

				Pourcentages Analyse ▼	Essai de formulation : →		lavandin	terebanthine	citron	cannelle	sauge	cloude girofle	Tea Tree
							23.2%	12.5%	10.1%	7.9%	5.0%	35.1%	6.2%
#	Name	Time [Min]	Qc H Area [µV.Min]	Area % [%]	Reformulé	Ecart							
1	alpha-pinène	8.68	0 #	1429.3	9.965	9.68	0.08	75.45			5		
2	UNKNOWN	10.07	0 #	131.8	0.919	0.00	0.84						
3	beta-pinene	10.14	0 #	568.6	3.964	1.94	4.11	3	12.33				
4	Myrcène	10.6	0 #	50.4	0.351	0.00	0.12						
5	Bêta-pinène	10.73	0 #	73.5	0.512	1.85	1.79	14.82					
6	alpha-phellandrène	11.53	0 #	54.6	0.381	0.00	0.15						
7	p-cymene	11.79	0 #	155.9	1.087	0.00	1.18						
8	Limonene	11.92	0 #	847.4	5.908	6.09	0.03	4.5	55				
9	eucalyptol	12.01	0 #	177.3	1.236	0.00	1.53						
10	trans-beta ocymene	12.3	0 #	72.8	0.508	0.00	0.26						
11	UNKNOWN	12.62	0 #	88.3	0.616	0.00	0.38						
12	gamma terpinene	12.92	0 #	217.8	1.518	2.58	1.13		14				19
13	UNKNOWN	13.06	0 #	59.2	0.413	0.00	0.17						
14	linalol	14.27	0 #	1291	9.001	9.25	0.06	39.83					
15	Thujone	14.39	0 #	267.6	1.866	1.50	0.14				30		
16	Camphor	15.55	0 #	181.6	1.266	1.96	0.49	4.59			18		
17	Borneol	16.22	0 #	80.9	0.564	0.63	0.00	2.73					
18	terpinène-4-ol	16.56	0 #	400.1	2.789	2.29	0.25						37
19	alpha-terpineol	16.96	0 #	106.2	0.74	0.19	0.31						3
20	linalyl-acétate	18.81	0 #	1058.8	7.382	7.03	0.12	30.26					
21	trans-cinnamaldehyde	19.16	0 #	565	3.939	3.95	0.00			50			
22	formate de citronnelly	19.76	0 #	123.4	0.86	0.00	0.74						
23	UNKNOWN	19.82	0 #	109.7	0.765	0.00	0.59						
24	Thymol	20.06	0 #	270.8	1.888	0.00	3.56						
25	Eugénol	21.5	0 #	4352.6	30.344	30.27	0.01			5		85	
26	bêta-caryophyllène	23.07	0 #	605.6	4.222	4.90	0.45	5	1.76			10	
27	UNKNOWN	23.9	0 #	69.2	0.482	0.00	0.23						
28	Thujopsène	23.96	0 #	109.8	0.765	0.00	0.59						
29	alpha-patchoulène	24.56	0 #	161.2	1.124	0.00	1.26						
30	bêta-funébrène	25.61	0 #	361.5	2.52	0.00	6.35						
31	Acétate d'eugényle	26.41	0 #	90.5	0.631	0.35	0.08					1	
32	UNKNOWN	35.58	0 #	109.4	0.762	0.00	0.58						
33	UNKNOWN	35.72	0 #	102.1	0.712	0.00	0.51						
	beta thuyone										6		
	camphene										6		
Minimiser:													
Total		0 #	14343.9	100.00	84.45	28.11	85.41	96.53	81.33	55	65	96	59

Pour tenter de reconstituer le produit analysé, on utilise le solveur XL, qui calcule des proportions des différentes HE, de manière à minimiser l'écart de reformulation avec le produit analysé.

Sources des infos concernant les HE:

