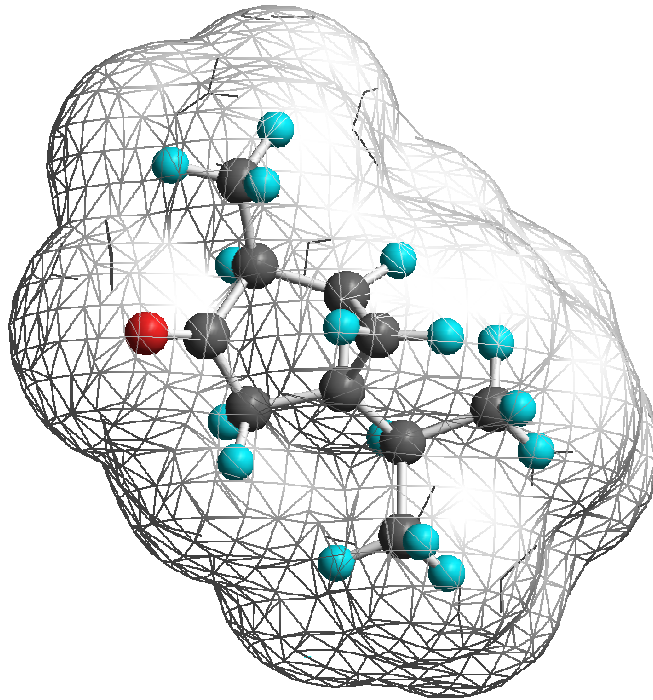


# Extraktion des Naturstoffes Thujon aus Wermutkraut, Thuja und Salbei mit anschließender NMR-spektroskopischer Struktur- und Isomerieaufklärung

Besondere Lernleistung



eingereicht von

Stefan Döge und Igor Kunze

Fachbereich: Chemie

Interner Betreuer:  
Frau Evelin Mietschke

Externer Betreuer:  
Prof. Dr. Stefan Berger  
Institut für Analytische Chemie  
Universität Leipzig

### **Bibliografische Beschreibung:**

Döge, Stefan und Kunze, Igor:

Extraktion des Naturstoffes Thujon aus Wermutkraut (*artemisia absinthium*), Thuja (*thuja occidentalis*) und Salbei (*salvia officinalis*) mittels Wasserdampfdestillation, Gaschromatografie, HPLC und Drehbandkolonnendestillation, sowie anschließende Struktur- und  $\alpha/\beta$ -Isomerieaufklärung mithilfe von 400 MHz und 700 MHz NMR-Spektrometern.

45 Seiten und 67 Seiten Anhang

# Inhaltsverzeichnis

1	Referat, Abstract, Abkürzungsverzeichnis	4
2	Vorwort	6
3	Die Stoffgruppe der Terpene	7
3.1	Thujon	8
4	Verwendete Pflanzen	10
4.1	Wermutkraut ( <i>artemisia absinthium</i> )	10
4.2	Thuja ( <i>thuja occidentalis</i> )	12
4.3	Salbei ( <i>salvia officinalis</i> )	13
5	Destillationsverfahren	14
5.1	Drehbandkolonnendestillation	14
5.2	Wasserdampfdestillation und Nachbearbeitung	15
6	NMR-Spektroskopie	18
6.1	Grundlagen der NMR-Spektroskopie	18
6.2	Grundlagen für die Spektrenauswertung	23
6.3	2D-Spektrenarten	25
7	Chromatografiemethoden	28
7.1	Dünnschichtchromatografie (DC)	28
7.2	Gaschromatografie (GC)	30
7.3	Hochleistungsflüssigkeitschromatografie (HPLC)	31
8	Extraktion des Thujons	33
9	NMR-Auswertung	34
9.1	Strukturaufklärung des $\alpha$ - und $\beta$ -Thujons	34
9.2	Isomerieaufklärung	39
10	Fazit	40
11	Quellenverzeichnis	41
12	Anlagenverzeichnis	43
13	Selbstständigkeitserklärung	44
14	Danksagung	45

