

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 16 Mai 2011

Objet: Analyse d'une huile essentielle par GC-MS
Nom: Davana
Lot: DAV501C090007
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 1:500 dans l'éther. Injection de 1 μ L.

Figure 1 – Chromatogramme TIC-GC/MS d'huile essentielle de Davana (DAV501C090007) analysée sur colonne capillaire

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

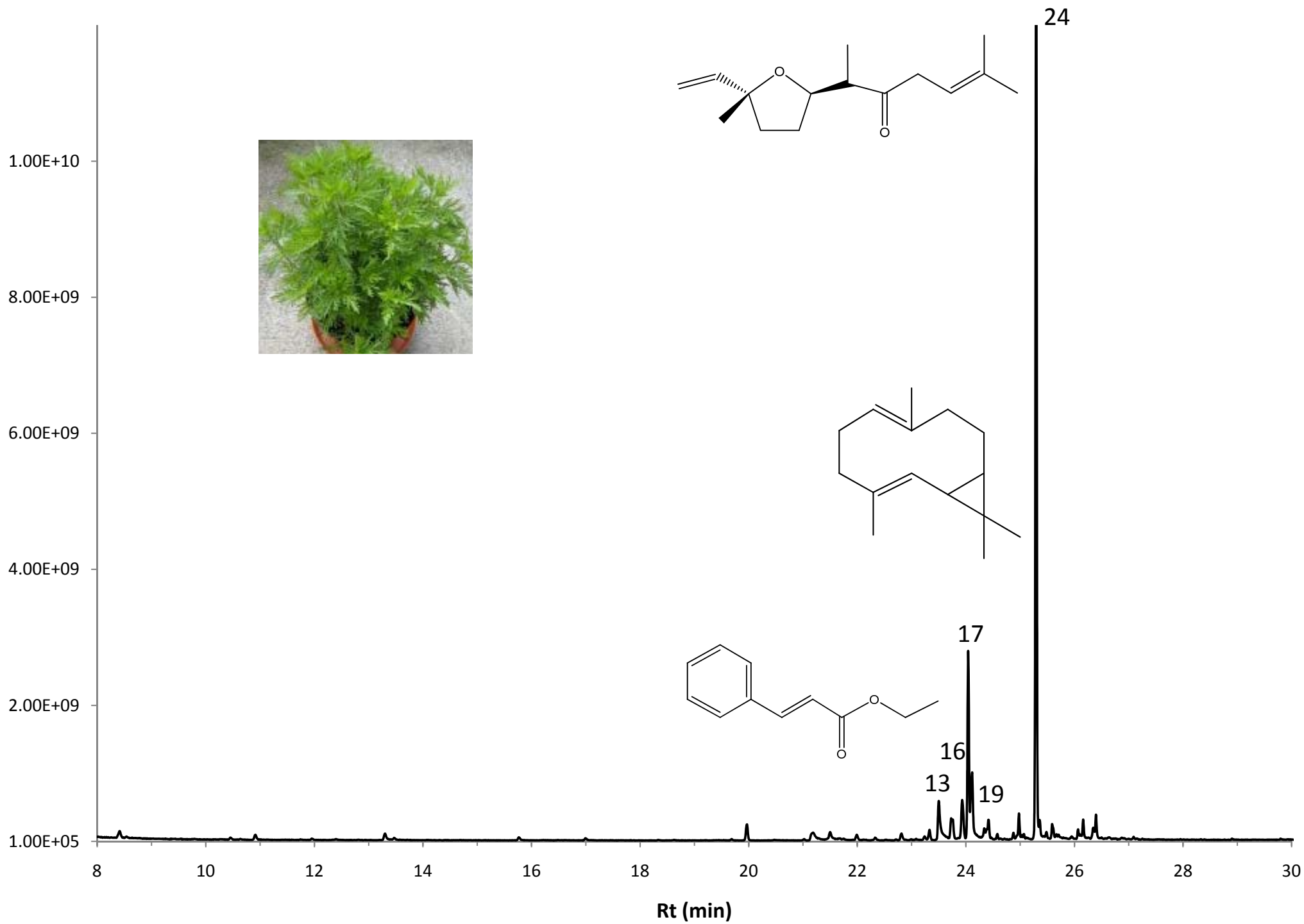


Table 1 – Composition de l'huile essentielle de Davana (DAV501C090007)

