

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 07 Novembre 2011

Objet: Analyse d'une huile essentielle par GC-MS
Nom: **Immortelle**
Lot: **IMMB490848**
Destinataire : Entreprise Gedane (Lausanne, Suisse)
Composés majoritaires: **Neryl Acetate ; γ -Curcumene**

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'Immortelle (IMMB490848) analysé sur colonne capillaire FactorFour VF-5ms (5% phenyl-méthyl 95% diméthylpolysiloxane, 0.25mm x 30 m). Les numéros des pics sont reportés dans la Table 1.

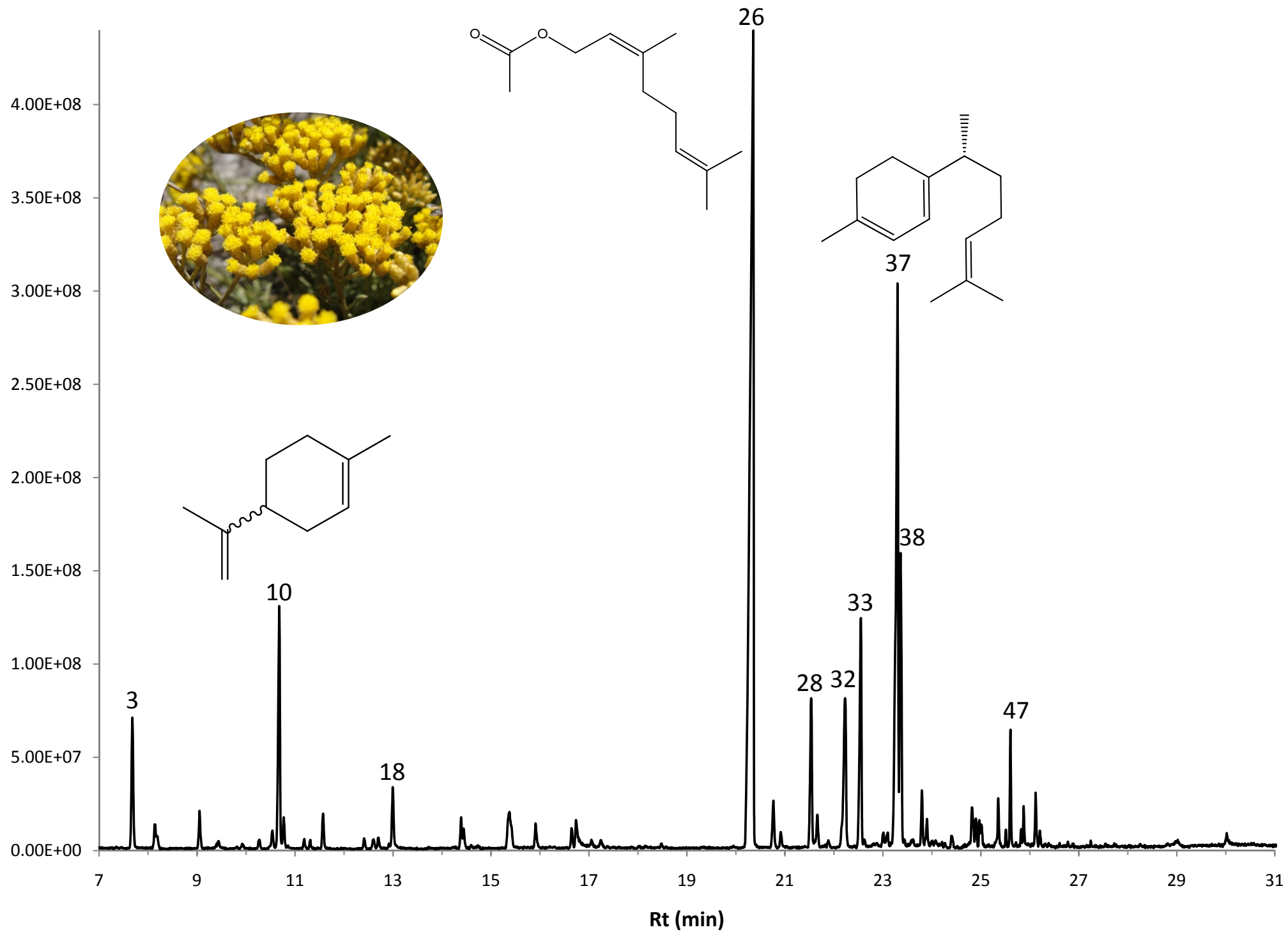


Table 1 – Composition de l'huile essentielle d'Immortelle (IMMB490848)

