Centre Indépendant Analytika
Zac des Bousquets 130 Rue de l'Innovation / 19 Rue de la Création
83390 CUERS (France)
Tel: 33 (0) 4 2244 0768 / (0) 6 1866 7432
info@analytika.fr http://www.analytika.fr

Date : 27 novembre 2016

Objet : Dépistage systématique GC/MS sur échantillons d'aiguilles de pins d'Alep, respectivement sains et malades à proximité de la décharge VALSUD de Septèmes-les-Vallons.

CONCLUSIONS

l'étude GC/MS comparative de la composition chimique organique de deux échantillons d'aiguilles de pins provenant du voisinage de la décharge de Septèmes les Vallons, et respectivement :

- « **sains** » (prélevées sur arbres provenant de zones non-exposés aux émanations de la décharge par les vents dominants)
- « **malades** » (prélevées sur arbres provenant de zones exposées aux émanations de la décharge par les vents dominants)

est terminée.

Elle révèle d'importantes différences de teneurs pour **vingt (20) des composants chimiques** (séparés par chromatographie gaz capillaire et identifiés par spectrométrie de masse) présents dans les extraits de ces aiguilles de pins.

COMPARAISON des AIRES de PICS CHROMATOGRAPHIQUES

Temps de rétention (minutes)	Extrait végétal		Extrait végétal après méthylation « in-situ »	
	Fichier 0511-01A.TIC (pins « sains »)	Fichier 0511-02A.TIC (pins « malades »)	Fichier 0511-01B.TIC (pins « sains »)	Fichier 0511-02B.TIC (pins « malades »)
16,07	2898218	0		
16,66			3050245	0
17,67			3326	0
17,79	2835	0		
18,51			11643	0
18,59	16598	0		
19,77	2471	0		
19,94	996	0		
23,34			28082	0
27,25			11431	0
27,41	13714	0		
29,1	30674	0		
29,43	4047	0		
32,66	9847	0		
37,49			42605	0
70,26			5454	0
70,93			2226	0
72,19			3194	0
73,91	158330	0		
74,33			53658	0

Notre investigation démontre une profonde modification du métabolisme végétal des pins situés à proximité et sous les vents dominants de la décharge, très vraisemblablement induite par les émanations chimiques du site d'enfouissement d'ordures de Septèmes les Vallons (la forte teneur en benzène de ces émanations a été démontrée, à plusieurs reprises depuis 2012, à l'occasion de prélèvements d'air atmosphérique sur divers capteurs atmosphériques passifs).

La toxicité du benzène vis à vis des végétaux est un phénomène connu, et il est donc extrêmement vraisemblable que la proximité de la décharge est à l'origine du dépérissement localisé observé sur la population de pins d'Alep de cette zone classée Natura 2000.

Bernard TAILLIEZ
Fondateur - Directeur scientifique
Responsable qualité

DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS

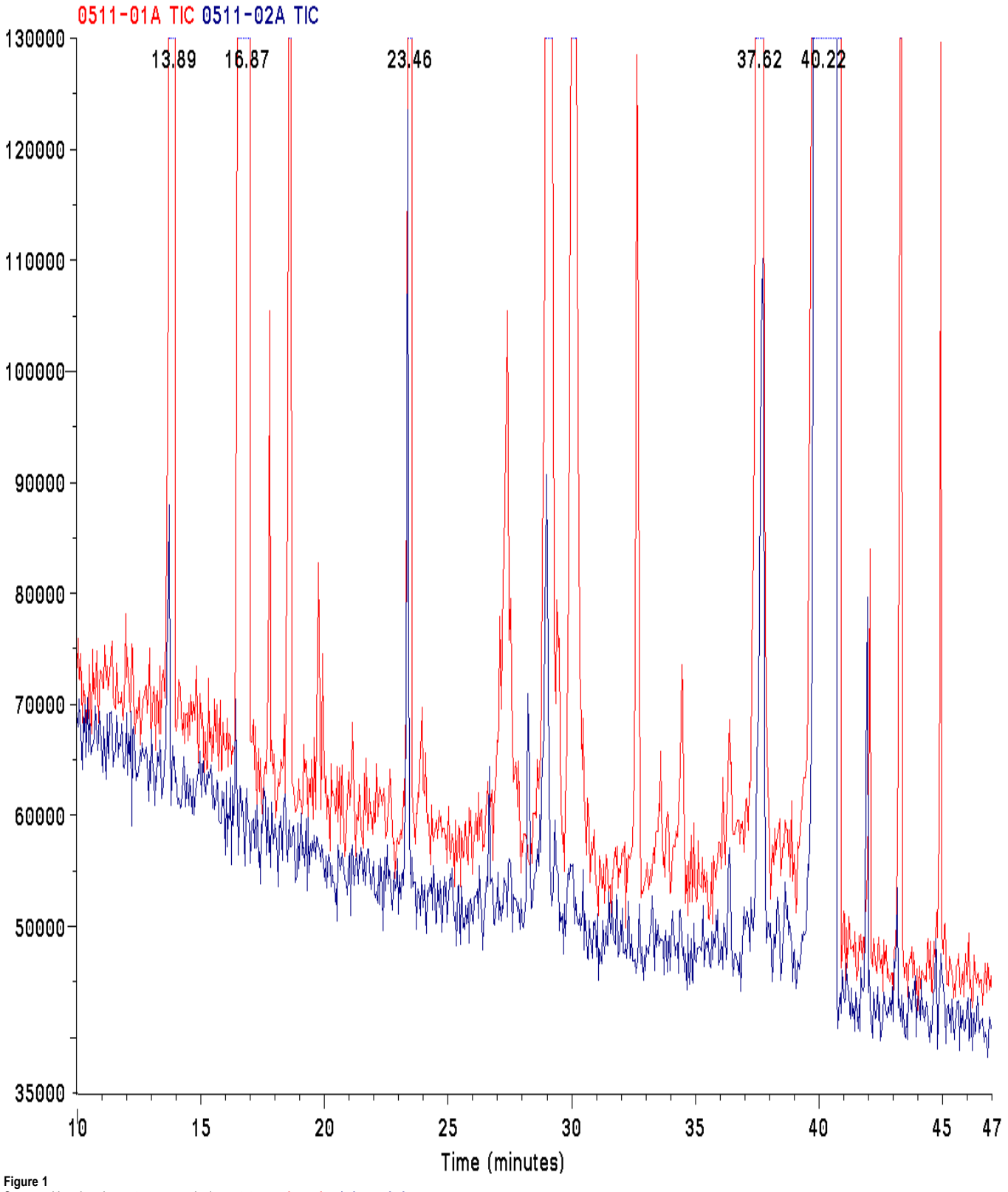


Figure 1
Superposition des chromatogrammes ioniques totaux : **pins sains** / **pins malades**

DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS

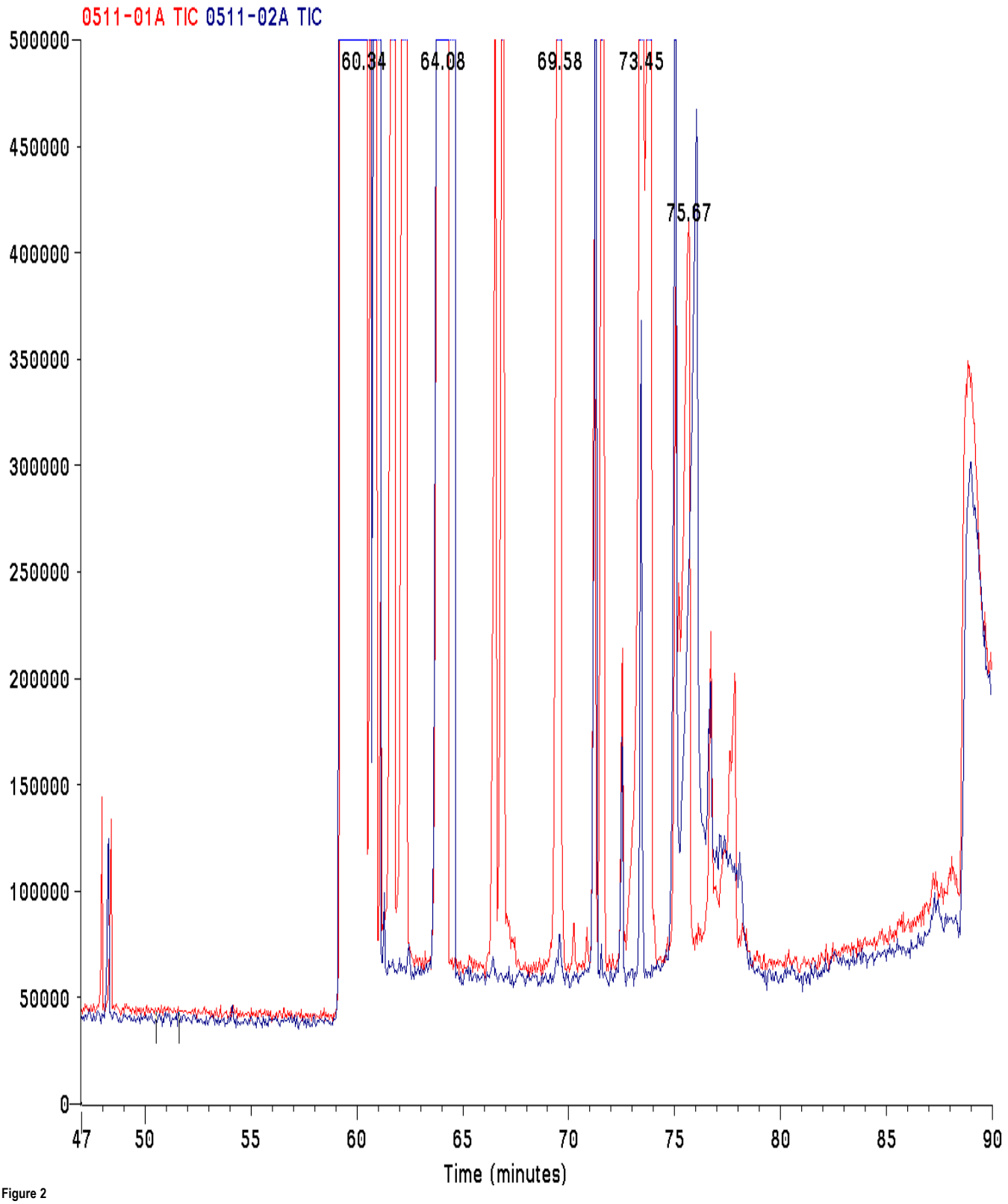


Figure 2
Superposition des chromatogrammes ioniques totaux (après méthylation « in-situ ») : **pins sains / pins malades**

DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS

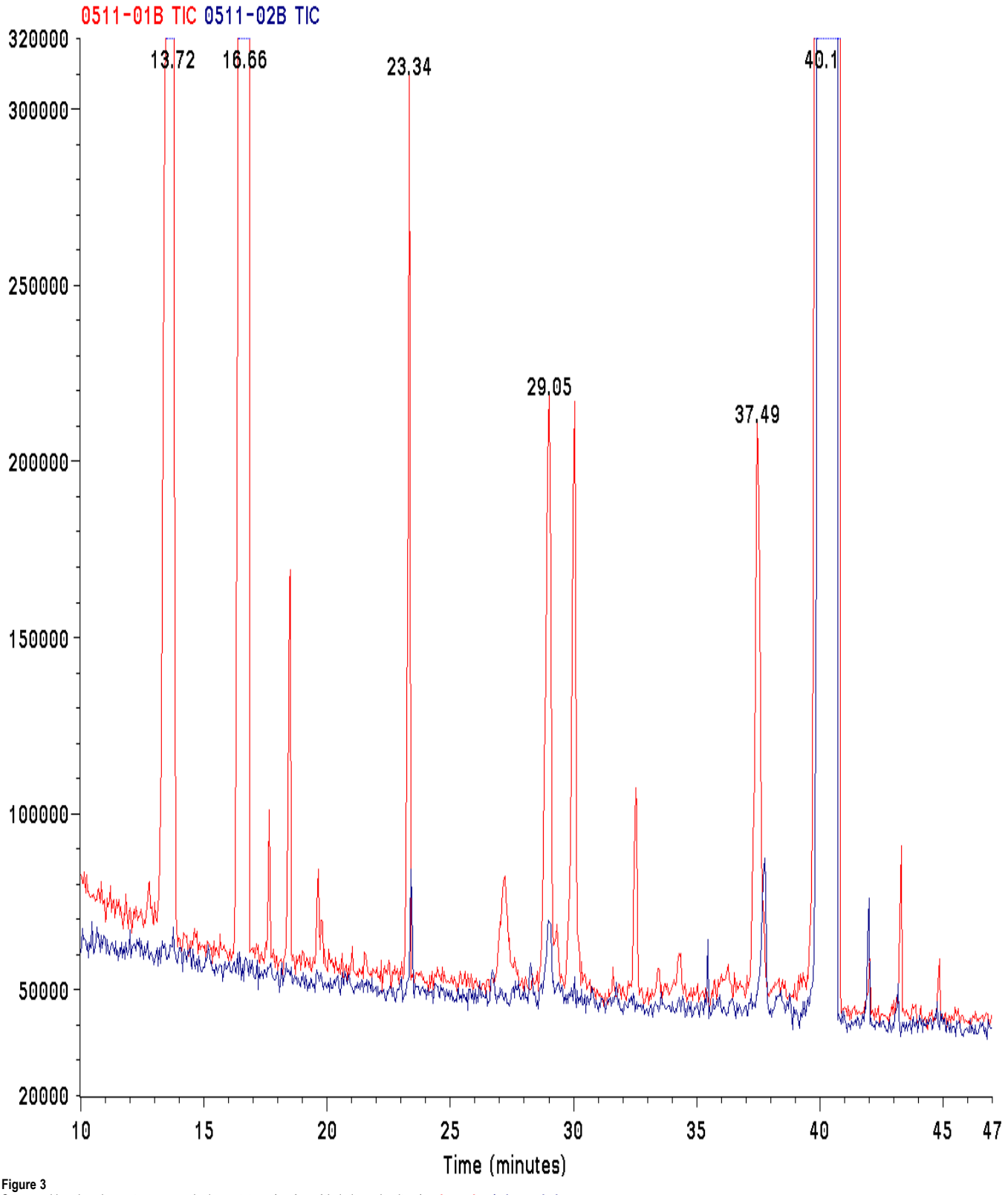


Figure 3
Superposition des chromatogrammes ioniques totaux (après méthylation « in-situ ») : **pins sains / pins malades**

DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS

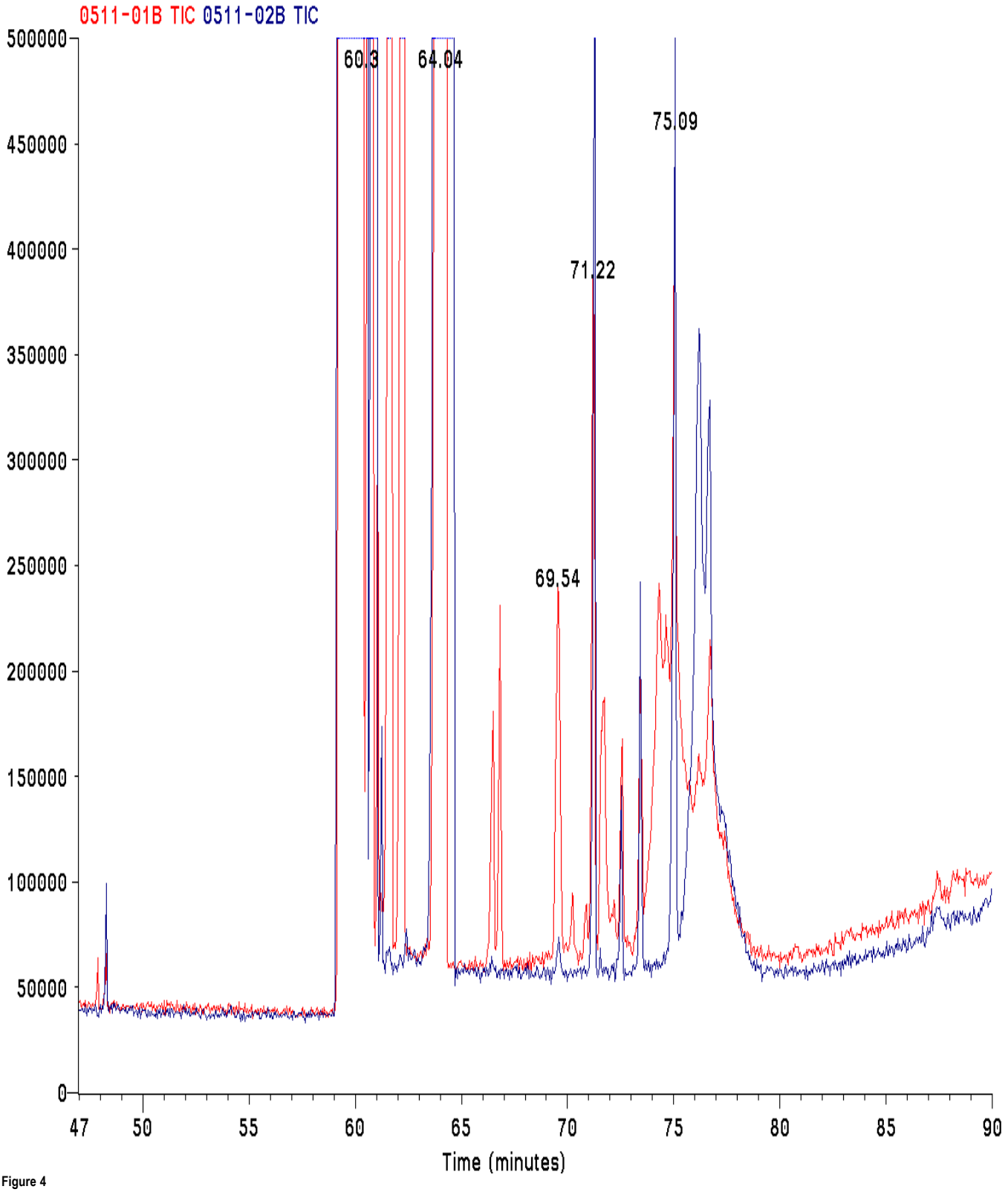


Figure 4
Superposition chromatogrammes ioniques totaux (après méthylation « in-situ ») : **pins sains** / **pins malades**

DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS

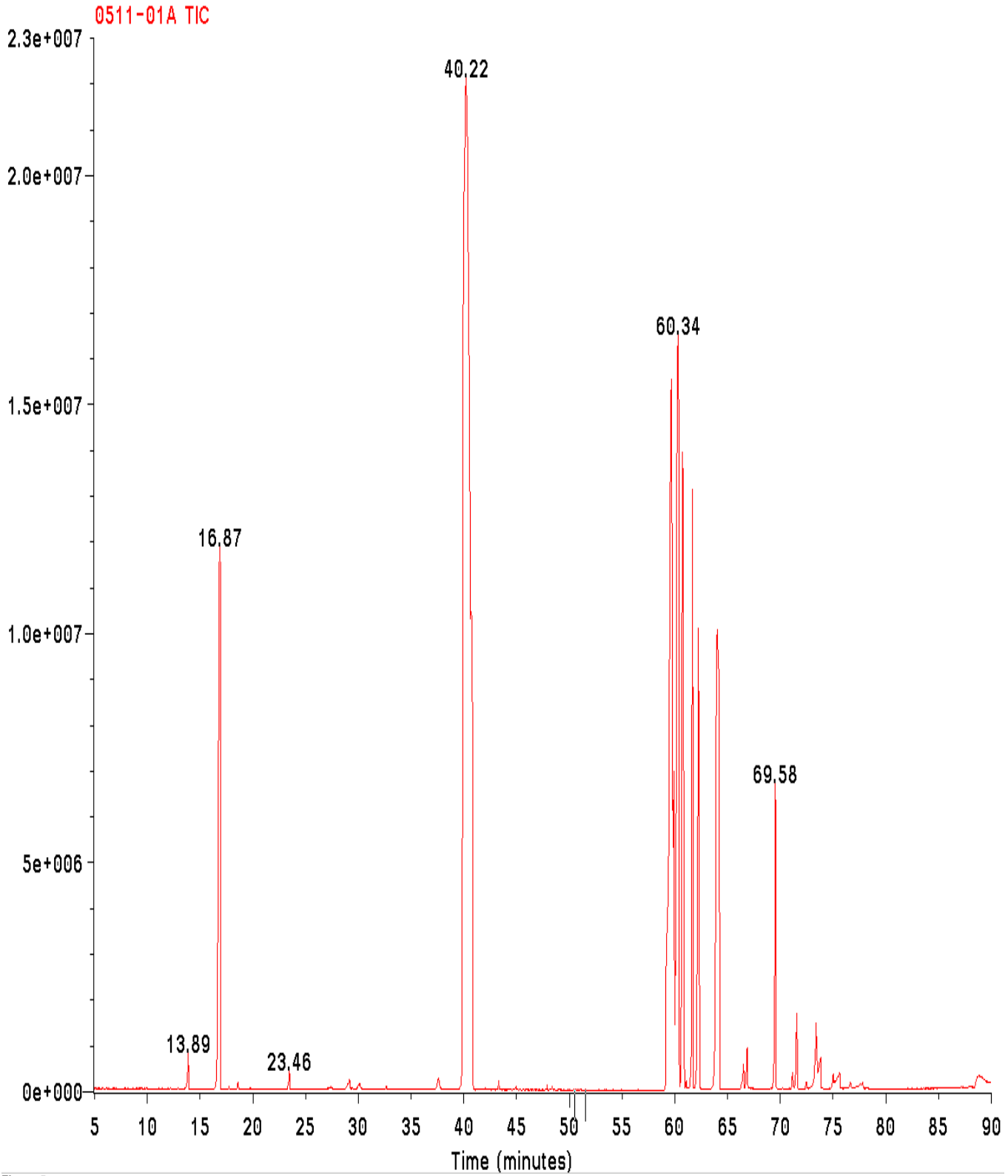


Figure 5
Chromatogramme ionique total **pins sains**

DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Résumé des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-01A.TIC

