

## OBJECTIVES

Das Ziel bestand darin, die Abbauprodukte des Chlorophylls einer direkten massenspektrometrischen Analyse zu unterziehen. Im Rahmen dessen wurden diverse Meilensteine gesetzt:

1. MS-Leafspray als Analysemethode
2. Identifikation von Chl-Kataboliten
3. Synthese eines Anhydrids
4. Erstellen von Fragmentierungsdiagrammen
5. Verbesserung der Möglichkeiten der Strukturaufklärung

## MATERIALS & METHODS

Folgende Geräte wurden für die spektroskopischen und spektrometrischen Untersuchungen verwendet:

- Thermo LCQ DecaXP
- Thermo LTQ Orbitrap XL
- Shimadzu HPLC system
- Online UV/Vis Detektor

Das Probenmaterial wurde täglich im Garten meiner Oma gesammelt. Es handelte sich hierbei um bereits seneszente Brokkoliblätter.

Die Analyse mit MS-Leafspray erforderte die Entwicklung einer besonderen Blatt-Vorbereitungsmethode:

- zuschneiden des Blattes und Filterpapier
- herstellen eines Päckchens
- einrichten des Päckchens vor dem Massenspektrometer
- optimieren des Signals
- Messen und Analyse

## REFERENCES

- [1] He Wang, Jiangjiang Liu, R. Graham Cooks, Zheng Ouyang, and Zoltan. Paper spray for direct analysis of complex mixtures using mass spectrometry. 49:877–880, 2010.

## INTRODUCTION

Die alljährliche Laubfärbung ist eines der sichtbarsten Zeichen von Leben und damit auch aus dem All beobachtbar. Bei diesem Prozess wird der grüne Blattfarbstoff (= Chlorophyll) abgebaut. In der vorliegenden Arbeit galt es, diese Abbauprodukte mithilfe eines Massenspektrometers zu untersuchen.

Dabei wurde besonderes Augenmerk auf die Verbesserung massenspektrometrischer Methoden gelegt, indem das Verhalten von Chl-Kataboliten des Brokkoliblattes im Massenspektrometer genauer untersucht wurde.

## RESULTS I

Im Folgenden werden alle mit den aufgelisteten Gerätschaften identifizierten Chl-Kataboliten aufgelistet.

Chl-Katabolit	Summenformel	[M+H] <sup>+</sup>
Bo-DYCC	C <sub>33</sub> H <sub>37</sub> O <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	617.26
Bo-DNCC	C <sub>33</sub> H <sub>39</sub> O <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	619.28
Bo-YCC	C <sub>34</sub> H <sub>37</sub> O <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	645.26
Bo-NCC-3	C <sub>34</sub> H <sub>39</sub> O <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	647.27
Bo-DNCC-2	C <sub>39</sub> H <sub>47</sub> O <sub>13</sub> N <sub>4</sub>	779.32
Bo-NCC-1	C <sub>40</sub> H <sub>49</sub> O <sub>13</sub> N <sub>4</sub>	793.33

