

## SERVICE DE SPECTROMETRIE DE MASSE DE L'ISIC (SSMI)

**Dr. Laure Menin**  
**Francisco Sepulveda**  
EPFL-SB-ISIC  
SSMI, BCH 1524  
CH-1015 Lausanne  
Suisse  
Phone: +41 21 693 94 64  
Fax: +41 21 693 97 50  
Laure.menin@epfl.ch

**Pr. Yury O. Tsybin, Directeur**  
EPFL-SB-ISIC  
LSMB, BCH 4312  
CH-1015 Lausanne  
Suisse  
Phone: +41 21 693 97 51  
Fax: +41 21 693 97 00  
Yury.tsybin@epfl.ch



### *ANALYSES GC-MS*

Le 05 Octobre 2009

**Objet:** Analyse d'une huile essentielle par GC-MS  
**Nom:** **Armoise Davana**  
**Lot:** **DAV2003/445**  
**Destinataire:** Entreprise Gedane (Lausanne, Suisse)  
**Composés majoritaires:** **Davanone**

---

### *CONDITIONS EXPERIMENTALES*

---

**Type d'instrument :** GC CP-3800 couplé au 1200L Triple quadrupole MS/MS (Varian)  
**Mode d'ionisation :** Impact électronique (IE), 70 eV (mode positif)  
**Gamme de masse :** *m/z* 50-250 en 0.5 sec  
**Colonne :** FactorFour VF-5ms (5% phenyl-methyl 95% dimethyl polysiloxane, 0.25mm x 30 m)  
**Débit :** 1 mL/min  
**Gradient :** 50°C pendant 3 min; Montée à 150°C en 20 min; Montée à 250°C en 7 min  
**Calibrant :** FC43  
**Echantillons :** Huile essentielle diluée 1:200 dans l'éther. Injection de 1 µL.

---

Figure 1 – Chromatogramme TIC-GC/MS d'huile essentielle de Davana (DAV2003/445) analysée sur colonne capillaire

FactorFour VF-5ms (5% phenyl-methyl 95% diméthylpolysiloxane, 0.25mm x 30 m). Les numéros des pics sont reportés dans la Table 1.

