

Das Profil des ätherischen Öls der einheimischen Population von *Origanum vulgare* subsp. *vulgare* aus dem Gebirge Rtanj mittels chemometrischer Werkzeuge

Milica Acimovic¹, Lato Pezo², Stefan Ivanovic³, Katarina Simic³, Jovana Ljubic⁴

1 - Institut für Acker- und Gemüsebau Novi Sad - Nationales Institut der Republik Serbien, Maksima Gorkog 30, 21000 Novi Sad, Serbien

2 - Universität Belgrad, Institut für Allgemeine und Physikalische Chemie, Studentski trg 12, 11000 Belgrad, Serbien

3 - Universität Belgrad, Institut für Chemie, Technologie und Metallurgie - Nationales Institut der Republik Serbien, Njegoševa 12, 11000 Belgrad, Serbien

4 - Universität Belgrad, Fakultät für Chemie, Abteilung für organische Chemie, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrad, Serbien

ABSTRACT

Das Ziel dieser Arbeit war die Vorhersage der Retentionsindices von chemischen Verbindungen, die in dem ätherischen Öl der oberirdischen Pflanzenteile von *Origanum vulgare* subsp. *vulgare* gefunden wurden, das durch Hydrodestillation gewonnen und mittels GC-MS analysiert wurde. Insgesamt wurden 28 Verbindungen in dem ätherischen Öl nachgewiesen. Die Verbindungen mit der höchsten relativen Konzentration sind Germacrene D (21,5%), 1,8-Cineol (14,2%), Sabinen (14,0%) und trans-Caryophyllen (13,4%). Die Retentionszeiten wurden mit Hilfe der Quantitativen Struktur-Retentions-Beziehungen vorhergesagt, wobei sieben molekulare Deskriptoren verwendet wurden, die durch Faktorenanalyse und genetischen Algorithmus ausgewählt wurden. Die ausgewählten Deskriptoren sind untereinander unkorreliert und wurden zur Entwicklung eines künstlichen neuronalen Netzwerkmodells verwendet. Eine Gesamtzahl von 28 experimentell erhaltenen Retentionsindizes (log RI) wurde verwendet, um ein vorhersagendes Quantitatives Struktur-Retentions-Beziehungsmodell aufzustellen. Das Bestimmtheitsmaß für den Trainingszyklus betrug 0,998, was darauf hinweist, dass dieses Modell für die Vorhersage der Retentionsindices für ätherische Ölverbindungen von *O. vulgare* subsp. *vulgare* verwendet werden kann.

Schlüsselwörter: *Oregano*, ätherisches Öl, Hydrodestillation, GC-MS, QSSR, ANN