

# DIREKTE ANALYSE VON CHLOROPHYLLKATABOLITEN

FLORIAN KLUIBENSCHEDL 8A, BRG Telfs - 2017/18

# **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

#### 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.

# 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

## RESULTS I

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

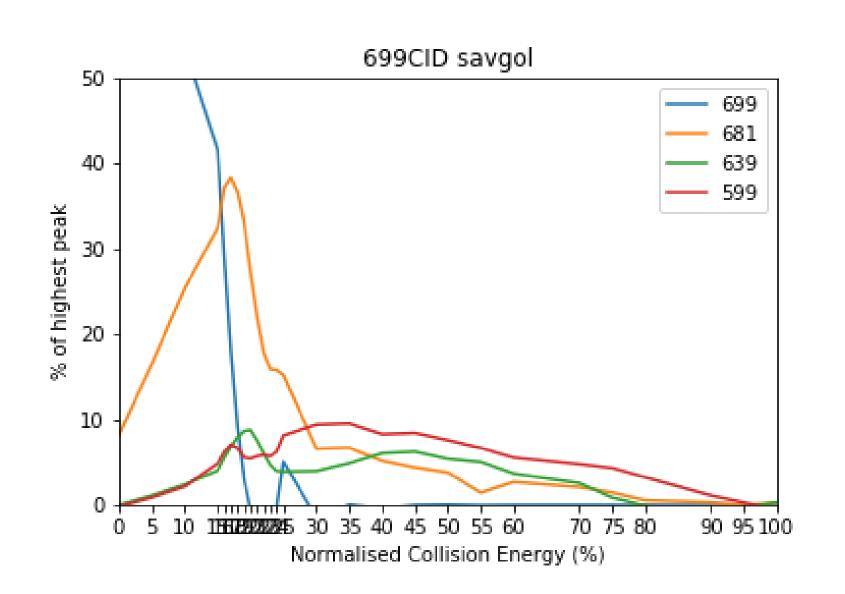
Chl-Katabolit	Summenformel	[M+H] <sup>+</sup>
Bo-DYCC	$C_{33}H_{37}O_8N_4$	617.26
<b>Bo-DNCC</b>	$C_{33}H_{39}O_8N_4$	619.28
Bo-YCC	$C_{34}H_{37}O_9N_4$	645.26
Bo-NCC-3	$C_{34}H_{39}O_9N_4$	647.27
<b>Bo-DNCC-2</b>	$C_{39}H_{47}O_{13}N_4$	779.32
Bo-NCC-1	$C_{40}H_{49}O_{13}N_4$	793.33

**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.

## RESULTS II - FRAGMENTIERUNGSDIAGRAMME



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

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.

Im Rahmen der massenspektrometrischen Untersuchungen wurden Fragmentierungsdiagramme der Chl-Kataboliten und deren Reaktionsprodukte erstellt. Dabei wurden die Verbindungen im Massenspektrometer mit unterschiedlichen Energien angeregt und die Intensitäten der auftretenden Fragmentierungen (=Abspaltungen) gemessen.

In Abbildung 1 ist das Fragmentierungsdiagramm des Reaktionsproduktes des *Bo-*DNCC dargestellt. Auf der Ordinate wird dabei die Anregungsenergie und auf der Abszisse die Intensitäten der Fragmente aufgetragen.

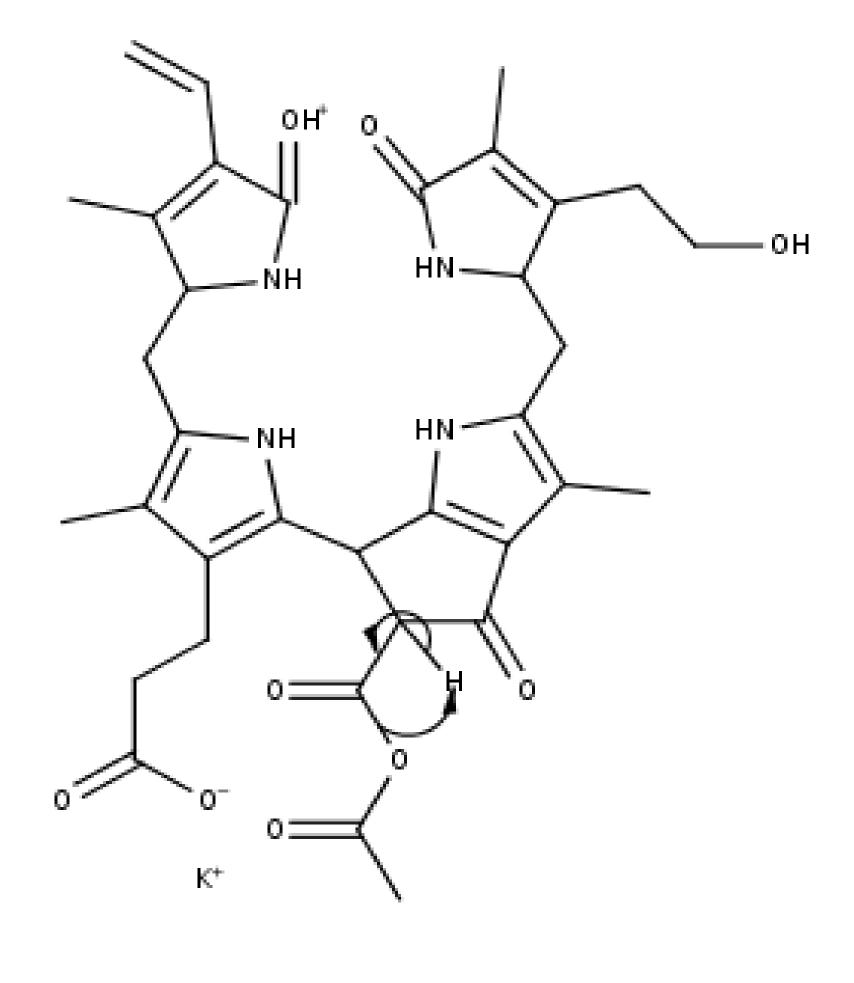


Abbildung 2: Figure caption

## CONCLUSION

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

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

#### REFERENCES

- [1] J. M. Smith and A. B. Jones. *Book Title*. Publisher, 7th edition, 2012.
- [2] A. B. Jones and J. M. Smith. Article Title. *Journal title*, 13(52):123–456, March 2013.

## FUTURE RESEARCH

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit Grundlagenforschung im Bereich der Strukturaufklärung. Besonders die Verfolgung der Idee der Fragmentierungsdiagramme eignet sich für weitere Forschungen, wobei diese noch verifiziert werden müssten. Auch MS-Leafspray eignet sich für die Weiterentwicklung schneller und effizienter Analysen.

## CONTACT INFORMATION

Web github.com/Progklui/vwaFloKlui/ Email florian.kluibenschedl@live.de Phone +43 699 16056980