach von einem "Grundplasmotyp" und einem "Plastidentyp" der Terpenentstehung sprechen.

Monoterpenglykoside und ihre Bedeutung für die Akkumulation und Biosynthese terpenoider Ölbildner

H. Hörster,

Institut für Pharmazeutische Biologie
der Universität Münster/Westf.

Der Vortrag hat zum Ziel, durch geeignete Zusammenstellung der bisher erschienenen Literatur zum erwähnten Thema den "Einstieg" in die Arbeiten mit Terpenglykosiden zu erleichtern. So werden zunächst ältere, technologische Arbeiten erwähnt, die erste Hinweise auf hydrophile, nicht flüchtige Monoterpenoide geben. Aus einer Reihe pflanzenphysiologischer und biochemischer Arbeiten zeichnet sich ab, daß Monoterpenoide in der Pflanze transportiert werden müssen, sei es, um an speziell ausdifferenzierten Orten akkumuliert zu werden, sei es, um sie an Orten der Remetabolisierung zuzuführen. MT-Glykoside bieten sich als Transportform an. Es wird die Frage diskutiert, inwieweit Ölbildung an Akkumulationsorte gebunden ist. Neben einer Arbeit aus der Banthorpe-Gruppe werden erste Ergebnisse aus unserem Arbeitskreis zu diesem Aspekt vorgetragen. MT-Glykoside sind als hydrophile Akkumulationsform der Ölbildner denkbar. Ausführlicher werden Arbeiten zweier englischer Arbeitskreise, Francis und Banthorpe, besprochen, aus denen die Bedeutung der MT-Glykoside für die Biosynthese der Ölbildner hervorgeht. Zum Schluß werden die wichtigsten publizierten Glykosidsyntheseverfahren erwähnt und die Erfahrungen, die unser Arbeitskreis bei der Glykosidsynthese gesammelt hat, mitgeteilt.

QUANTITATIVE ANALYSE ÄTHERISCHER ÖLE

E. Kugler

COCA-COLA GmbH, Essen

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, die Nützlichkeit der Bildung von Mittelwerten aus mehrfach wiederholten gas-chromatographischen Analysen zu bestimmen.

Hierbei sollte die Reproduzierbarkeit der Werte überprüft und die Genauigkeit sowohl der Retentions-Indexbestimmung als auch der Flächenpro-zente erhöht werden. Außerdem war unser Ziel, einen optimalen Kompromiß zwischen Zeitaufwand pro Analyse und Reproduzierbarkeit zu finden.

Alle Berechnungen werden mittels eines Off-line-computer-systems, bestehend aus Integrator und Teletype mit Lochstreifenausgabe, durchgeführt. Die Standardabweichung und die Intervallgrenzen jedes Wertes werden für die 95 % Wahrscheinlich-keit ausgerechnet. Ausreißerwerte werden mit Hilfe des t-Testes eliminiert.

EINSATZ VON KLEINRECHNER IN MASSENSPEKTROMETERSYSTEME

R. Masselink

Finnigan GmbH, D-4040 Neuss

Eine ganze Reihe von Gründen hat dazu geführt, in den letzten Jahren immer mehr Massenspektrometersysteme mit Kleincomputern auszurüsten.

Einer der Gründe ist allein die Menge der Daten, die z.B. ein GC-MS System hervorbringt, die den Einsatz eines Computer nahezu unumgänglich zu machen scheint.

Weit mehr ist es die Qualität der Datenanalyse, die den Computer so wertvoll macht.

Verfahren wie Massenchromatographie, Massenfragmentographie, Präzisionsmessungen von Isotopenverhältnissen, Backgroundsubtraktionen, usw. werden durch den Einsatz von Computer erst ermöglicht.