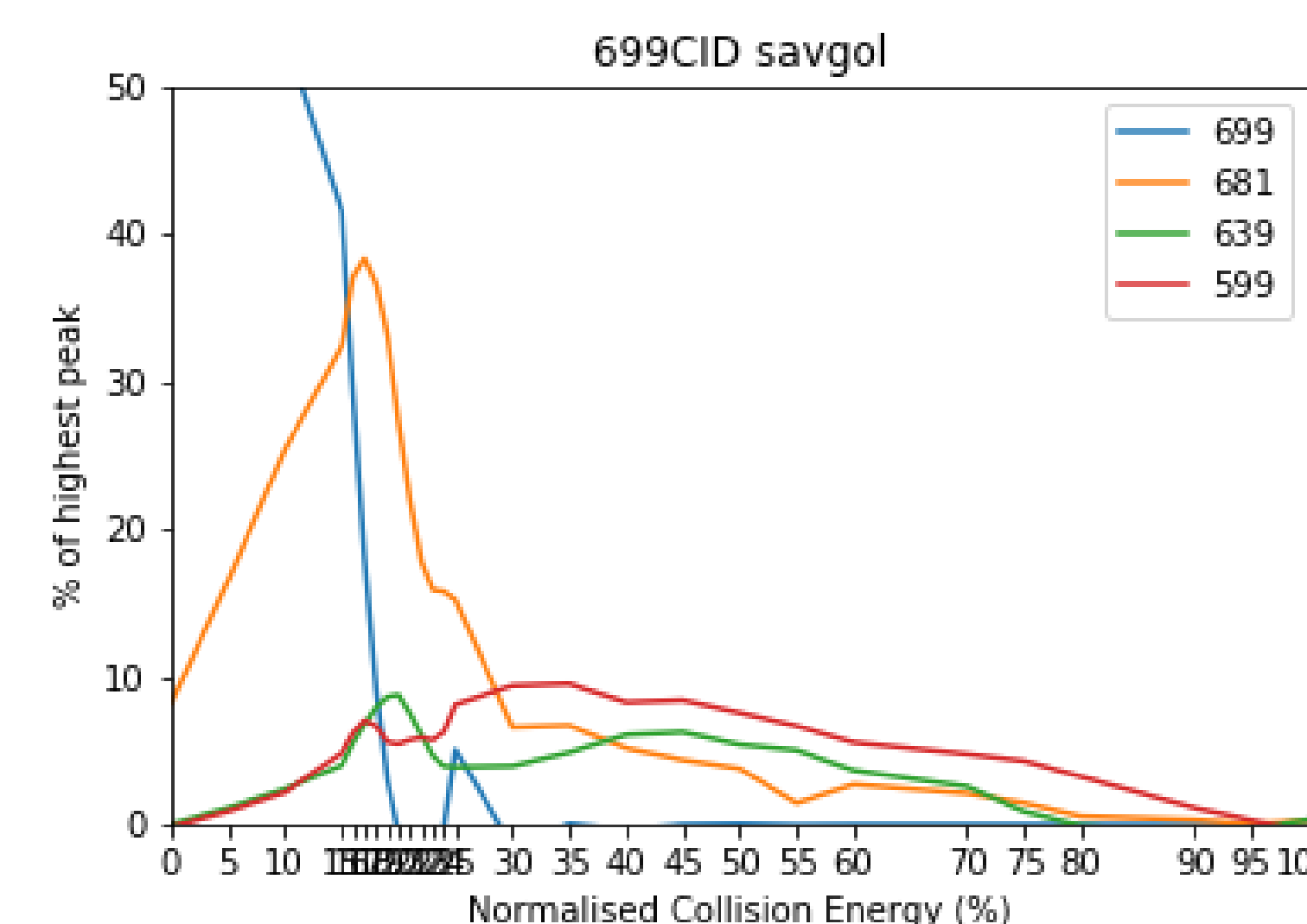
**Tabelle 1:** Chl-Kataboliten mit Summenformel und Molekülmasse

Zusätzlich zu diesen Chl-Kataboliten konnten deren Reaktionsprodukte nach einer Reaktion mit Essigsäureanhydrid nachgewiesen werden. Es handelt sich hierbei um Anhydride, wobei die Bindungsstellen dieser Rückschlüsse auf die Reaktivitäten von Carbonsäuren der Chl-Kataboliten zulassen.

