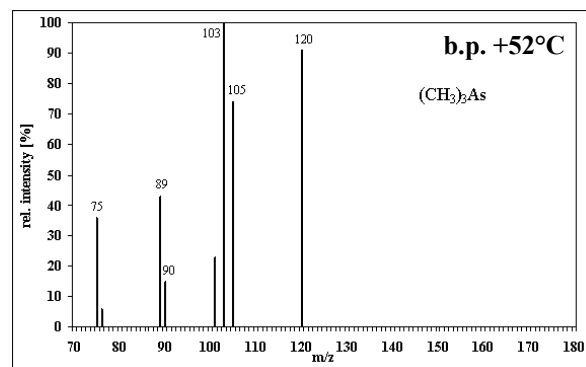
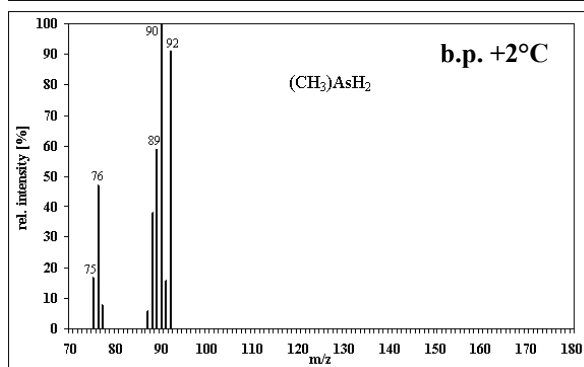
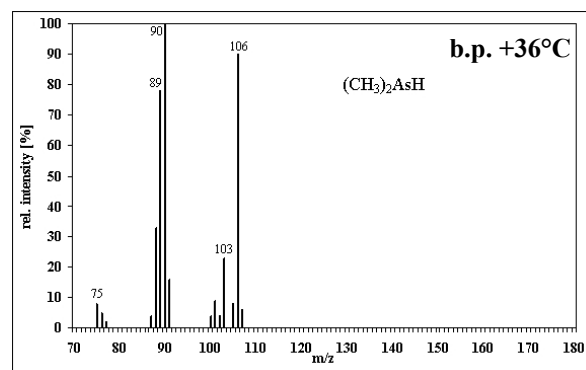
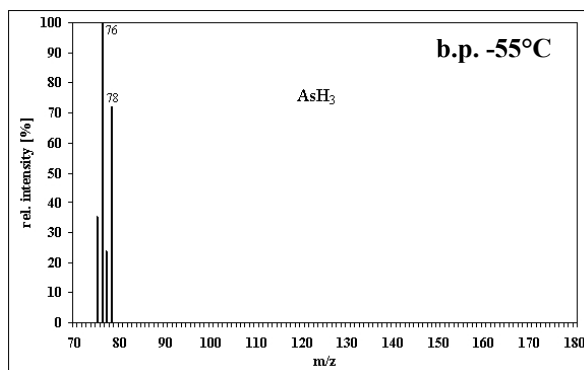


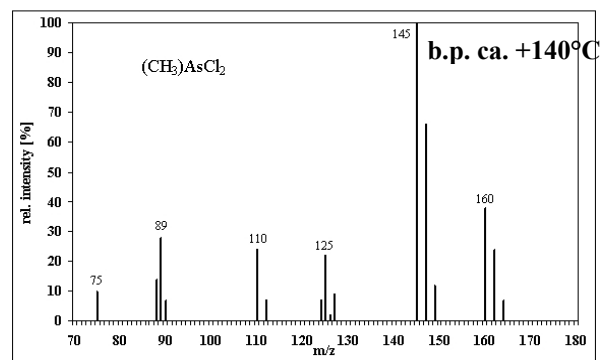
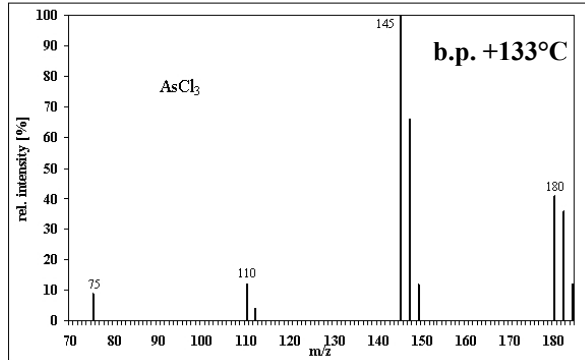
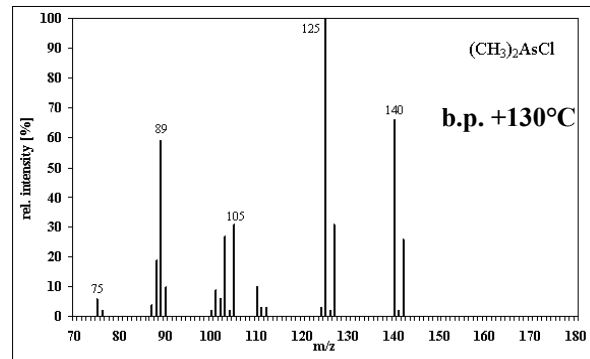
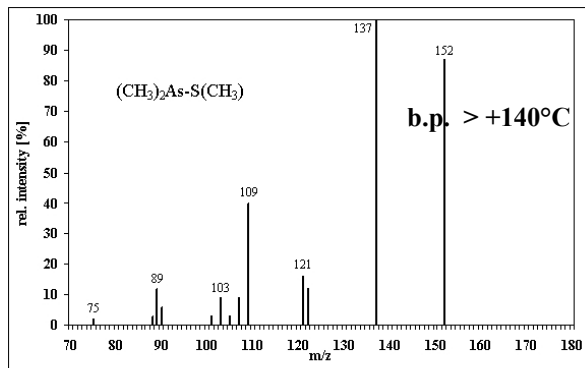
## Auswertung Gas-Chromatographie

