

# 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 30 Décembre 2015

**Objet:** Analyse d'une huile essentielle d'Orange douce  
**Nom latin:** *Citrus sinensis* (Agrume)  
**Lot:** **ORA501C150037**  
**Provenance:** Inde  
**Partie distillée:** Zestes.  
**Destinataire :** Entreprise Gedane (Lausanne, Suisse)

### Composés majoritaires:

| Nom        | N° CAS    | N° CE (EINECS) | Caractéristiques                        |
|------------|-----------|----------------|-----------------------------------------|
| D-Limonene | 5989-27-5 | 227-813-5      | N, Xi, R10, R38-R43, R50/53, 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 d'Orange douce (ORA501C150037)

| N°        | Retention Time (min.) | Area            | % of Total   | Identification (NIST 14 /MassFinder) | Prob (%)  |
|-----------|-----------------------|-----------------|--------------|--------------------------------------|-----------|
| 1         | 10.91                 | 2.75E+06        | 0.01         | $\alpha$ -Thujene                    | 68        |
| 2         | 11.14                 | 2.27E+08        | 0.69         | $\alpha$ -Pinene                     | 73        |
| 3         | 11.69                 | 8.61E+05        | 0.00         | Camphene                             | 79        |
| 4         | 12.48                 | 2.22E+08        | 0.67         | Sabinene                             | 84        |
| 5         | 12.63                 | 1.80E+07        | 0.05         | $\beta$ -Pinene                      | 76        |
| <b>6</b>  | <b>13.07</b>          | <b>6.67E+08</b> | <b>2.03</b>  | <b><math>\beta</math>-Myrcene</b>    | <b>79</b> |
| 7         | 13.54                 | 8.15E+07        | 0.25         | Octanal                              | 65        |
| 8         | 13.60                 | 2.29E+07        | 0.07         | $\alpha$ -Phellandrene               | 73        |
| 9         | 13.67                 | 6.76E+07        | 0.21         | D 3-Carene                           | 79        |
| 10        | 13.96                 | 2.94E+06        | 0.01         | $\alpha$ -Terpinene                  | 20        |
| 11        | 14.21                 | 1.11E+07        | 0.03         | P-Cymene                             | 77        |
| <b>12</b> | <b>14.42</b>          | <b>3.11E+10</b> | <b>94.43</b> | <b>D-Limonene</b>                    | <b>54</b> |
| 13        | 14.94                 | 1.79E+07        | 0.05         | $\beta$ -ocimene                     | 56        |
| 14        | 15.30                 | 1.93E+07        | 0.06         | $\gamma$ -Terpinene                  | 73        |
| 15        | 15.74                 | 1.18E+07        | 0.04         | trans-Sabinene Hydrate (coelution)   | 62        |
| 16        | 16.16                 | 1.60E+07        | 0.05         | Isoterpinolene                       | 72        |
| 17        | 16.63                 | 1.52E+08        | 0.46         | Linalool                             | 68        |
| 18        | 16.79                 | 1.17E+07        | 0.04         | Nonanal                              | 72        |
| 19        | 17.32                 | 1.08E+07        | 0.03         | Isopulegon                           | 51        |
| 20        | 17.65                 | 2.09E+07        | 0.06         | cis-Limonene Oxide                   | 63        |
| 21        | 17.77                 | 2.89E+07        | 0.09         | trans-Limonene Oxide                 | 20        |
| 22        | 18.24                 | 1.20E+07        | 0.04         | $\beta$ -Citronellal                 | 79        |
| 23        | 19.54                 | 3.91E+07        | 0.12         | $\alpha$ -Terpineol                  | 53        |
| 24        | 19.85                 | 6.77E+07        | 0.21         | Decanal                              | 50        |
| 25        | 20.62                 | 2.84E+06        | 0.01         | cis-Carveol                          | 59        |
| 26        | 20.77                 | 6.33E+06        | 0.02         | Neral ( $\beta$ -Citral)             | 42        |
| 27        | 20.95                 | 1.20E+07        | 0.04         | D-Carvone                            | 76        |
| 28        | 21.61                 | 7.33E+06        | 0.02         | Geranial ( $\alpha$ -Citral)         | 78        |
| 29        | 21.85                 | 3.19E+06        | 0.01         | Perillal                             | 35        |
| 30        | 24.58                 | 7.50E+06        | 0.02         | Isodauca-6,9-diene                   | 83        |
| 31        | 25.75                 | 7.61E+06        | 0.02         | $\beta$ -Caryophyllene               | 59        |
| 32        | 26.00                 | 9.11E+06        | 0.03         | cis-Muurola-3,5-diene                | 84        |
| 33        | 27.20                 | 2.41E+06        | 0.01         | $\gamma$ -Amorphene                  | 68        |
| 34        | 27.43                 | 2.85E+07        | 0.09         | Valencene                            | 71        |
| 35        | 27.88                 | 6.31E+06        | 0.02         | $\delta$ -Cadinene                   | 59        |
| 36        | 28.90                 | 1.97E+06        | 0.01         | Caryophyllene oxide                  | 75        |
| 37        | 30.23                 | 2.51E+06        | 0.01         | $\beta$ -Sinensal                    | 65        |
| 38        | 31.34                 | 2.09E+06        | 0.01         | Nootkatone                           | 40        |

Figure 1 – Chromatogramme TIC-GC/MS d'huile essentielle d'Orange (ORA501C150037) 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.