RT (min.)	Nom chimique CAS #
13.85-13.93	trans-ocimene
16.83	sabinene CAS #3387-41-5
23.46	1,7-octadiyne CAS #871-84-1
27.41	2H-Pyran, 2-(2,5-hexadiynyloxy)tetrahydro- CAS #40924-58-1
29.89-30.27	myrcenol CAS #543-39-5
37.62	trans-.beta.-ocimene CAS #3779-61-1
61.65-61.77	hexadecanoic acid, ethyl ester CAS #628-97-7
62.19-62.36	manoyl oxide CAS #596-84-9
66.48-66.60	4-(1,5-Dimethyl-4-hexenyl)-3-cyclohexen-1-one CAS #100572-83-6
66.94	(E)-4-[2-Methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-2-butenyl]-3-cyclohexen-1-one CAS #1139-30-6
71.56-71.68	2H-Pyran, 2-(7-heptadecynyloxy)tetrahydro- CAS #56599-50-9
73.83-73.91	trans-caryophyllene CAS #87-44-5

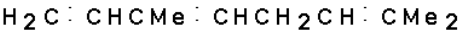
DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

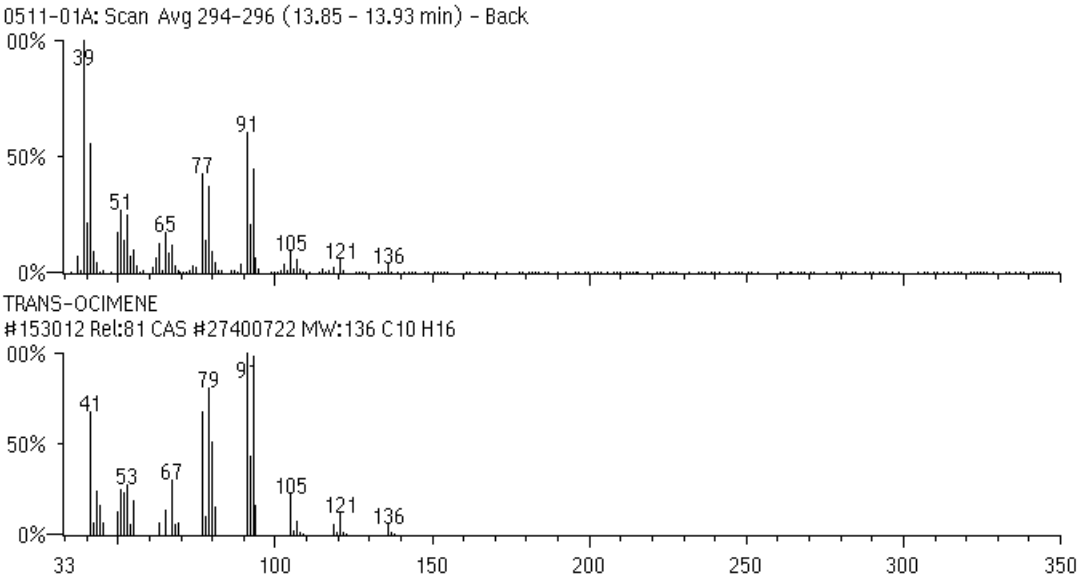
Fichier 0511-01A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
13.85-13.93		TRANS-OCIMENE



Serial #153012 CAS #27400722
MW 136 Quality 611
C10 H16



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

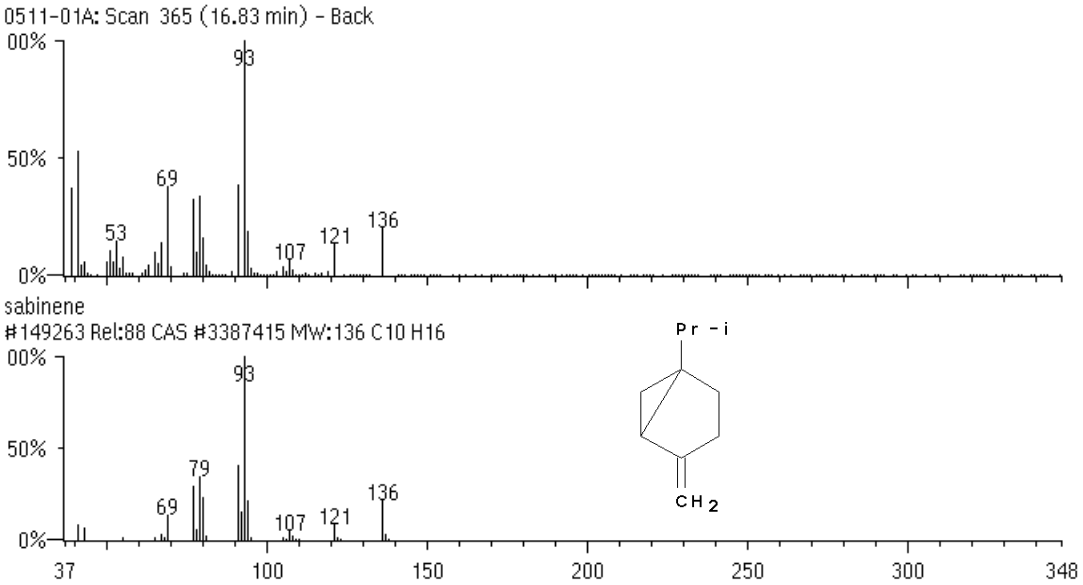
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-01A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
16.83		sabinene

Serial #149263 CAS #3387415
MW 136 Quality 491
C10 H16



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

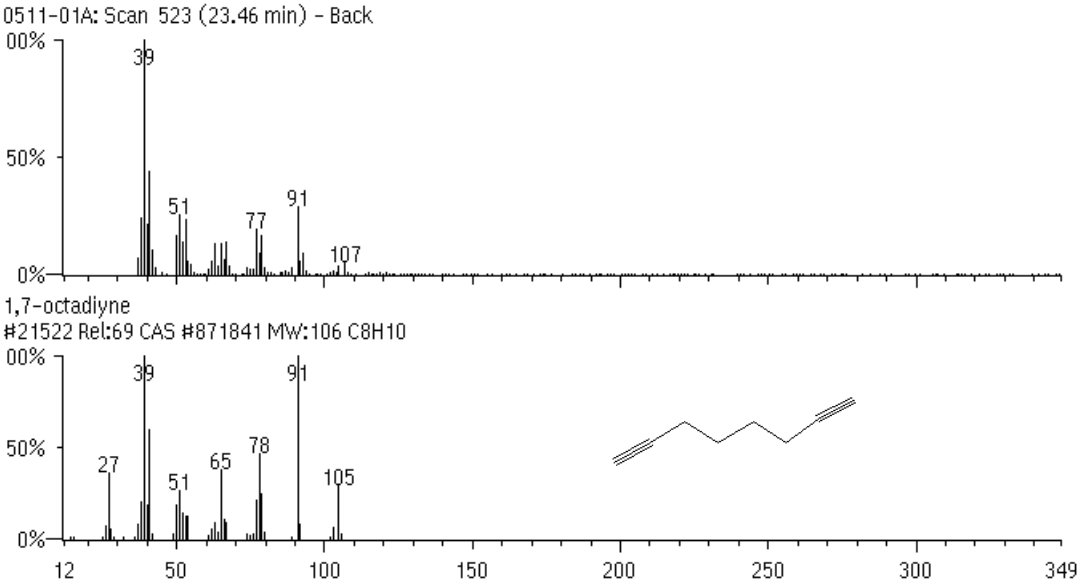
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-01A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
23.46		1,7-octadiyne