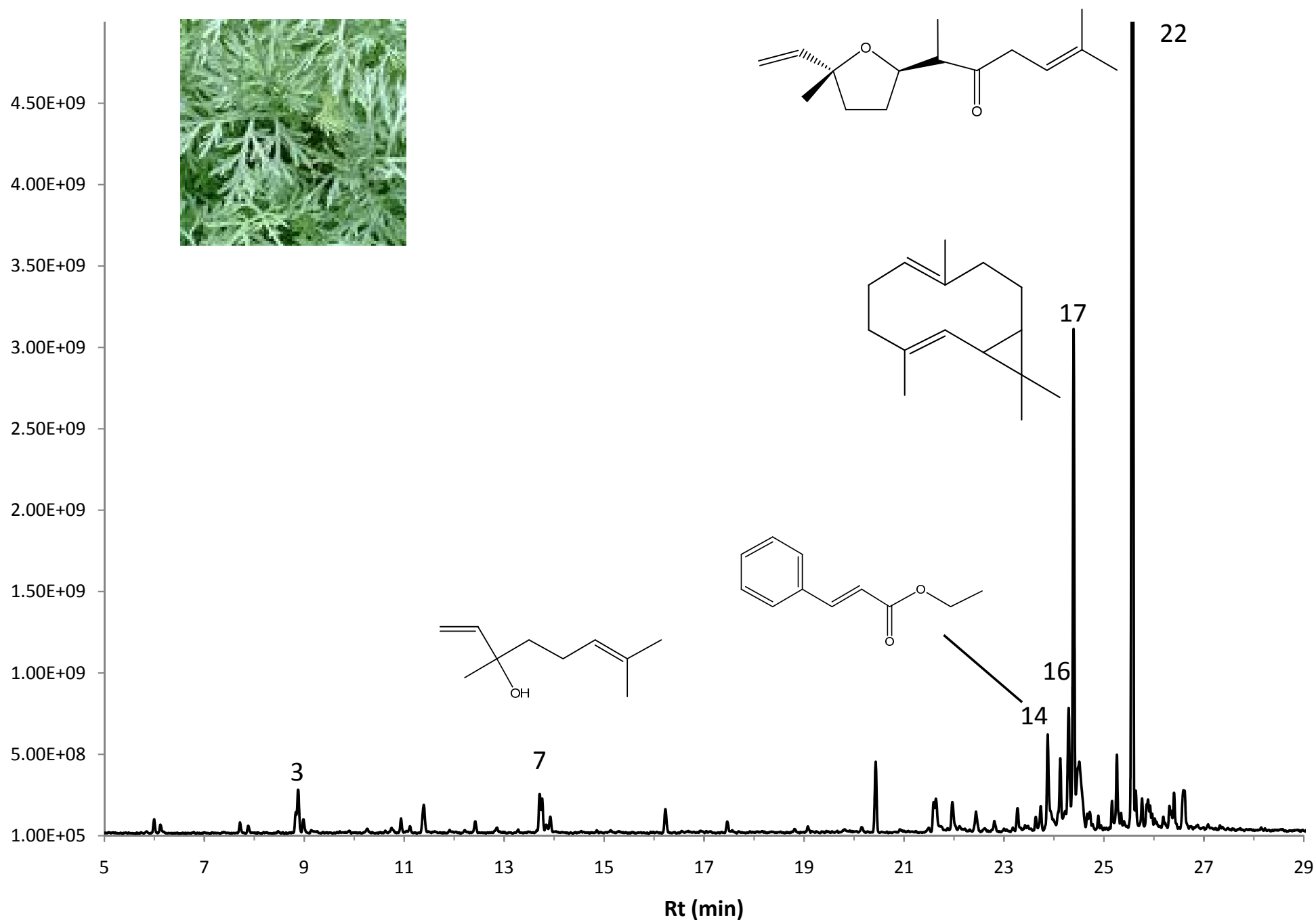


Table 1 – Composition de l'huile essentielle d'Armoise Davana (DAV2003/445)

N°	Retention Time (min.)	Area	% of Total	Identification (NIST 02/MassFinder)	Prob (%)
1	5.996	1.98E+08	0.39	Ethyl 2-methylbutyrate	97
2	7.714	1.62E+08	0.32	5-Ethyl-2-methyl-2-vinyltetrahydrofuran	76
<b>3</b>	<b>8.831</b>	<b>1.00E+09</b>	<b>1.97</b>	<b>Butyl 2-methylbutanoate</b>	<b>85</b>
4	8.982	2.45E+08	0.48	Butyl isovalerate	69
5	11.391	6.12E+08	1.20	p-Cymene	38
6	12.421	2.06E+08	0.40	γ-Terpinene	63
<b>7</b>	<b>13.709</b>	<b>6.36E+08</b>	<b>1.25</b>	<b>Linalol</b>	<b>94</b>
8	16.226	4.16E+08	0.81	4-Terpineol	96
<b>9</b>	<b>20.433</b>	<b>1.14E+09</b>	<b>2.24</b>	<b>Bicycloelemene</b>	<b>34</b>
10	21.593	3.96E+08	0.78	Neryl Acetate	37
11	21.639	5.24E+08	1.03	(Z)-Ethyl Cinnamate	62
12	22.44	4.19E+08	0.82	Davanafuran	79
13	23.271	3.90E+08	0.77	Allo-Aromadendrene	20
<b>14</b>	<b>23.875</b>	<b>1.89E+09</b>	<b>3.71</b>	<b>(E)-Ethyl Cinnamate</b>	<b>84</b>
15	24.127	1.34E+09	2.62	Isogermacrene D	67
<b>16</b>	<b>24.293</b>	<b>2.24E+09</b>	<b>4.38</b>	<b>β-Selinene</b>	<b>20</b>
<b>17</b>	<b>24.394</b>	<b>6.98E+09</b>	<b>13.69</b>	<b>Bibyclogermacrene</b>	<b>68</b>
<b>18</b>	<b>24.507</b>	<b>2.97E+09</b>	<b>5.82</b>	<b>Davana Ether</b>	<b>73</b>
19	24.666	2.08E+08	0.41	γ-Amorphene / γ-Cadinene	69 / 67
20	25.161	3.72E+08	0.73	Allo - Davanone	63
<b>21</b>	<b>25.258</b>	<b>1.13E+09</b>	<b>2.22</b>	<b>Iso-Davanone</b>	<b>69</b>
<b>22</b>	<b>25.573</b>	<b>2.43E+10</b>	<b>47.66</b>	<b>Cis-Davanone</b>	<b>80</b>
23	25.638	1.87E+08	0.37	Co-eluted peaks*	
24	25.763	3.64E+08	0.71		
25	25.855	2.00E+08	0.39		
26	25.882	3.51E+08	0.69		
27	25.924	2.24E+08	0.44		
28	25.963	1.34E+08	0.26		
29	26.188	1.42E+08	0.28		
30	26.311	2.69E+08	0.53	τ-Cadinol	72
31	26.347	2.06E+08	0.40		
32	26.403	5.48E+08	1.07		
33	26.589	5.89E+08	1.15	Co-eluted peaks*	

\* A better separation is required for proper identification