N°	Retention Time (min.)	Area	% of Total	Identification (NIST 08 / Massfinder)	Prob (%)
1	4.17	1.29E+07	0.21	2-Methyl-2-Heptene	55
2	5.11	2.98E+07	0.49	4-Methyl-3-Hexanone	73
3	7.68	1.77E+08	2.89	α-Pinene	86
4	8.14	3.38E+07	0.55	α -Fenchene	73
5	8.18	1.60E+07	0.26	Camphene	67
6	9.05	4.36E+07	0.71	β -Pinene	83
7	9.44	8.62E+06	0.14	Myrcene	28
8	10.27	1.22E+07	0.20	α -Terpinene	16
9	10.54	2.72E+07	0.44	p-Cymene	73
10	10.68	3.28E+08	5.34	D-Limonene	86
11	10.77	3.80E+07	0.62	Eucalyptol	86
12	11.19	1.17E+07	0.19	(Z)- β -Ocimene	66
13	11.31	1.07E+07	0.17	(E)- β -Ocimene	15
14	11.57	4.34E+07	0.71	γ -Terpinene	81
15	12.41	1.45E+07	0.24	Terpinolene	55
16	12.60	1.61E+07	0.26	2-Nonanone	53
17	12.70	1.44E+07	0.23	2,4-Dimethyl-heptane-3,5-dione	72
18	12.99	7.54E+07	1.23	Linalool	79
19	14.44	2.36E+07	0.38	2H-Pyran,3,6-dihydro-4-methyl-2-(2-methyl-propenyl)-	89
20	15.38	6.63E+07	1.08	Unknown, coelution	
21	15.44	3.16E+07	0.51	4-Terpineol	59
22	15.91	3.72E+07	0.60	α -Terpineol	55
23	16.74	3.67E+07	0.60	Nerol	62
24	17.05	6.96E+06	0.11	Pulegone	58
25	18.48	6.50E+06	0.11	2-Undecanone	68
26	20.35	2.19E+09	35.61	Neryl Acetate	76
27	20.76	6.70E+07	1.09	α -Longipinene / α -Funebrene	67/81
28	21.54	2.13E+08	3.47	Helifolene / Italicene	76/71
29	21.66	4.26E+07	0.69	α -Cedrene	67
30	21.89	1.02E+07	0.17	β -Caryophyllene	15
31	22.14	1.88E+07	0.31	Trans- α -Bergamotene	25
32	22.23	2.57E+08	4.17	Italidione I, MW=210	*
33	22.55	3.32E+08	5.41	Neryl Propionate	45
34	22.62	6.58E+06	0.11	β -Farnesene	15
35	23.01	1.91E+07	0.31	α -Acoradiene	67
36	23.10	2.27E+07	0.37	β -Acoradiene	15
37	23.30	9.65E+08	15.71	γ-Curcumene	62
38	23.36	4.11E+08	6.69	α-Curcumene	66
39	23.80	5.81E+07	0.95	Italidione II, MW=224	*
40	23.90	3.28E+07	0.53	γ -Cuprenene	61
41	24.40	1.90E+07	0.31	Spathulenol	16
42	24.82	5.26E+07	0.86	Italidione III, MW=238	*
43	24.90	5.37E+07	0.87	Italidione III, MW=238	*
44	25.01	2.54E+07	0.41	Italidione III, MW=238	*
45	25.35	5.44E+07	0.89	α -Guaïol	63
46	25.51	1.40E+07	0.23	Geranyl Tiglate	74
47	25.60	9.90E+07	1.61	Methanol,2,3,4,4a,5,6,7,8-octahydro-α,α,4a,8-tetramethyl	70
48	25.82	1.48E+07	0.24	γ -Eudesmol	20
49	25.87	3.04E+07	0.50	β -Eudesmol	70
50	26.12	5.65E+07	0.92	α -Eudesmol	64