N°	Retention Time (min.)	Area	% of Total	Identification (NIST 08/MassFinder)	Prob (%)
1	10.91	2.18E+08	0.50	m-Cymene	63
2	13.30	2.93E+08	0.67	Linalool	10
3	13.47	5.69E+07	0.13	2-Methylbutyl Isovalerate	64
4	15.77	1.28E+08	0.29	4-Terpineol	78
5	19.97	5.96E+08	1.36	Bicycloelemene	20
6	21.23	7.37E+08	1.69	(Z)-Ethyl Cinnamate	68
7	21.50	5.39E+08	1.24	(E)-Methyl Cinnamate	69
8	21.99	2.01E+08	0.46	Davanafuran	87
9	22.33	1.15E+08	0.26	Isocaryophyllene	15
10	22.81	2.53E+08	0.58	Aromadendrene	10
11	23.24	1.56E+08	0.36	Nordavanone	*
12	23.33	3.56E+08	0.82	Allo-Aromadendrene	15
13	23.50	2.11E+09	4.84	(E)-Ethyl Cinnamate	82
14	23.73	6.17E+08	1.41	Davana Ether	91
15	23.76	6.22E+08	1.43	Germacrene D	30
16	23.93	1.78E+09	4.07	allo-Aromadendrene-9-ene	67
17	24.04	5.50E+09	12.60	Bicyclogermacrene	76
18	24.34	3.99E+08	0.92	γ-Amorphene	62
19	24.42	8.88E+08	2.04	Davana Ether (isomer)	73
20	24.58	1.64E+08	0.38	Artedouglasia Oxide C	69
21	24.88	1.78E+08	0.41	Allo-Davanone	5
22	24.98	7.52E+08	1.72	Iso-Davanone	69
23	25.07	1.43E+08	0.33	Sandela	17
24	25.30	2.43E+10	55.58	Davanone	76
25	25.36	1.38E+08	0.32	Spathulenol	32
26	25.48	1.66E+08	0.38	(-)-Globulol / Viridiflorol	18 / 15
27	25.59	5.12E+08	1.17	Coelution	
28	26.07	2.31E+08	0.53	Alismol	10
29	26.16	4.73E+08	1.08	τ-Cadinol	72
30	26.35	4.04E+08	0.93	β-Eudesmol	50
31	26.40	6.56E+08	1.50	Unknown	

* Manual identification

Table 1 – Composition de l'huile essentielle de Davana (DAV501C090007)

N°	Retention Time (min.)	Area	% of Total	Identification (NIST 08/MassFinder)
1	10.91	2.18E+08	0.50	m-Cymene
2	13.30	2.93E+08	0.67	Linalool
3	13.47	5.69E+07	0.13	2-Methylbutyl Isovalerate
4	15.77	1.28E+08	0.29	4-Terpineol
5	19.97	5.96E+08	1.36	Bicycloelemene
6	21.23	7.37E+08	1.69	(Z)-Ethyl Cinnamate
7	21.50	5.39E+08	1.24	(E)-Methyl Cinnamate
8	21.99	2.01E+08	0.46	Davanafuran
9	22.33	1.15E+08	0.26	Isocaryophyllene
10	22.81	2.53E+08	0.58	Aromadendrene
11	23.24	1.56E+08	0.36	Nordavanone
12	23.33	3.56E+08	0.82	Allo-Aromadendrene
13	23.50	2.11E+09	4.84	(E)-Ethyl Cinnamate
14	23.73	6.17E+08	1.41	Davana Ether
15	23.76	6.22E+08	1.43	Germacrene D
16	23.93	1.78E+09	4.07	allo-Aromadendrene-9-ene
17	24.04	5.50E+09	12.60	Bicyclogermacrene
18	24.34	3.99E+08	0.92	γ-Amorphene
19	24.42	8.88E+08	2.04	Davana Ether (isomer)
20	24.58	1.64E+08	0.38	Artedouglasia Oxide C
21	24.88	1.78E+08	0.41	Allo-Davanone
22	24.98	7.52E+08	1.72	Iso-Davanone
23	25.07	1.43E+08	0.33	Sandela
24	25.30	2.43E+10	55.58	Davanone
25	25.36	1.38E+08	0.32	Spathulenol
26	25.48	1.66E+08	0.38	(-)-Globulol / Viridiflorol
27	25.59	5.12E+08	1.17	Coelution
28	26.07	2.31E+08	0.53	Alismol
29	26.16	4.73E+08	1.08	τ-Cadinol
30	26.35	4.04E+08	0.93	β-Eudesmol
31	26.40	6.56E+08	1.50	Unknown