

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 Lemongrass
Nom latin: *Cymbopogon flexuosus* (Poacées)
Lot: **LEM501B150006**
Provenance: Inde
Partie distillée: Parties aériennes
Destinataire : Entreprise Gedane (Lausanne, Suisse)

Composés majoritaires:

Nom	N° CAS	N° CE (EINECS)	Caractéristiques
Citral	5392-40-5	226-394-6	Xi, H315-317, R38-43
Geranyl Acetate	105-87-3	203-341-5	N, Xi, R38-R43, R51/53, H315-H317

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 **Lemongrass** (LEM501B150006)

N°	Retention Time (min.)	Area	% of Total	Identification (NIST 14/MassFinder)	Prob (%)
1	10.75	8.42E+07	0.18	Tricyclene	62
2	11.14	1.33E+08	0.28	α -Pinene	64
3	11.69	7.34E+08	1.57	Camphene	81
4	12.48	5.52E+06	0.01	Sabinene	68
5	12.91	5.55E+08	1.18	Sulcatone	84
6	13.07	8.70E+07	0.19	Myrcene	60
7	14.36	3.26E+08	0.70	D-Limonene	77
8	14.60	2.80E+08	0.60	(Z)- β -Ocimene	72
9	14.93	1.81E+08	0.39	(E)- β -Ocimene	67
10	15.74	3.34E+08	0.71	4-Nonanone	83
11	16.17	2.83E+07	0.06	Terpinolene	63
12	16.37	4.99E+07	0.11	Rosefuran	50
13	16.63	6.24E+08	1.33	Linalool	72
14	16.81	5.34E+07	0.11	α -Pinene Epoxide	10
15	17.96	9.19E+07	0.20	6-Octenal, 7-methyl-3-methylene	88
16	18.13	1.73E+08	0.37	Photocitral A	78
17	18.23	1.55E+08	0.33	β -Citronellal	77
18	18.50	5.20E+08	1.11	Isoneral	53
19	18.75	7.87E+07	0.17	Rosefuran Epoxide	88
20	18.86	1.51E+08	0.32	Endo-Borneol	42
21	19.07	8.96E+08	1.91	Isogeranial	57
22	19.54	1.16E+08	0.25	α -Terpineol	70
23	19.68	1.10E+07	0.02	Trans-Isopiperitenol	41
24	19.85	7.83E+07	0.17	Decanal	20
25	20.20	1.18E+07	0.03	Cis-Isopiperitenol	37
26	20.37	2.45E+07	0.05	Cis-Geraniol	84
27	20.44	4.28E+07	0.09	Cis- β -Citronellol	59
28	20.81	1.39E+10	29.70	β-Citral	45
29	21.12	2.74E+09	5.86	Geraniol	81
30	21.66	1.63E+10	34.81	Geranial (α-Citral)	92
31	22.10	1.55E+07	0.03	L-Bornyl acetate	21
32	22.44	1.13E+07	0.02	Geranyl formate	95
33	23.81	7.63E+07	0.16	α -cubenene	67
34	24.42	1.68E+08	0.36	Cyclosativene	77
35	24.58	3.33E+09	7.11	Geranyl acetate	40
36	24.91	3.33E+08	0.71	β -Elemene (coelution)	69
37	25.75	1.61E+09	3.43	β-Caryophyllene	31
38	26.10	1.10E+07	0.02	cis-Muurolo-3,5-diene	79

Table 1 – Composition de l'huile essentielle de **Lemongrass** (LEM501B150006) (suite)

N°	Retention Time (min.)	Area	% of Total	Identification (NIST 14/MassFinder)	Prob (%)
39	26.39	2.72E+08	0.58	trans-Isoeugenol	73
40	26.65	1.47E+08	0.31	α -Caryophyllene	66
41	26.79	1.83E+07	0.04	cis-Muurola-4(15),5-diene	86
42	27.00	1.81E+07	0.04	7aH,10bH-Cadina-1(6),4-diene	74
43	27.21	2.40E+08	0.51	γ -Amorphene	78
44	27.43	2.64E+07	0.06	Bicyclosesquiphellandrene	88
45	27.49	1.10E+07	0.02	epi-Zonarene	74
46	27.53	1.26E+07	0.03	α -Muurolene	69
47	27.80	9.60E+08	2.05	γ-Cadinene	83
48	27.88	2.67E+08	0.57	δ -Cadinene	70
49	28.01	1.10E+08	0.23	β -Cadinene	56
50	28.13	2.15E+07	0.05	Cubenene	79
51	28.37	4.92E+07	0.11	Hedycaryol	27
52	28.43	8.37E+07	0.18	Geranyl butyrate	84
53	28.56	1.20E+07	0.03	Germacrene B	67
54	28.90	2.09E+08	0.45	Caryophyllene Oxide	88
55	29.28	9.92E+06	0.02	Humulene Epoxide II	65
56	23.33	9.20E+06	0.02	Cubenol	53
57	29.48	9.96E+06	0.02	1-epi-Cubenol	58
58	29.66	1.28E+07	0.03	Cubenol	70

Figure 1 – Chromatogramme TIC-GC/MS d'huile essentielle de Lemongrass (LEM501B150006) 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.