Serial #21522 CAS #871841
MW 106 Quality 483
C8H10



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

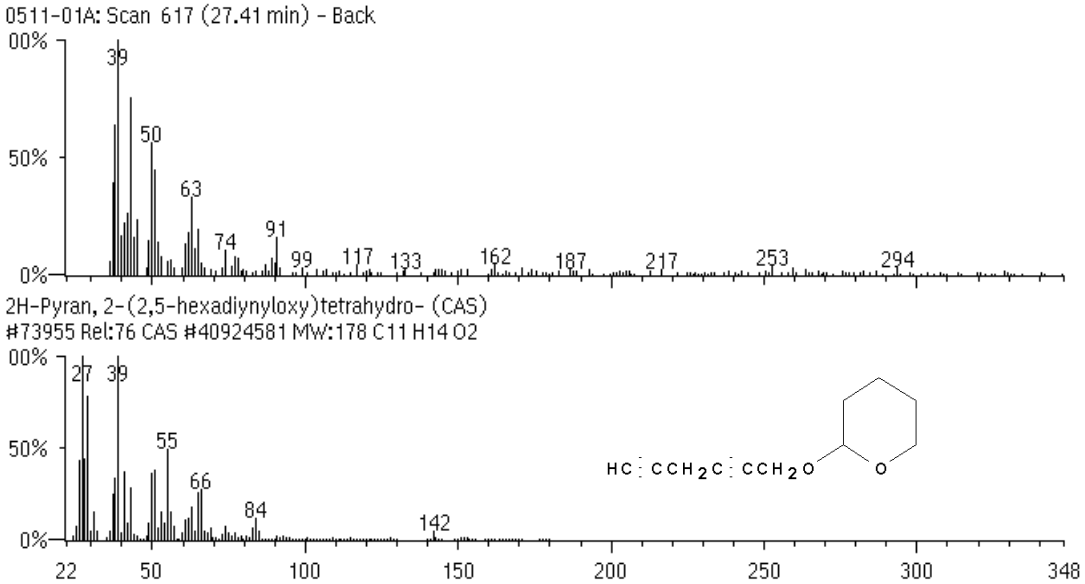
Fichier 0511-01A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
27.41		2H-Pyran, 2-(2,5-hexadiynyloxy)tetrahydro- (CAS)

2-(HEXA-2*,5*-DIYN-1*-OXY)-TETRAHYDROPYRAN

Serial #73955 CAS #40924581
MW 178 Quality 823
C11 H14 O2



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

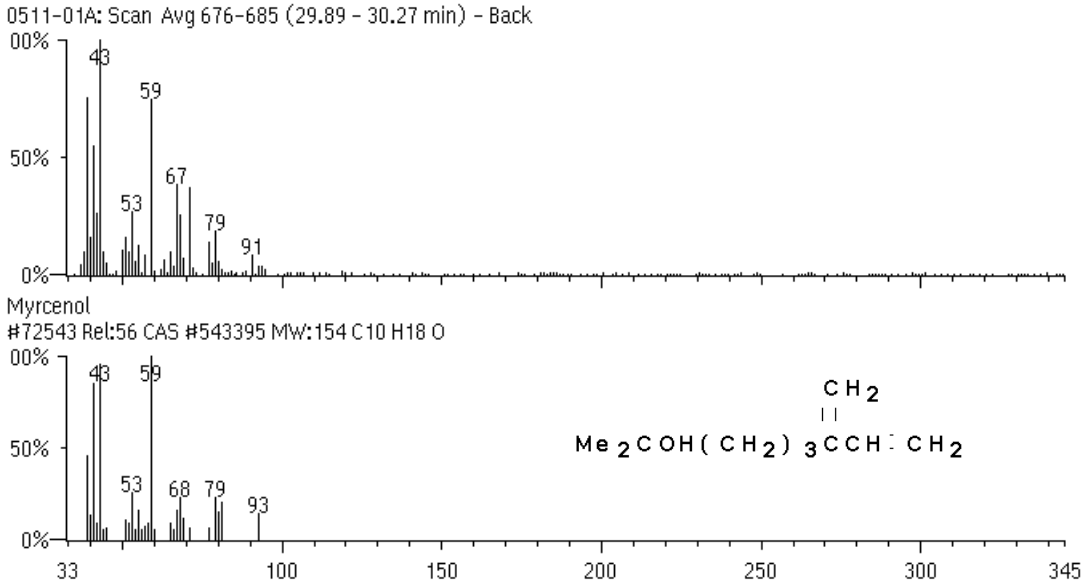
Fichier 0511-01A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
29.89-30.27		Myrcenol

7-Octen-2-ol, 2-methyl-6-methylene- (CAS)
2-Methyl-6-methylene-7-octen-2-ol
7-OCTENE-2-OL, 2-METHYL-6-METHYLENE-
2-myrcenol
7-Hydroxy-7-methyl-3-methylene-1-octene

Serial #72543 CAS #543395
MW 154 Quality 534
C10 H18 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

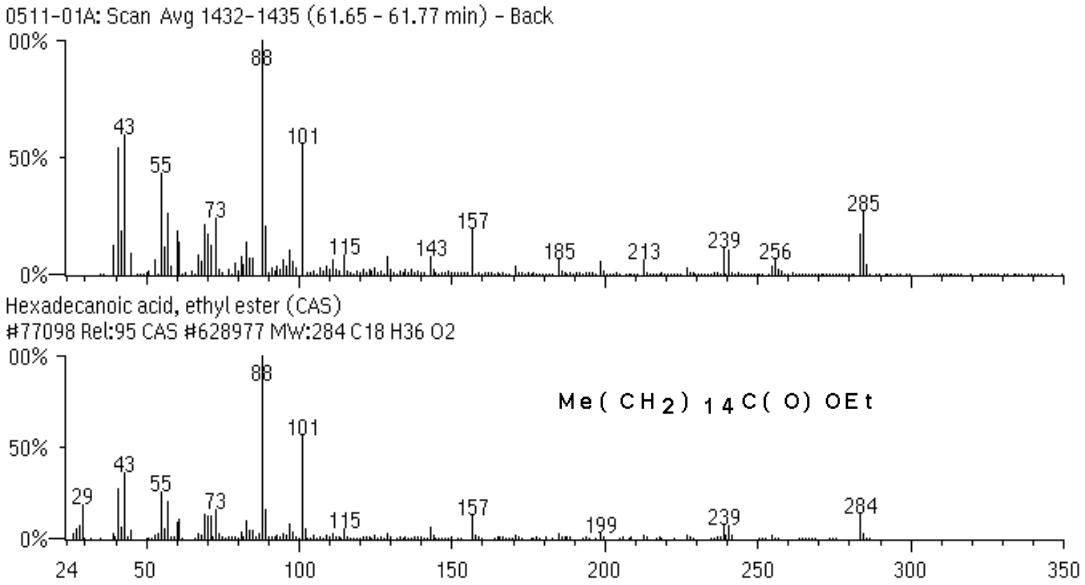
Fichier 0511-01A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
61.65-61.77		Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS)

Ethyl palmitate
HEXADECANOIC ACID ETHYL ESTER
Palmitic acid ethyl ester
Palmitic acid, ethyl ester
Ethyl hexadecanoate
ETHYL CETYLATE