# 1 Referat, Abstract, Abkürzungsverzeichnis

## Referat

Die Legalisierung der Spirituose Absinth wurde in den vergangenen Jahrzehnten kontrovers diskutiert. Absinth war in den meisten europäischen Ländern nach einem tragischen Vorfall in der Schweiz im Jahr 1905 verboten worden. Dem neurotoxischen Monoterpen-Keton Thujon, als psychoaktive Substanz in der Spirituose enthalten, wurden lange Zeit die negativen Wirkungen des Absinth auf Körper und Geist zugeschrieben. Diese Theorie konnte jedoch in neuen wissenschaftlichen Studien widerlegt werden. Trotzdem dachten wir uns, es sei ein interessanter Stoff für unsere Untersuchung. Deshalb wählten wir es als Thema für unser obligatorisches wissenschaftliches Projekt in der elften Klasse des Wilhelm-Ostwald-Gymnasiums Leipzig. Im Jahr 2007 bringen wir diese Arbeit als „Besondere Lernleistung“ in unser Abitur ein.

Thujon kommt nicht nur im Wermutkraut (*artemisia absinthium*), einem Bitterkraut aus der *Asteraceae* Familie und Hauptzutut im Absinth, vor.

Man kann es auch in *Cupressaceae*, wie zum Beispiel der *thuja occidentalis* (bekannter als Thujahecke) und in Salbei (*salvia officinalis*) aus der *Lamiaceae* Familie finden.

Unser Hauptziel war es Thujon aus diesen Pflanzen mittels Wasserdampfdestillation, Gaschromatografie und Hochleistungsflüssigkeitschromatografie zu extrahieren und anschließend seine Struktur mit NMR-Spektroskopie zu untersuchen.

Im Folgenden haben wir die experimentellen Ergebnisse und wissenschaftlichen Schlussfolgerungen dargelegt.

## Abstract

The legalization of the liquor absinthe has been controversially debated during the past decades. Absinthe was prohibited in most European countries following a tragic incident in Switzerland in 1905. The neurotoxic monoterpene-ketone thujone as a psycho-active substance in the liquor has been widely credited with the negative influence of absinthe on the human body and mind. This theory was disproven in recent scientific studies. However, we thought it was an interesting substance to investigate. Thus we chose it as the topic for our mandatory science

project in year 11 at Wilhelm Ostwald High School in Leipzig. In 2007 we will make this work part of our final Abitur grade.

Thujone cannot only be found in wormwood (*artemisia absinthium*), a bitter herb of the *asteraceae* family and a main ingredient in absinthe.

It is also found in *cupressaceae*, such as *thuja occidentalis*, and in sage (*salvia officinalis*) of the *lamiaceae* family.

Our main goal was to extract thujone from these plants by steam distillation, gas-chromatography, and high performance liquid chromatography, and to subsequently investigate its structure and isomers by nuclear magnetic resonance spectroscopy.

The following work is a detailed presentation of our experimental results and scientific reasoning.

### Abkürzungsverzeichnis

APT	<b>A</b> ttached <b>P</b> roton <b>T</b> est
BeLL	<b>B</b> esondere <b>L</b> ernleistung
C	Kohlenstoff
CAS	<b>C</b> hemical <b>A</b> bstracts <b>S</b> ervice
CDCl <sub>3</sub>	deutერიertes Chloroform (Trichlormethan)
CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	Dichlormethan (Methylenchlorid)
COSY	<b>C</b> orrelated <b>S</b> pectroscopy
HMBC	<b>H</b> eteronuclear <b>M</b> ultiple <b>B</b> ond <b>C</b> orrelation
HSQC	<b>H</b> eteronuclear <b>S</b> ingle <b>Q</b> uantum <b>C</b> oherence
NOESY	<b>N</b> uclear <b>O</b> verhauser <b>E</b> nhancement <b>S</b> pectroscopy
D	Deuterium
DC	<b>D</b> ünnschichtchromatografie
GC	<b>G</b> aschromatografie
H	Wasserstoff
HPLC	engl.: <b>h</b> igh <b>p</b> erformance <b>l</b> iquid <b>c</b> hromatography (dt.: Hochleistungsflüssigkeitschromatografie)
IUPAC	<b>I</b> nternational <b>U</b> nion of <b>P</b> ure and <b>A</b> ppled <b>C</b> hemistry (dt.: Internationale Union für reine und angewandte Chemie)
MHz	Megahertz
NMR	engl.: <b>n</b> uclear <b>m</b> agnetic <b>r</b> esonance (Kernmagnetresonanz)
ppm	<b>p</b> arts <b>p</b> er <b>m</b> illion (Millionstel)
T	Tritium
TMS	<b>T</b> etramethylsilan