

# 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 27 Novembre 2012

**Objet:** Analyse d'une huile essentielle d'Orange douce  
**Nom latin:** *Citrus aurantium var dulcis* (Rutacées)  
**Lot:** **ORA501K101912**  
**Provenance:** **Inde**  
**Partie distillée:** Zestes, expression par pression à froid  
**Destinataire :** Entreprise Gedane (Lausanne, Suisse)

### Composés majoritaires:

Nom	N° CAS	N° CE (EINECS)	Caractéristiques
D-Limonene	8989-27-5	227-813-5	Xi, R10, R38, R43, N, R50/53

## CONDITIONS EXPERIMENTALES

**Type d'instrument :** CP-3800 couplé au 1200L Triple quadrupole MS/MS (Varian)  
**Mode d'ionisation :** Impact électronique (IE), 70 eV (mode positif)  
**Gamme de masse :**  $m/z$  50-300 en 0.5 sec  
**Colonne :** FactorFour VF-5ms (5% phenyl-methyl 95% dimethyl polysiloxane, 0.25mm x 30 m)  
**Débit :** 1 mL/min  
**Gradient :** 3 min à 50°C ; Montée à 150°C en 20 min puis à 250°C en 7 min  
**Calibrant :** FC43  
**Echantillons :** Huile essentielle diluée 1:500 dans l'éther. Injection de 1 µL.

Figure 1 – Chromatogramme TIC-GC/MS d'huile essentielle d'Orange (ORA501K101912) 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.

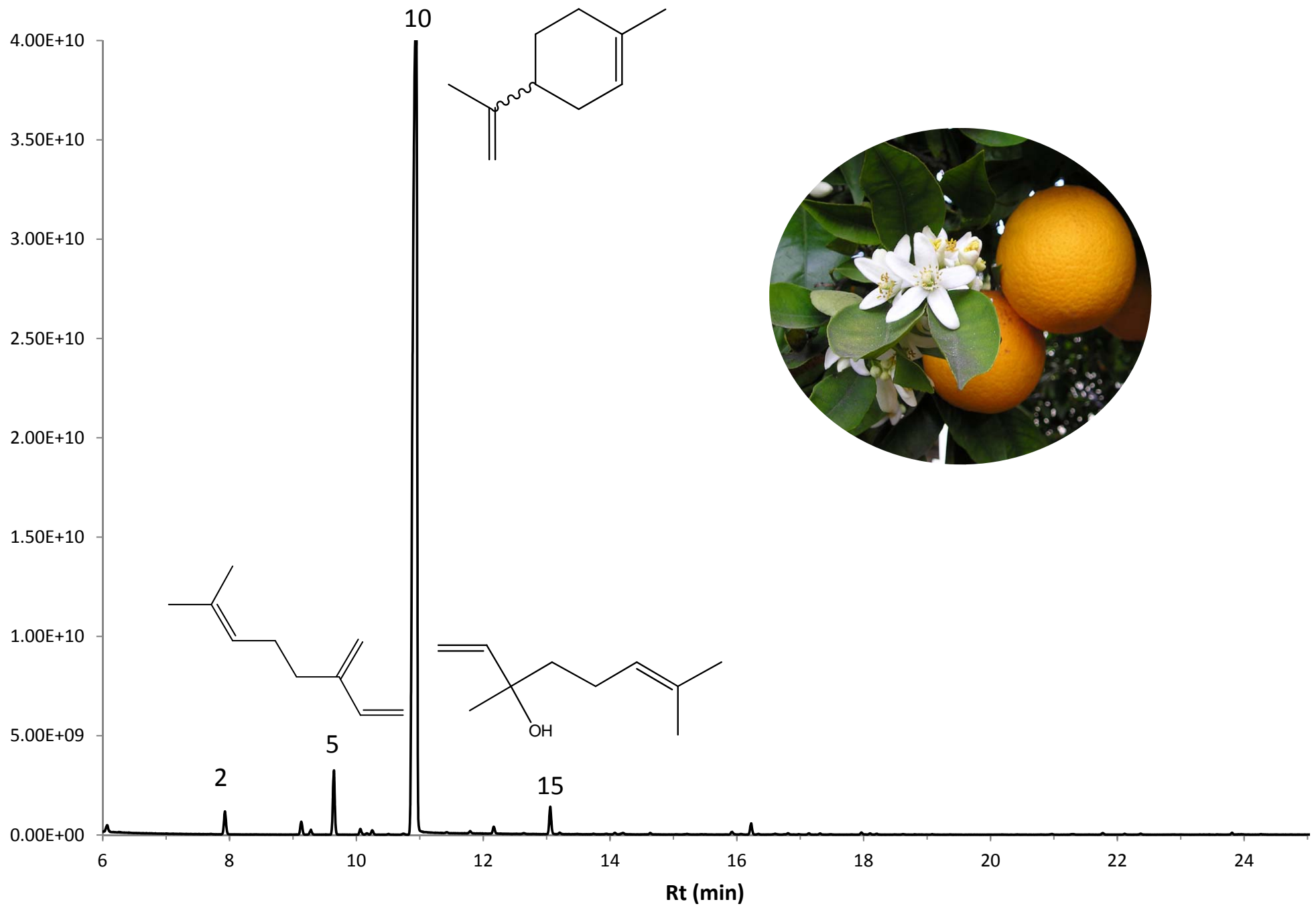


Table 1 – Composition de l'huile essentielle d'Orange douce (ORA501K101912)