"Gaschromatographische Analyse komplizierter Stoffgemische"

Gerhard Schomburg

Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, 4330 Mülheim a.d. Ruhr

Die qualitative und quantitative gaschromatographische Analyse von komplizierten Gemischen wie sie insbesondere in der Naturstoffchemie vorkommen, erfordert je nach Fragestellung die Anwendung neuer Methoden und Techniken, die die klassische Gaschromatographie in ein Hochleistungsverfahren verwandeln. Komplizierte Gemische haben einen großen Bereich der chromatographischen Flüchtigkeit oder einen extremen Bereich der Konzentrationen der Komponenten; sie enthalten außerdem nebeneinander Vertreter von Substanzklassen die stark verschiedener Polarität und entsprechend verschiedenen chromatographischen Eigenschaften. Die Zahl der vorhandenen Komponenten ist häufig groß. Trotz hoher Trennleistung und optimaler Polarität der verwendeten Säulen kommen dann zahlreiche Peaküberlappungen in verschiedenen Bereichen der Chromatogramme vor, die durch das Auftreten von schwierig trennbaren Isomerguppen noch verschärft werden. Für die chromatographischen Analysen störend sind außerdem sehr schwer oder gar nicht flüchtige Komponenten (Hochtemperatur-GC) und solche die durch thermische oder katalytische Zersetzung im chromatographischen System durch das Auftreten von Artefakten nicht repräsentative Chromatogramme liefern. Das häufig gemeinsame Auftreten solcher Komplikationen und die Auswirkung auf die Qualität der chromatographischen Analysen, bezüglich Auflösung wichtiger Komponenten und Geschwindigkeit, wird an einigen Beispielen erläutert.

Maßnahmen der klassischen Probenvorbereitung insbesondere durch Destillation, Extraktion, Säulenflüssigkeitschromatographie, Subtraktion und Derivatisierung können helfen die negativen Auswirkungen eines Teils

der aufgeführten Schwierigkeiten zu mildern. Die Fortschritte in der Leistungsfähigkeit gaschromatographischer Analytik, die sich durch die zunehmende Anwendung hochauflösender Kapillarsäulen zeigen, haben Trennung komplexer Gemische, sowie die Auffindung und Identifizierung der wichtigen Spezies weiter verbessert und auch die Ausführung solcher Analysen beschleunigt.

Weitere Fortschritte konnten gemacht werden durch apparative Entwicklung der mehrdimensionalen Gaschromatographie mit Kapillarsäulen in geschlossenen Systemen unter Verwendung des intermediären trappings. Dazu sind ventillose Säulenschaltungen wie sie von Deans in die Chromatographie eingeführt wurden, von zentraler Bedeutung.

Die Prinzipien der ventillosen Strömungsschaltungen sind auch von großer Bedeutung für die Probenaufgabe, die Kopplung von Reaktoren, Detektoren und Massenspektrometern mit gaschromatographischen Systemen. Verschiedenartige mehrdimensionale Systeme dieser Art werden beschrieben, in denen gepackte und Kapillarsäulen oder auch zwei Kapillarsäulen ventillos miteinander gekoppelt sind. Die Anwendungsmöglichkeiten und die Leistungsfähigkeit solcher Systeme wird durch das trapping vor, zwischen und hinter den Säulen in verschiedener Hinsicht erheblich erweitert bzw. gesteigert. (Anreicherung von Spuren Verbesserung der Trennleistung bzw. der Auflösung bei überlappten Peaks). Sie werden an Beispielen verschiedenster Art aus der Analytik komplizierter Gemische der oben beschriebenen Art demonstriert.

Gaschromatographische und massenspektrometrische Untersuchungen
von ätherischen Ölen

M. von Schantz

Lehrstuhl für Pharmakognosie der Universität Helsinki / Finnland

In dem Vortrag wird eine Übersicht über die Methodik gegeben, die bei Untersuchungen von ätherischen ölführenden Pflanzen am Institut für Pharmakognosie der Universität Helsinki benutzt wird. Besondere Rücksicht wird auf die Unterschiede der Ölzusammensetzung bei den verschiedenen Chemotypen von *Chrysanthemum vulgare* L. genommen. Besonders bei Kreuzung der Chemotypen entstehen Abkömmlinge, deren Ölzusammensetzung mit äußerster Genauigkeit analysiert werden muß, um die genetischen Zusammenhänge beleuchten zu können. Dabei reicht nicht nur eine Identifizierung der einzelnen Komponenten durch Zumischung von Vergleichsstoffen, sondern die Peaks müssen genauer durch spektroskopische Methoden identifiziert werden. Auch bei Untersuchungen von anderen ölführenden Pflanzen, ist die Verwendung der Massenspektrometrie, UV-, IR- und NMR-Spektroskopie nötig, wenn Strukturen unbekannter Komponenten ermittelt werden müssen.