<https://revelessence.com/huile/ girofler-clou/>

Eugénol : 80 à 90 %

Béta-caryophyllène : 5 à 15 %

Acétate d'eugényle : <1%

<https://revelessence.com/huile/lavandin-super/>

Acétate de linalyle : 40 à 45 %

Linalol : 30 %

Béta-caryophyllène : 5 %

Camphre : 5%

<https://revelessence.com/huile/cannelle-ecorce/>

Cinnamaldéhyde : 50 à 60 %

Eugénol : 1 à 10 %

<https://revelessence.com/huile/sauge-despagne/>

Camphre : 20 à 30%

1-8 cinéole : 20 à 25%

Alpha pinène : 10%

<https://revelessence.com/huile/citronnier/>

Limonène : 50 à 60 %

Béta-pinène : 10 à 16 %

Gamma-terpinène : 13 à 15 %

<https://revelessence.com/huile/tea-tree/>

Terpinène-4-ol : 35 à 40 %

Gamma-terpinène : 18 à 20 %

Alpha-terpinène : 10%

Alpha-terpinéol : 3 %

1,8 Cinéole : < 15 %

Nom	Time [Min]	%
alpha-pinène	8,68	9,965
inconnu	10,07	0,919
beta-pinene	10,14	3,964
Myrcène	10,6	0,351
Bêta-pinène	10,73	0,512
alpha-phellandrène	11,53	0,381
p-cymene	11,79	1,087
Limonene	11,92	5,908
eucalyptol	12,01	1,236
trans-beta ocymene	12,3	0,508
inconnu	12,62	0,616
gamma terpinene	12,92	1,518
inconnu	13,06	0,413
linalol	14,27	9,001
Thujone	14,39	1,866
Camphor	15,55	1,266
Borneol	16,22	0,564
terpinène-4-ol	16,56	2,789
alpha-terpineol	16,96	0,74
linalyl-acétate	18,81	7,382
trans-cinnamaldehyde	19,16	3,939
formate de citronnellyle	19,76	0,86
inconnu	19,82	0,765
Thymol	20,06	1,888
Eugénol	21,5	30,344
bêta-caryophyllène	23,07	4,222
inconnu	23,9	0,482
Thujopsène	23,96	0,765
alpha-patchoulène	24,56	1,124
bêta-funébrène	25,61	2,52
Acétate d'eugényle	26,41	0,631
inconnu	35,58	0,762
inconnu	35,72	0,712
TOTAL		100

teneur en eau KF volumetrique

le 29/06/2016

rep	%
1	89.9
2	87.35

moy 88.6

sur environ 20 mg

par décantation d'ensemble de l'échantillon

ml

vol total 6.6

vol eau 5.2

78.8

I. Objectifs

l'objectif est d'identifier les composants majoritaires d'un mélange d'huiles essentielles et de les semi-quantifier.

II. Appareillage et mode opératoire.

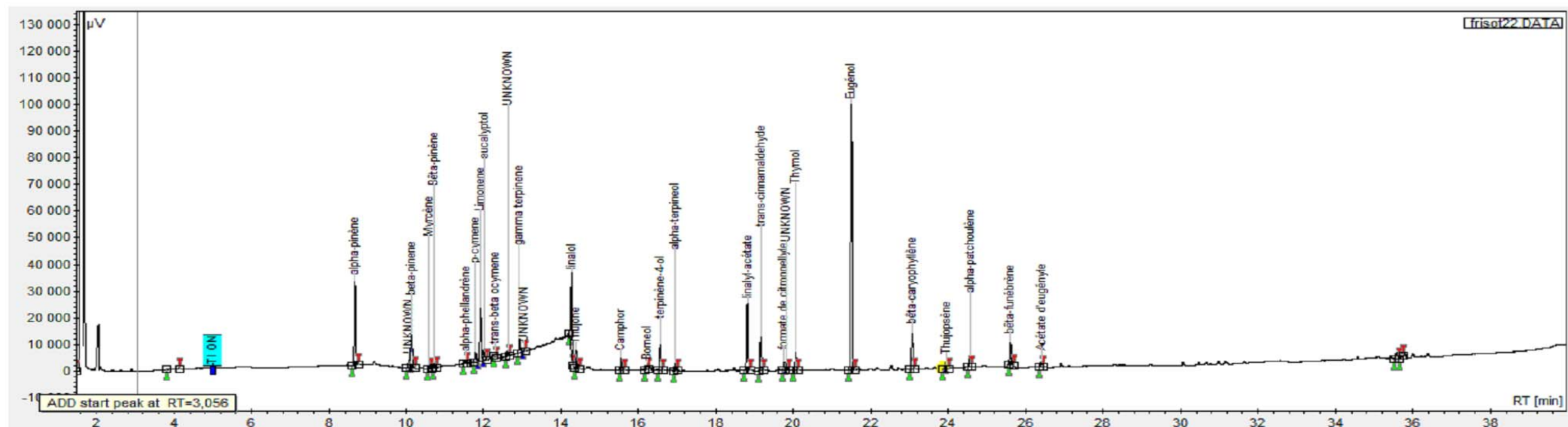
Environ 100 mg de l'échantillon (émulsion non stabilisée comportant une phase aqueuse et une phase organique) sont solubilisées dans 2 mL de méthanol. La solution est filtrée sous $0.45\mu\text{m}$ puis injecté en GC/MS et en GC/FID.

L'analyse des composés volatils et semi-volatils a été faite de la manière suivante : on introduit $1\mu\text{L}$ de la solution dans un chromatographe Clarus 580 équipé d'un injecteur splitless ($T=280^\circ\text{C}$), d'une colonne capillaire ZB5MS (30 m, diamètre $0,25\text{mm}$, $df\ 0,25\mu\text{m}$) couplée à un spectromètre de masse de type quadrupole SQ8. Le four de la colonne est programmé de la manière suivante : 50°C 5 min, puis $5^\circ\text{C}/\text{min}$ jusqu'à 300°C puis 300°C pendant 5 min

L'identification des produits a été faite par comparaison du spectre de masse du pic avec la bibliothèque de spectre du NIST03 (National Institute of science and Technology) et à l'aide de standards injectés.

Une injection dans les mêmes conditions chromatographiques est faite sur un système GC/FID Bruker 436. La détection en ionisation de flamme permet une semi-quantification des composés

III. Chromatogramme



Chromatogramme de l'échantillon en GC/FID

IV. Résultats

L'échantillon comporte une grande quantité de glycérine qui n'a pas été quantifié. On peut supposer que le mélange est constitué d'eau, de glycérine et d'un mélange d'huiles essentielles. Seules les huiles essentielles ont été semi-quantifiées. Les pourcentages dans le tableau ci-dessous indiquent les proportions des composés uniquement dans la partie huile essentielle. Les produits sont quantifiés en considérant un facteur de réponse identique pour chaque produit (semi-quantification).