

**Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät****Institut für Chemie****Fachgebiet: Analytical Chemistry / Petrochemical Analysis**

Betreuer: Prof. Dr. Ralf Zimmermann

**Maximilian Jennerwein**

(e-mail: max.jennerwein@freenet.de )

***Application of comprehensive two-dimensional Gas Chromatography Time-of-Flight Mass Spectrometry and Visual Basic Script for detailed Analysis of fossil and biogenic fuels***

In dieser Arbeit wurde umfassend zwei-dimensionale Gaschromatografie Flugzeit-Massenspektrometrie (GCxGC-TOFMS) in Verbindung mit automatisierter Datenauswertung mittels Programmierungen in Visual Basic Script (VBS) zur Analyse fossiler und biogener Kraftstoffe eingesetzt. Auf diese Weise konnte eine substanzgruppenspezifische Vollquantifizierung von petrochemischen Mitteldestillaten, wie Dieselmotorkraftstoff und Heizöl, erreicht werden. Durch eine offline-Kopplung von HPLC und GCxGC-TOFMS wurde des Weiteren der Einfluss biogener Kraftstoffe, wie hydriertem Pflanzenöl (HVO) auf die Standardanalysemethode von aromatischen Verbindungen untersucht. Die Analysemethode konnte darüber hinaus erfolgreich auf höher siedende Proben, wie Rohöle erweitert und die prinzipielle Durchführung einer zwei-dimensionalen simulierten Destillation untersucht werden.

Within this work comprehensive two-dimensional gas chromatography time-of-flight mass spectrometry (GCxGC-TOFMS) was applied for the analysis of fossil and biogenic fuels in combination with automatized data evaluation using Visual Basic Script (VBS) programming. With this approach it was possible to provide a complete compound group-type quantification of petrochemical middle distillates such as diesel fuel and heating oil. Furthermore, it was possible to determine the impact of biogenic fuels like hydrogenated vegetable oil (HVO) on the standard method for the analysis of aromatic compounds by the application of an offline-hyphenation of HPLC and GCxGC-TOFMS. The presented analysis method could successfully be adapted on high boiling samples like crude oils and the principle application of a two-dimensional simulated distillation could be examined.