Laden Sie sich das Freeware Programm „WSearch32“ zur Interpretation massenspektraler Daten von <http://www.wsearch.com.au> und starten Sie ohne weitere Installation „wsearch32.exe“.

Im zip file „Chromatogramme.zip“ finden Sie 6 verschiedene Chromatogramme (\*.ms). Laden Sie sich diese ebenfalls herunter und öffnen Sie sie in WSearch32. Es handelt sich hierbei um Analysen von Gasproben, die über heißen Quellen im Yellowstone National Park mittels SPME (solid phase micro extraction) – Technik gewonnen und nach Lagerung im Kühlschrank binnen 1-2 Tagen mittels GC-MS analysiert wurden (Säule: 30m lange HP 5 ms; ID = 0.25 mm; fd = 0.25  $\mu$ m; Desorption bei 250°C, Temperatur-Zeit-Programm: 40/3/10, 250/10; splitless 3 min, dann 1:20 Splitt; MZ 70-180). Targetsubstanzen waren seltene volatile Arsen-Verbindungen, deren Massenspektren nicht in Standard-Bibliotheken enthalten sind, aber vorab aus verschiedener Literatur zusammengetragen wurden (siehe Abbildung inkl. Siedepunkten (b.p. = boiling point)).

Neben den möglichen 8 Arsen-Targetsubstanzen sind in den Chromatogrammen natürlich noch zahlreiche weitere Substanzen zu finden, da die SPMEs (leider) nicht nur volatile Arsen-Spezies sorbieren. Diese anderen Substanzen sollen hier aber nicht interpretiert werden.





Klicken Sie mit der linken Maustaste an eine beliebige Stelle in das Chromatogramm, so öffnet sich ein zusätzliches Fenster mit dem zugehörigen Massenspektrum an dieser Stelle. Über die Pfeiltasten rechts / links kann man sich beliebig im Chromatogramm bewegen und erhält jeweils das Massenspektrum an dieser Stelle. Hält man die linke Maustaste gedrückt, kann man im Chromatogramm ein Zoom-Fenster aufziehen, um kleine Peaks besser ansehen zu können; Doppelklick rechte Maustaste führt zurück zum Vollbild.

Betrachten Sie auf diese Weise beide Chromatogramme und bestimmen Sie qualitativ, welche der 8 Arsen-Targetsubstanzen mit welchen Retentionszeiten auftreten. Kommentieren Sie kurz die Peakform (deutlicher, schmaler Peak...Peak langgezogen, flach...Doppelpeaks, etc.).

Vergleichen Sie die Retentionszeiten, zu denen bestimmte Verbindungen auftreten - was fällt auf?

Was könnte ein Grund dafür sein, daß bestimmte Verbindungen nicht in den Chromatogrammen gefunden werden können?

Über den Menüpunkt Chromatogramm / Auto bzw. Manual Integrate könnte man auch noch die Flächen der gefundenen Peaks integrieren und somit zu einer quantitativen Bestimmung gelangen. Da für die Targetsubstanzen allerdings bisher keine Standards existieren, konnte keine Kalibrierung durchgeführt werden. Daher bleibt die Betrachtung hier rein qualitativ.