

**Titel der Arbeit:**

Korrelation von Geruchswirksamkeit und chemischer Struktur in homologen Reihen unverzweigter und methylverzweigter Allylketone und Allylalkohole

**Übersetzter Titel:**

Structure / odour correlations in homologous series of unbranched and methyl-branched allylic ketones and allylic alcohols

**Autor:**

Böger, Daniel Sebastian

**Jahr:**

2008

**Dokumenttyp:**

Dissertation

**Institution:**

Fakultät für Chemie

**Betreuer:**

Schieberle, Peter (Prof. Dr.)

**Gutachter:**

Hofstetter, Alfons (Prof. Dr. Dr. h.c.)

**Sprache:**

de

**Fachgebiet:**

CHE Chemie

**Stichworte:**

Struktur, Wirkung, Geruchsschwelle, Allylalkohol, Allylketon, Aroma, Lebensmittel, Vorhersage

**Übersetzte Stichworte:**

structure, odour, correlation, threshold, allylic alcohol, allylic ketone, aroma, food, prediction

**Kurzfassung:**

Ligand / Proteinrezeptorwechselwirkungen werden als Mechanismus der Geruchswahrnehmung beim Menschen diskutiert. Unter anderem ist aber bisher offen, warum die Geruchsschwellen in Abhängigkeit von der chemischen Struktur zum Teil extreme Unterschiede aufweisen. Ausgehend von zwei Geruchstoffen, die häufig in Lebensmittelaromen vorkommen, dem

1-Octen-3-on (pilzartig) und dem (E)5-Methylhept-2-en-4-on (nussig, fruchtig), wurden strukturanaloge Allylalkohole und -ketone (C-5 bis C-12) synthetisiert und deren sensorische Eigenschaften ermittelt. Unter den 140 synthetisierten Verbindungen zeigten überraschenderweise lediglich 1-Octen- und 1-Nonen-3-on eine pilzartige Geruchsnote, zusätzlich waren die Geruchsschwellenwerte aller anderen Ketone deutlich höher. Unter Verwendung von Molecular Modelling-Techniken konnte auf der Basis der Daten eine Methode zur Voraussage von Geruchsschwellenwerten entwickelt werden.

**Übersetzte Kurzfassung:**

Ligand/protein-receptor interactions are currently discussed as the underlying mechanism of the human olfactory sense. Up to now it still remains unknown why in some cases odour thresholds show huge differences depending on the chemical structure. Starting from the two aroma compounds 1-octen-3-one (mushroom-like) and (E)5-methylhept-2-en-4-one (nuttilly, fruity), which occur frequently in food aroma, homologous series of allylic alcohols and allylic ketones (C-5 to C-12) were synthesized and their sensory properties determined. Of the resulting 140 aroma substances only 1-octen-3-one and 1-nonen-3-one possessed a mushroom-like aroma profile. Moreover, the odour thresholds of the remaining aroma substances were found to be significantly higher. An approach to predicting odour thresholds using molecular modelling techniques was developed on the basis of the determined properties.

**WWW:**

<http://mediatum.ub.tum.de/?id=652913>

**Abgegeben am:**

12.06.2008

**Mündliche Prüfung:**

05.09.2008

**Seiten:**

408

**Urn:**

<http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn:nbn:de:bvb:91-diss-20080609-652913-1-0>

**Letzte Änderung:**

03.12.2008

**Occurrences:**

- Elektronische Prüfungsarbeiten > Fakultät > Fakultät für Chemie
- Elektronische Prüfungsarbeiten > Fachgebiet > Chemie
- Einrichtungen > Fakultäten > Fakultät für Chemie > Prüfungsarbeiten > Dissertationen

**Entries:**