N°	Retention Time (min.)	Area	% of Total	Identification (NIST 08 /MassFinder)	Prob (%)
1	6.07	8.57E+08	0.41	Ethylbenzene	73
<b>2</b>	<b>7.93</b>	<b>2.53E+09</b>	<b>1.21</b>	<b><math>\alpha</math>-Pinene</b>	<b>71</b>
3	9.13	1.42E+09	0.68	Sabinene	77
4	9.28	5.44E+08	0.26	$\beta$ -Pinene	75
<b>5</b>	<b>9.65</b>	<b>6.85E+09</b>	<b>3.27</b>	<b><math>\beta</math>-Myrcene</b>	<b>43</b>
6	10.06	6.57E+08	0.31	Octanal	68
7	10.17	1.74E+08	0.08	$\alpha$ -Phellandrene	15
8	10.25	5.16E+08	0.25	D3-Carene	74
9	10.74	1.33E+08	0.06	m/p-Cymene	62 / 58
<b>10</b>	<b>10.93</b>	<b>1.89E+11</b>	<b>90.18</b>	<b>D-Limonene</b>	<b>75</b>
11	11.43	1.09E+08	0.05	$\beta$ -(E)-Ocimene	41
12	11.80	2.33E+08	0.11	$\gamma$ -Terpinene	10
13	12.17	7.32E+08	0.35	Octanol	10
14	12.63	9.20E+07	0.04	$\alpha$ -Terpinolene	10
<b>15</b>	<b>13.06</b>	<b>2.99E+09</b>	<b>1.43</b>	<b>Linalool</b>	<b>78</b>
16	13.21	1.82E+08	0.09	Nonanal	25
17	13.74	5.13E+07	0.02	Trans-p-Mentha-2,8-dienol	15
18	14.08	1.77E+08	0.08	Limonene-oxide,cis-	46
19	14.20	2.06E+08	0.10	Limonene-oxide,trans-	55
20	14.63	1.32E+08	0.06	Citronellal	73
21	15.92	3.07E+08	0.15	$\alpha$ -Terpineol	69
22	16.23	1.26E+09	0.60	Decanal	46
23	16.81	1.26E+08	0.06	$\beta$ -Citronellol	20
24	17.14	1.59E+08	0.08	$\beta$ -Citral (Neral)	53
25	17.32	1.29E+08	0.06	D-Carvone	61
26	17.96	2.12E+08	0.10	Geranial	62
27	18.03	2.19E+07	0.01	Isopiperitone	15
28	18.21	8.36E+07	0.04	Perilla Aldehyde	20
29	20.97	7.24E+07	0.03	$\alpha$ -Copaene / $\alpha$ -Ylangene / $\alpha$ -Cubebene	20 / 62 / 59
30	21.77	1.63E+08	0.08	Dodecanal	12
31	22.12	5.28E+07	0.03	Bergamotene	10
32	22.37	1.25E+08	0.06	isogermacrene D / $\beta$ -Copaene	61 / 15
33	23.81	1.51E+08	0.07	Guaia-1(10),11-diene / Valencene	10 / 10
34	24.27	5.28E+07	0.03	$\delta$ -Cadinene	10

Table 1 – Composition de l'huile essentielle d'Orange douce (ORA501K101912)

N°	Retention Time (min.)	Area	% of Total	Identification (NIST 08 /MassFinder)
1	6.07	8.57E+08	0.41	Ethylbenzene
<b>2</b>	<b>7.93</b>	<b>2.53E+09</b>	<b>1.21</b>	<b><math>\alpha</math>-Pinene</b>
3	9.13	1.42E+09	0.68	Sabinene
4	9.28	5.44E+08	0.26	$\beta$ -Pinene
<b>5</b>	<b>9.65</b>	<b>6.85E+09</b>	<b>3.27</b>	<b><math>\beta</math>-Myrcene</b>
6	10.06	6.57E+08	0.31	Octanal
7	10.17	1.74E+08	0.08	$\alpha$ -Phellandrene
8	10.25	5.16E+08	0.25	D3-Carene
9	10.74	1.33E+08	0.06	m/p-Cymene
<b>10</b>	<b>10.93</b>	<b>1.89E+11</b>	<b>90.18</b>	<b>D-Limonene</b>
11	11.43	1.09E+08	0.05	$\beta$ -(E)-Ocimene
12	11.80	2.33E+08	0.11	$\gamma$ -Terpinene
13	12.17	7.32E+08	0.35	Octanol
14	12.63	9.20E+07	0.04	$\alpha$ -Terpinolene
<b>15</b>	<b>13.06</b>	<b>2.99E+09</b>	<b>1.43</b>	<b>Linalool</b>
16	13.21	1.82E+08	0.09	Nonanal
17	13.74	5.13E+07	0.02	Trans-p-Mentha-2,8-dienol
18	14.08	1.77E+08	0.08	Limonene-oxide,cis-
19	14.20	2.06E+08	0.10	Limonene-oxide,trans-
20	14.63	1.32E+08	0.06	Citronellal
21	15.92	3.07E+08	0.15	$\alpha$ -Terpineol
22	16.23	1.26E+09	0.60	Decanal
23	16.81	1.26E+08	0.06	$\beta$ -Citronellol
24	17.14	1.59E+08	0.08	$\beta$ -Citral (Neral)
25	17.32	1.29E+08	0.06	D-Carvone
26	17.96	2.12E+08	0.10	Geranial
27	18.03	2.19E+07	0.01	Isopiperitone
28	18.21	8.36E+07	0.04	Perilla Aldehyde
29	20.97	7.24E+07	0.03	$\alpha$ -Copaene / $\alpha$ -Ylangene / $\alpha$ -Cubebene
30	21.77	1.63E+08	0.08	Dodecanal
31	22.12	5.28E+07	0.03	Bergamotene
32	22.37	1.25E+08	0.06	isogermacrene D / $\beta$ -Copaene
33	23.81	1.51E+08	0.07	Guaia-1(10),11-diene / Valencene
34	24.27	5.28E+07	0.03	$\delta$ -Cadinene