Serial #77098 CAS #628977
MW 284 Quality 984
C18 H36 O2



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

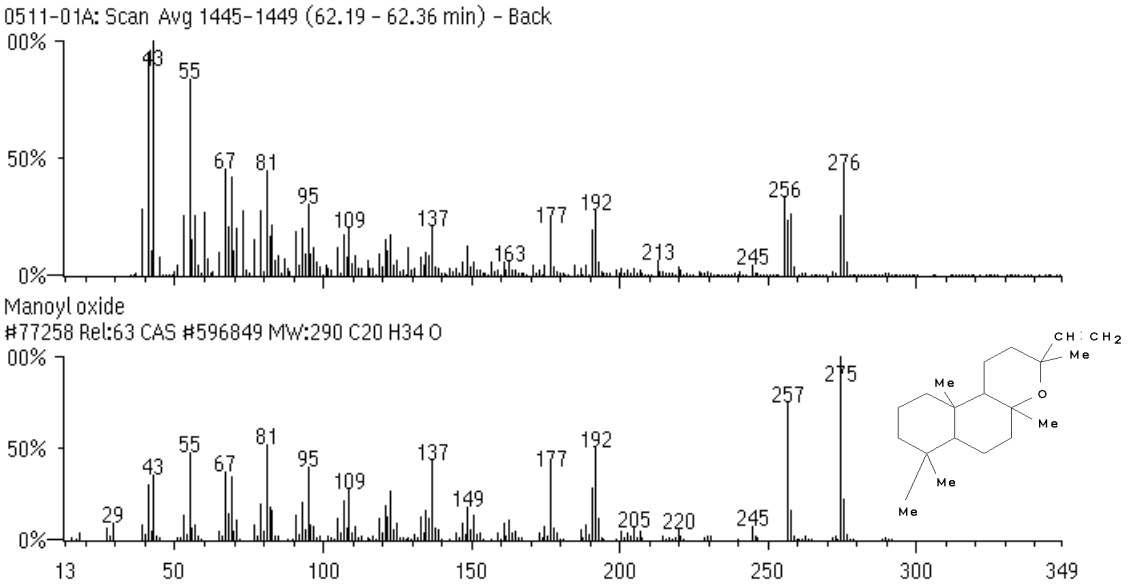
Fichier 0511-01A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques

62.19-62.36 **Manoyl oxide**
1H-Naphtho[2,1-b]pyran, 3-ethenyldodecahydro-3,4a,7,7,10a-pentamethyl-, [3R-(3.alpha.,4a.beta.,6a.alpha.,10a.beta.,10b.alpha.)]- (CAS)
8.alpha.,13-Epoxylabd-14-ene
Labd-14-ene, 8,13-epoxy-, (13R)-

Serial #77258 CAS #596849
MW 290 Quality 841
C20 H34 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

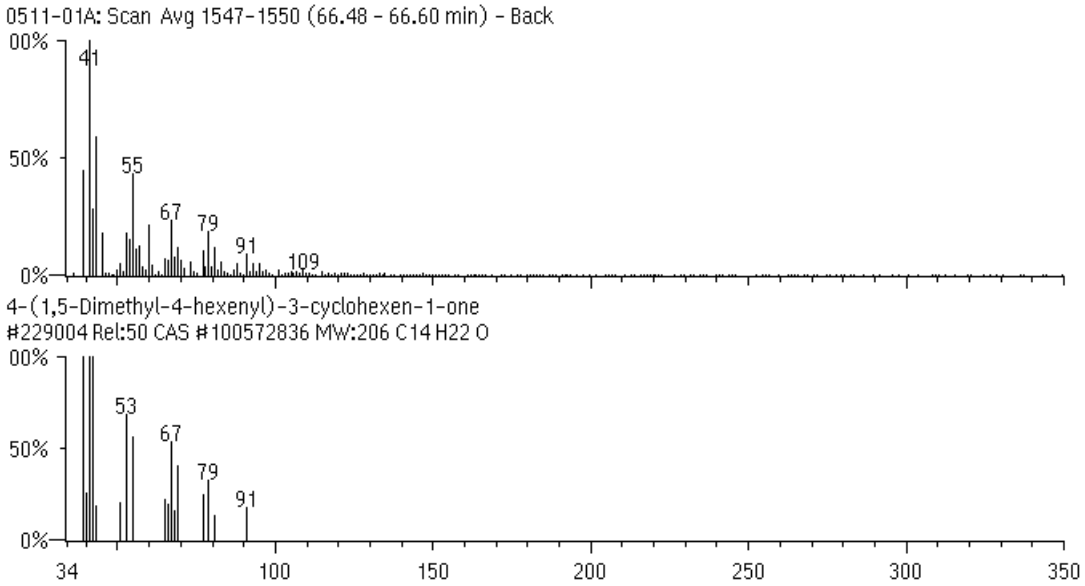
Fichier 0511-01A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
66.48-66.60		4-(1,5-Dimethyl-4-hexenyl)-3-cyclohexen-1-one

3-Cyclohexen-1-one, 4-(1,5-dimethyl-4-hexenyl)-, (.+-.)-

Serial #229004 CAS #100572836
MW 206 Quality 280
C14 H22 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

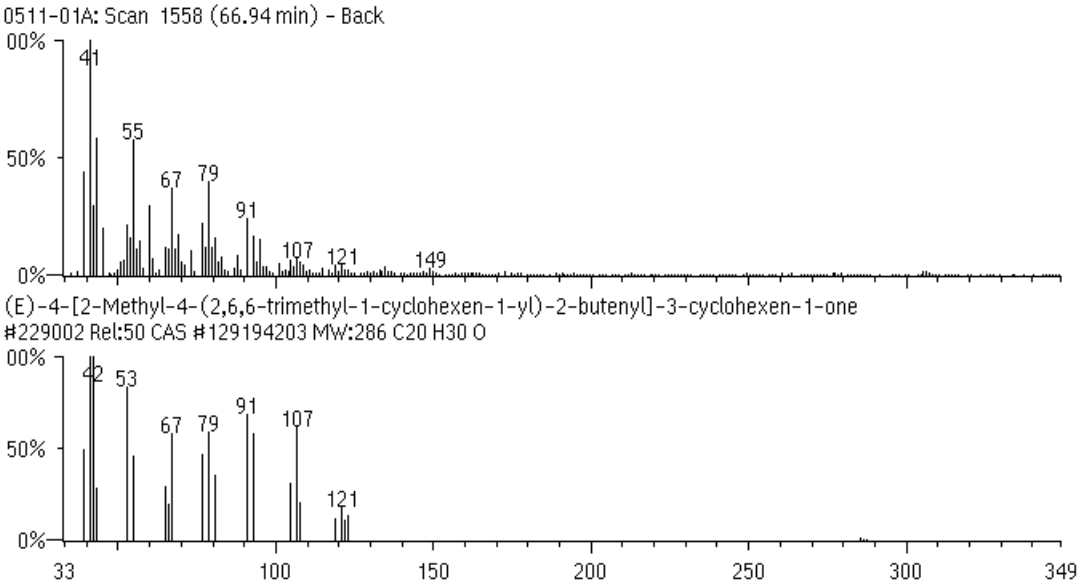
Fichier 0511-01A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
66.94		(E)-4-[2-Methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-2-butenyl]-3-cyclohexen-1-one

3-Cyclohexen-1-one, 4-[2-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-2-butenyl]-, (E)-

Serial #229002 CAS #129194203
MW 286 Quality 306
C20 H30 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