* Identification manuelle basée sur les données publiées (pas de spectre IE ni structure disponible)

Table 1 – Composition de l'huile essentielle d'Immortelle (IMMB490848)

N°	Retention Time (min.)	Area	% of Total	Identification (NIST 08 / Massfinder)
1	4.17	1.29E+07	0.21	2-Methyl-2-Heptene
2	5.11	2.98E+07	0.49	4-Methyl-3-Hexanone
3	7.68	1.77E+08	2.89	α-Pinene
4	8.14	3.38E+07	0.55	α -Fenchene
5	8.18	1.60E+07	0.26	Camphene
6	9.05	4.36E+07	0.71	β -Pinene
7	9.44	8.62E+06	0.14	Myrcene
8	10.27	1.22E+07	0.20	α -Terpinene
9	10.54	2.72E+07	0.44	p-Cymene
10	10.68	3.28E+08	5.34	D-Limonene
11	10.77	3.80E+07	0.62	Eucalyptol
12	11.19	1.17E+07	0.19	(Z)- β -Ocimene
13	11.31	1.07E+07	0.17	(E)- β -Ocimene
14	11.57	4.34E+07	0.71	γ -Terpinene
15	12.41	1.45E+07	0.24	Terpinolene
16	12.60	1.61E+07	0.26	2-Nonanone
17	12.70	1.44E+07	0.23	2,4-Dimethyl-heptane-3,5-dione
18	12.99	7.54E+07	1.23	Linalool
19	14.44	2.36E+07	0.38	2H-Pyran,3,6-dihydro-4-methyl-2-(2-methyl-propenyl)-
20	15.38	6.63E+07	1.08	Unknown, coelution
21	15.44	3.16E+07	0.51	4-Terpineol
22	15.91	3.72E+07	0.60	α -Terpineol
23	16.74	3.67E+07	0.60	Nerol
24	17.05	6.96E+06	0.11	Pulegone
25	18.48	6.50E+06	0.11	2-Undecanone
26	20.35	2.19E+09	35.61	Neryl Acetate
27	20.76	6.70E+07	1.09	α -Longipinene / α -Funebrene
28	21.54	2.13E+08	3.47	Helifolene / Italicene
29	21.66	4.26E+07	0.69	α -Cedrene
30	21.89	1.02E+07	0.17	β -Caryophyllene
31	22.14	1.88E+07	0.31	Trans- α -Bergamotene
32	22.23	2.57E+08	4.17	Italidione I, MW=210
33	22.55	3.32E+08	5.41	Neryl Propionate
34	22.62	6.58E+06	0.11	β -Farnesene
35	23.01	1.91E+07	0.31	α -Acoradiene
36	23.10	2.27E+07	0.37	β -Acoradiene
37	23.30	9.65E+08	15.71	γ-Curcumene
38	23.36	4.11E+08	6.69	α-Curcumene
39	23.80	5.81E+07	0.95	Italidione II, MW=224
40	23.90	3.28E+07	0.53	γ -Cuprenene
41	24.40	1.90E+07	0.31	Spathulenol
42	24.82	5.26E+07	0.86	Italidione III, MW=238
43	24.90	5.37E+07	0.87	Italidione III, MW=238
44	25.01	2.54E+07	0.41	Italidione III, MW=238
45	25.35	5.44E+07	0.89	α -Guaïol
46	25.51	1.40E+07	0.23	Geranyl Tiglate
47	25.60	9.90E+07	1.61	Methanol,2,3,4,4a,5,6,7,8-octahydro-α,α,4a,8-tetramethyl
48	25.82	1.48E+07	0.24	γ -Eudesmol
49	25.87	3.04E+07	0.50	β -Eudesmol
50	26.12	5.65E+07	0.92	α -Eudesmol