Carbon-Skeleton Chromatographie

M. von Schantz

Lehrstuhl für Pharmakognosie der Universität Helsinki / Finnland

In dem Vortrag wird besonders die s.g. Beroza-Methode behandelt, mit der sich das Kohlenstoffgerüst einer Verbindung ermitteln läßt. Die Hydrierung von Doppelbindungen wird in einer Mikro-Säule durchgeführt, die direkt an eine GC- MS-Kopplung angeschlossen ist. Dabei erhält man ein Gaschromatogramm und Massenspektren jedes einzelnen Peaks der Hydrierungsprodukte. Durch verschiedene Katalysatoren und Katalysatormengen sowie unterschiedliche Arbeitstechniken können z.T. recht unterschiedliche Reaktionsprodukte erhalten werden.

FLÜCHTIGE STOFFWECHSELPRODUKTE AUS MIKROORGANISMEN

Ewald Sprecher

Lehrstuhl für Pharmakognosie der Universität Hamburg

Basierend auf der umfangreichen Übersicht von LASKIN u. LECHEVALIER (M i s r e b i a l P r e d u c t s) aus dem Jahre 1973 werden die wichtigsten Gruppen der flüchtigen Stoffwechselprodukte aus Bakterien, Algen und Pilzen besprochen:

- 1.) Aliphatische Kohlenwasserstoffe, Ester, Aldehyde, Ketone und Alkohole,
- 2.) Nichtaromatische cyclische Verbindungen, ausgenommen Terpene,
- 3.) Polyine,
- 4.) Monoterpene,
- 5.) Sesquiterpene,
- 6.) Aromatische Verbindungen aus dem Polyacetat- und dem Shikimatweg,

dabei werden auch weniger typische Komponenten "ätherischer Öle", wie verschiedene aliphatische Carbonsäuren, Laktone und andere nur wenig flüchtige Verbindungen kurz mit einbezogen.

Ausgehend von den 1973 bekannten Verbindungen werden dabei an einigen Beispielen die interessantesten der damals bekannten und der inzwischen zusätzlich identifizierten Stoffwechselprodukte behandelt.

Es wird darüber hinaus versucht, einige Gründe und Voraussetzungen für die Produktion dieser Verbindungen anzugeben, ihre Bedeutung und ihr möglicher Selektionsvorteil für Mikroorganismen zu diskutieren sowie Gründe für gewisse Unterschiede zwischen flüchtigen Stoffen aus Mikroorganismen und aus höheren Pflanzen aufzuzeigen.

Schließlich werden flüchtige Verbindungen in ihrer Rolle als inter- und intraspezifische Kommunikationsmittel bei allen Organismen besprochen.

Prüfung der GC - MS Apparatur

Ziegler, E., Aromachemie, D-8551 Aufsess

Ziel

bisher

Prüfung jetzt

- 1.) Effektivität der Apparatur
→ Optimierung der Trennung
- 2.) Zersetzen und Umlagerungen darin
- 3.) Vergleich mit anderen App. + Säulen

Anzahl theor. Böden n, Trennstufenhöhe, Trennzahl nach Kaiser

Wenig veröffentlicht (Grob)

Vergleich kaum möglich, Abschätzung des Aufwandes unmöglich

mit T_z nach Kaiser, n - Alkane

empfindlichster polarer Stoff z. B. Citral (Neral + Geranial) ergibt Zersetzungs %, dazu Polaritätszahl

durch T_z , Zers. % + Polaritätszahl ergibt sich

- a) Vergleich mit anderen App.
- b) " " " Säulen
- c) Abschätzung der nötigen Säulenlänge + Art
- d) Optimierung aller Parameter: Gase, Elektronik etc.
- e) Übertragung von GC auf GC - MS schneller Vergleich, da isotherm (Kartei)

in Minuten!