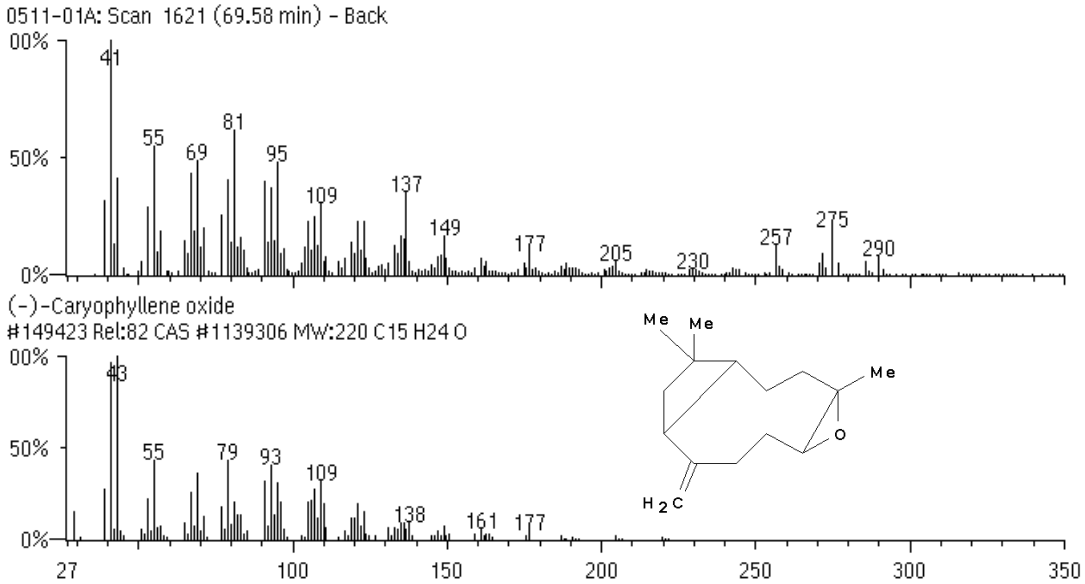
Fichier 0511-01A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
69.58		(-)-Caryophyllene oxide

(-)-5-Oxatricyclo[8.2.0.0(4,6)]dodecane,,12-trimethyl-9-methylene-, [1R-(1R*,4R*,6R*,10S*)]- (CAS)
(-)-.beta.-Caryophyllene epoxide
caryophyllene oxide
(-)caryophyllene oxide
5-Oxatricyclo[8.2.0.04,6]dodecane, 4,12,12-trimethyl-9-methylene-, [1R-(1R*,4R*,6R*,10S*)]-
.beta.-Caryophyllene oxide
.beta.-Caryophyllene epoxide
5-Oxatricyclo[8.2.0.04,6]dodecane, 4,12,12-trimethyl-9-methylene-, (1R,4R,6R,10S)-
(-)-Epoxydihydrocaryophyllene
(-)-.beta.-Caryophyllene oxide
Epoxycaryophyllene
Caryophyllene, epoxide

Serial #149423 CAS #1139306
MW 220 Quality 877
C15 H24 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

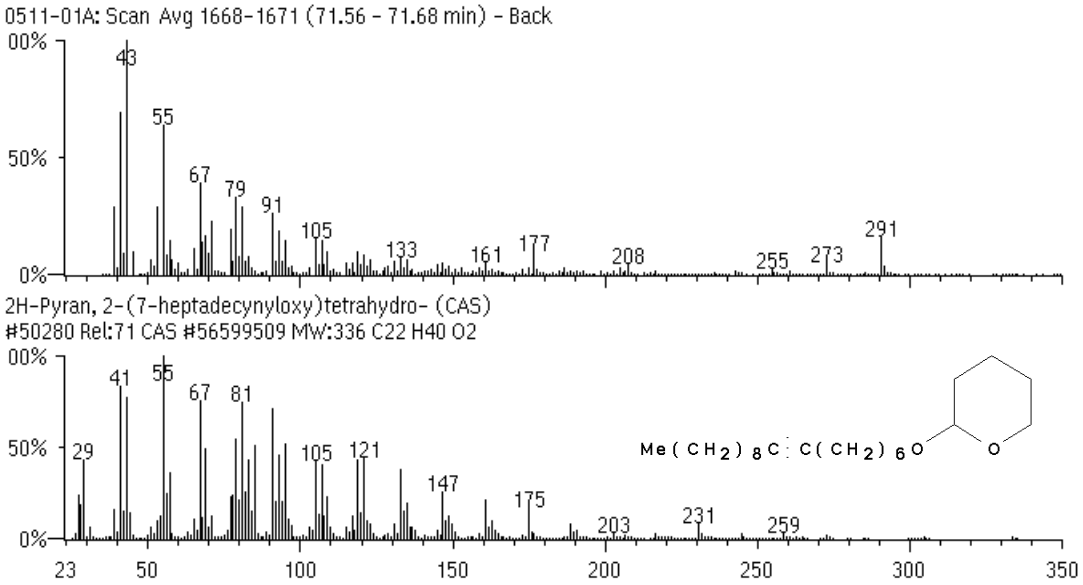
Fichier 0511-01A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
71.56-71.68		2H-Pyran, 2-(7-heptadecynyloxy)tetrahydro- (CAS)

2(HEPTADEC-7-YNYLOXY)TETRAHYDROPYRAN

Serial #50280 CAS #56599509
MW 336 Quality 900
C22 H40 O2



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

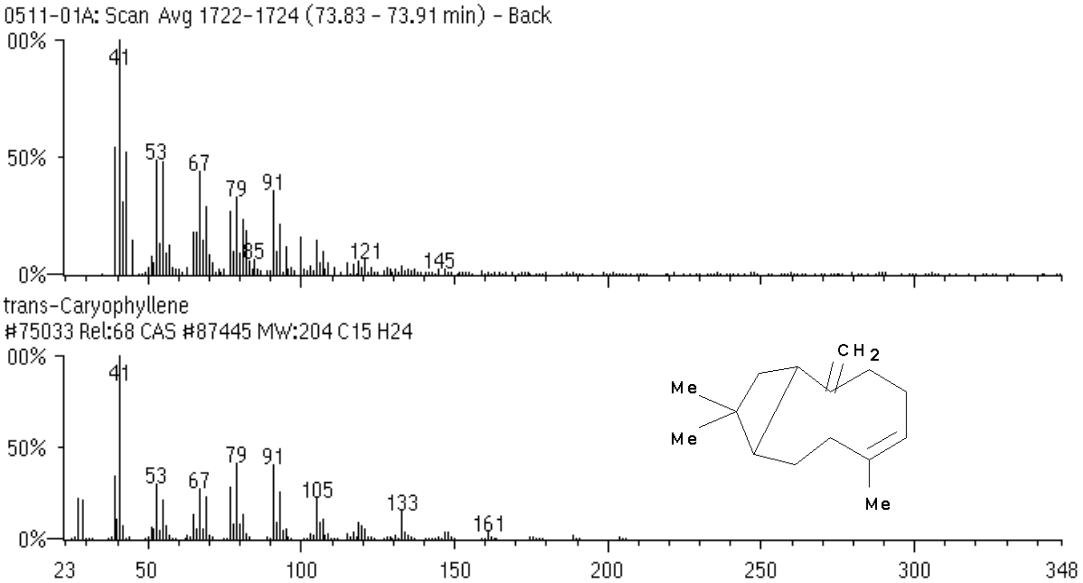
Fichier 0511-01A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques

73.83-73.91 **trans-Caryophyllene**
Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS)
l-Caryophyllene
(-)-Caryophyllene
Caryophyllene
.beta.-Caryophyllen
.beta.-Caryophyllene
.beta.-Caryophyllene, (-)
Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, (E)-(1R,9S)-(-)-
(-)-.beta.-Caryophyllene
CARYOPHYLLEN
BETA-CARYOPHYLLENE
4,11,11-trimethylbicyclo[7.2.0]undec-4-ene
.beta.-Caryophyllene,
(-)-trans-Caryophyllene

