

# 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 28 Décembre 2015

**Objet:** Analyse d'une huile essentielle de Géranium rosat  
**Nom latin:** *Pelargonium X asperum Ehrahrt ex Willdenow* (Géramiacées)  
**Lot:** **GER501A124395**  
**Provenance:** Inde  
**Partie distillée:** Parties aériennes fleurées  
**Destinataire :** Entreprise Gedane (Lausanne, Suisse)

### Composés majoritaires:

Nom	N° CAS	N° CE (EINECS)	Caractéristiques
Citronellol	106-22-9	203-375-0	Xi, R38, R43, N, R51/53
Geraniol	106-24-1	203-377-1	Xi, R38-43

## *CONDITIONS EXPERIMENTALES*

---

**Type d'instrument :** Trace 1300 couplé au TSQ EVO8000 (Thermofisher)  
**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 3 ; Montée à 150°C en 20 min puis à 250°C en 7 min  
**Calibrant :** FC43  
**Echantillons :** Huile essentielle diluée 1:1000 dans l'éther. Injection de 1 µL.

---

Table 1 – Composition de l'huile essentielle de **Géranium rosat** (GER501A124395)

N°	Retention Time (min.)	Area	% of Total	Identification (NIST 14/MassFinder)	Prob (%)
1	8.58	1.98E+07	0.05	3-Hexenol	37
2	11.13	1.49E+08	0.39	$\alpha$ -Pinene	73
3	13.06	5.83E+07	0.15	Myrcene	65
4	14.20	1.63E+07	0.04	p-Cymene	86
5	14.35	3.45E+07	0.09	D-Limonene	70
6	14.59	1.99E+07	0.05	$\beta$ -(Z)-Ocimene	70
7	14.93	3.19E+07	0.08	$\beta$ -(E)-Ocimene	64
8	15.70	6.98E+07	0.18	trans-Linalool Oxide	79
9	16.21	2.87E+07	0.07	cis-Linalool Oxide	62
<b>10</b>	<b>16.63</b>	<b>1.56E+09</b>	<b>4.05</b>	<b>Linalool</b>	<b>81</b>
<b>11</b>	<b>16.94</b>	<b>5.78E+08</b>	<b>1.50</b>	<b>cis-Rose Oxide</b>	<b>79</b>
12	17.44	2.16E+08	0.56	trans-Rose Oxide	78
13	18.13	3.70E+07	0.10	Isopulegol	30
14	18.23	2.94E+07	0.08	$\beta$ -Citronellal	83
<b>15</b>	<b>18.36</b>	<b>1.43E+09</b>	<b>3.71</b>	<b>Menthone</b>	<b>72</b>
<b>16</b>	<b>18.63</b>	<b>1.24E+09</b>	<b>3.22</b>	<b>Isomenthone</b>	<b>75</b>
17	19.02	2.37E+07	0.06	Neomenthol	20
18	19.35	8.70E+07	0.23	Menthol / Isomenthol	56/57
19	19.53	2.06E+08	0.53	$\alpha$ -Terpineol	60
<b>20</b>	<b>20.47</b>	<b>1.53E+10</b>	<b>39.72</b>	<b>Citronellol</b>	<b>73</b>
21	20.76	7.09E+07	0.18	Neral	75
<b>22</b>	<b>21.11</b>	<b>4.48E+09</b>	<b>11.63</b>	<b>Geraniol</b>	<b>85</b>
23	21.59	1.32E+08	0.34	Geranial	94
<b>24</b>	<b>21.74</b>	<b>1.34E+09</b>	<b>3.47</b>	<b>Citronellyl formate</b>	<b>73</b>
25	22.43	2.41E+08	0.63	Neryl formate	73
26	23.40	1.61E+07	0.04	Bicycloelemene	83
27	23.82	2.24E+08	0.58	Inconnu à 204 (C15H24?)	
28	24.58	3.38E+08	0.88	$\alpha$ -Copaene	54
<b>29</b>	<b>24.81</b>	<b>6.45E+08</b>	<b>1.67</b>	<b><math>\beta</math>-Bourbonene</b>	<b>75</b>
30	24.89	5.94E+07	0.15	1,5-di-epi- $\beta$ -Bourbonene	81
31	25.42	1.35E+07	0.03	$\alpha$ -Gurgujene	61
<b>32</b>	<b>25.75</b>	<b>1.76E+09</b>	<b>4.57</b>	<b><math>\beta</math>-Caryophyllene</b>	<b>53</b>
33	26.00	6.73E+07	0.17	$\beta$ -Copaene	87
34	26.18	2.38E+08	0.62	Citronellyl Propionate	28
35	26.28	1.15E+08	0.30	Guaia-6,9-diene	75
36	26.37	5.88E+07	0.15	Isogermacrene D	63
37	26.49	1.86E+08	0.48	Selina-4(15),6-diene	68
38	26.65	3.71E+08	0.96	$\alpha$ -Caryophyllene	74
39	26.75	9.69E+07	0.25	allo-Aromadendrene	64
40	26.88	1.43E+08	0.37	Neryl Isobutyrate	74