## FUTURE RESEARCH

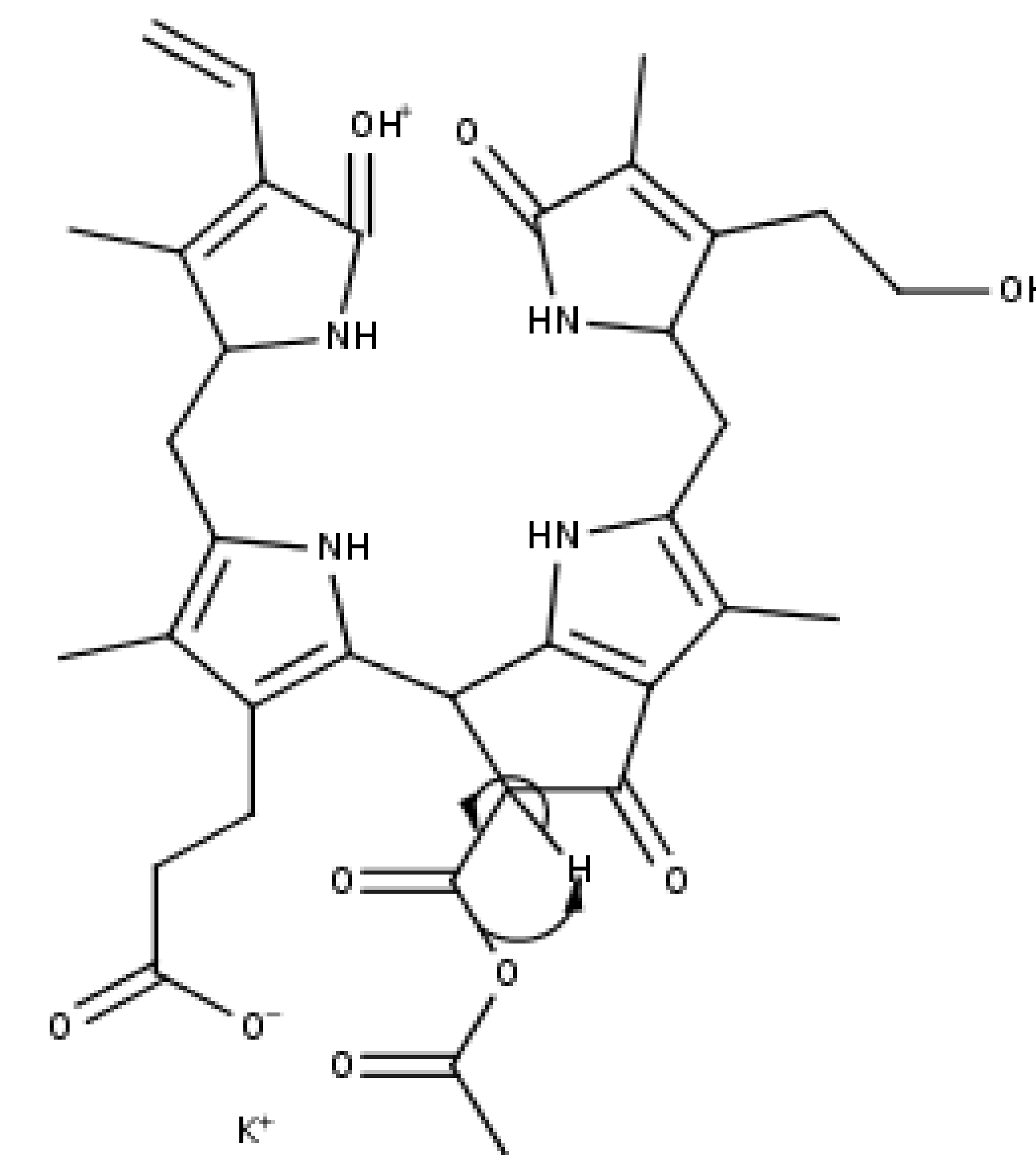
Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit Grundlagenforschung im Bereich der Strukturaufklärung. Besonders die Verfolgung der Idee der Fragmentierungsdiagramme eignet sich für weite-

## RESULTS II - FRAGMENTIERUNGSDIAGRAMME



**Abbildung 1:** Fragmentierungsdiagramm Reaktionsprodukt des Bo-DNCC, m/z = 699 [M+H]<sup>+</sup>

In Abbildung 2 wird ein Strukturvorschlag für das Reaktionsprodukt des Bo-DNCC gemacht. Zu beachten ist das Anhydrid, das über eine Abspaltung von 60 Da identifiziert werden konnte. Ein Mechanismus für diese Abspaltung wird ebenfalls vorgeschlagen, indem durch Pfeile die Bewegung der Elektronen gekennzeichnet wird.



**Abbildung 2:** Figure caption

## CONCLUSION

Im Rahmen der experimentellen Untersuchungen konnte der Großteil der Forschungsfragen behandelt werden. Mit MS-Leafspray wurde ei-

ne moderne Analyseverfahren verwendet, die eine schnelle Identifikation der Chl-Kataboliten erlaubte. Forschungspotential noch vorhanden!

## CONTACT INFORMATION

**Web** [github.com/Proglui/vwaFloKlui/](https://github.com/Proglui/vwaFloKlui/)  
**Email** [florian.kluibenschedl@live.de](mailto:florian.kluibenschedl@live.de)  
**Phone** +43 699 16056980

re Forschungen, wobei diese noch verifiziert werden müssten. Auch MS-Leafspray eignet sich für die Weiterentwicklung schneller und effizienter Analysen.