Table 1 – Composition de l'huile essentielle de **Géranium rosat** (GER501A124395) (Suite)

N°	Retention Time (min.)	Area	% of Total	Identification (NIST 14/MassFinder)	Prob (%)
41	26.94	1.97E+07	0.05	$\gamma$ -Amorphene	
42	27.00	5.03E+07	0.13	7aH,10bH-Cadina-1(6),4-diene	77
43	27.06	6.13E+07	0.16	Bicyclosquiphellandrene	64
44	27.21	3.08E+08	0.80	$\gamma$ -Amorphene	90
45	27.39	1.59E+08	0.41	$\alpha$ -Muurolene	65
46	27.49	2.06E+08	0.54	Isobicyclogermacrene	78
47	27.80	1.09E+08	0.28	$\gamma$ -Cadinene	78
48	27.88	4.49E+08	1.17	$\delta$ -Cadinene	74
<b>49</b>	<b>27.95</b>	<b>6.16E+08</b>	<b>1.60</b>	<b>Cis/Trans-Calamenene</b>	<b>74</b>
50	28.13	6.02E+07	0.16	w-Cadinene	72
51	28.27	2.77E+07	0.07	$\alpha$ -Calacorene	78
52	28.43	3.30E+08	0.86	Geranyl butyrate	82
53	28.82	9.36E+07	0.24	Spathulenol	62
54	28.86	5.30E+08	1.38	Phenylethyl Tiglate	77
55	28.90	4.36E+08	1.13	Caryophyllene Oxide	60
56	29.07	7.52E+07	0.20	$\alpha$ -Guaïol	72
57	29.28	4.92E+07	0.13	Humulene Epoxide II	83
58	29.33	1.90E+08	0.49	epi-Cubenol	25
59	29.44	3.93E+08	1.02	7-epi- $\gamma$ -Eudesmol	20
60	29.66	2.69E+08	0.70	Agarospirol	64
61	29.81	5.15E+08	1.34	Citronellyl Tiglate	20
<b>62</b>	<b>30.18</b>	<b>7.38E+08</b>	<b>1.92</b>	<b>Geranyl Tiglate</b>	<b>89</b>
63	30.36	1.01E+08	0.26	Geranyl Caproate	42
64	31.29	5.05E+07	0.13	Citronellyl heptanoate	50
65	31.57	5.72E+07	0.15	Geranyl heptanoate	33
66	32.09	4.89E+07	0.13	Citronellyl caprylate	11
67	32.33	3.17E+07	0.08	Geranyl caprylate	34
68	32.42	1.44E+08	0.37	Palmitic acid	55
69	33.69	2.49E+08	0.65	cis-Vaccenic acid	20
70	33.86	4.20E+08	1.09	Stearic acid	76

Figure 1 – Chromatogramme TIC-GC/MS d'huile essentielle de Géranium rosat (GER501A124395) analysée 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.