Serial #75033 CAS #87445
MW 204 Quality 900
C15 H24



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS

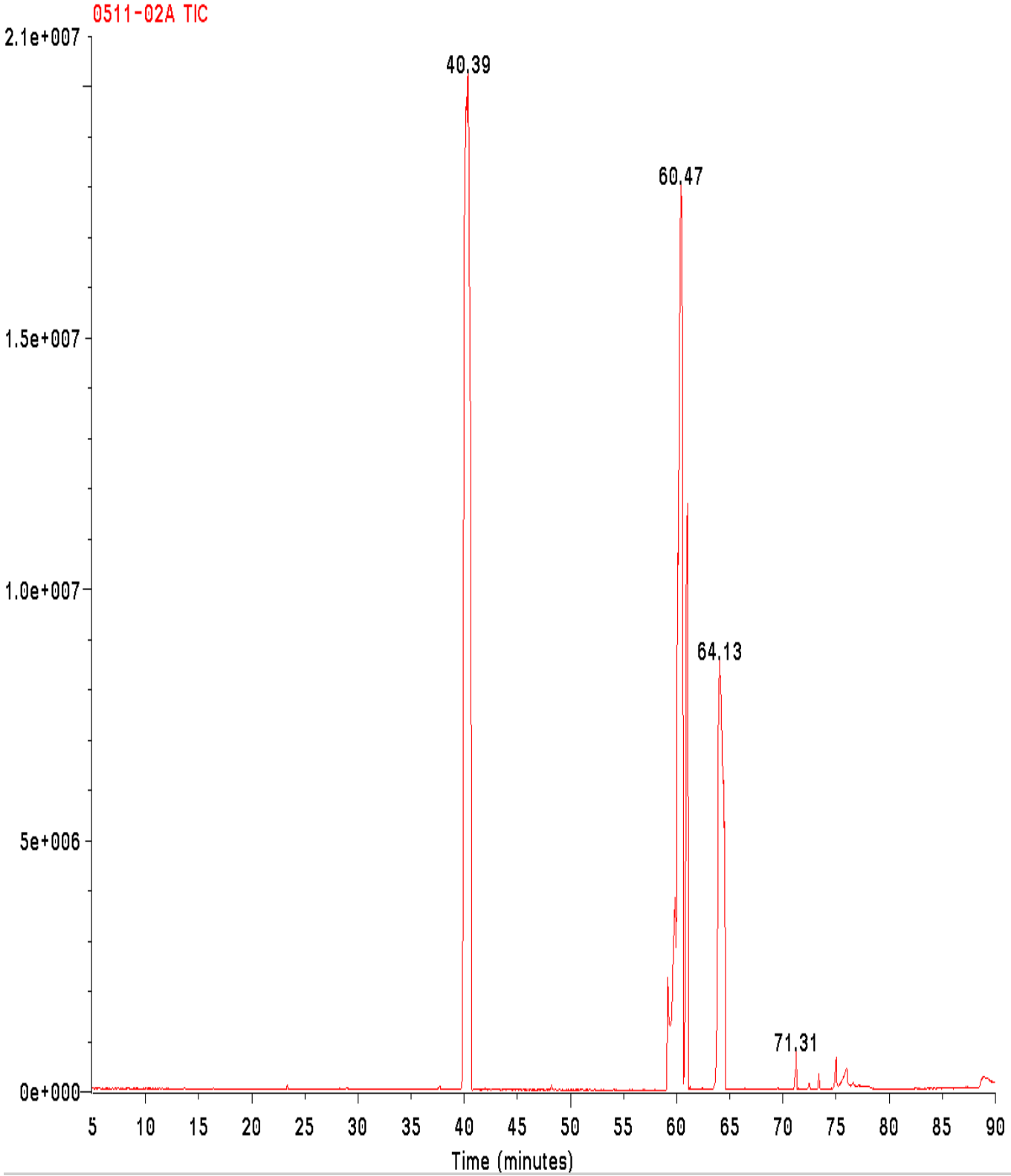


Figure 6
Chromatogramme ionique total **pins « malades »**.

DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Résumé des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-02A.TIC

RT (min.)	Aire	Nom chimique CAS #
13.72		furan CAS #110-00-9
23.30-23.46		6-carbomethoxybicyclo[4.3.0]non-2-en-4-one CAS #97644-98-9
26.70		3-butyn-1-ol CAS #927-74-2
28.21		2-propenal, 2-methyl- CAS #78-85-3
28.88-29.05		6-carbomethoxybicyclo[4.3.0]non-2-en-4-one CAS #97644-98-9
37.70-37.78		(3a.alpha.,4.alpha.7a.beta.)-4-ethenyl-1,3,3a,4,5,7a-hexhydroisobenzofuran CAS #0
40.18		trans-Caryophyllene CAS #
41.98		1-pentyne CAS #627-19-0
43.20		pyridazine, 3-methoxy- CAS #19064-65-4
48.16-48.33		2,4 pentadienal CAS #764-40-9
59.21		pentadecanoic acid, ethyl ester CAS #41114-00-5
59.67		bicyclo[4.1.0]heptane, 7-(1-methylethylidene)- CAS #53282-47-6
59.92		farnesyl acetate 1 CAS #0
60.13		pentadecanoic acid, 14-methyl-, methyl ester CAS #51296-02-
61.06		calarene CAS #17334-55-3
61.31		1,2-butadiene, 3-methyl- CAS #598-25-4
64.00-64.25		13,16-seco-D-nor-5.alpha.-androsta-13(18),15-diene CAS #31239-26-6
64.59		thunbergol CAS #0

DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

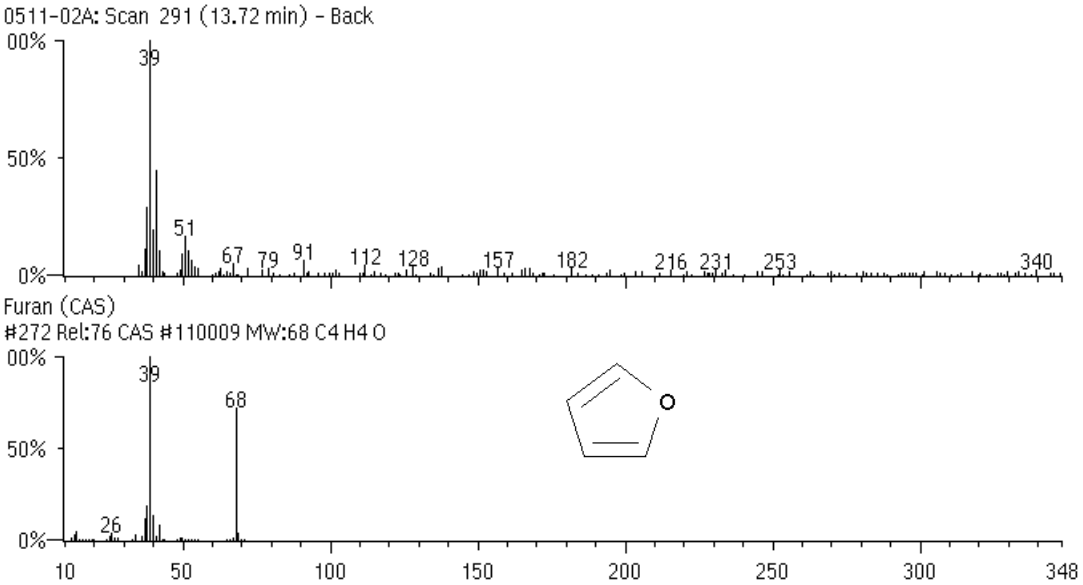
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
13.72	Furan (CAS)
Oxole	
Tetrole	
Furfuran	
Divinylene oxide	
Oxacyclopentadiene	

Serial #272 CAS #110009
MW 68 Quality 1000
C4 H4 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

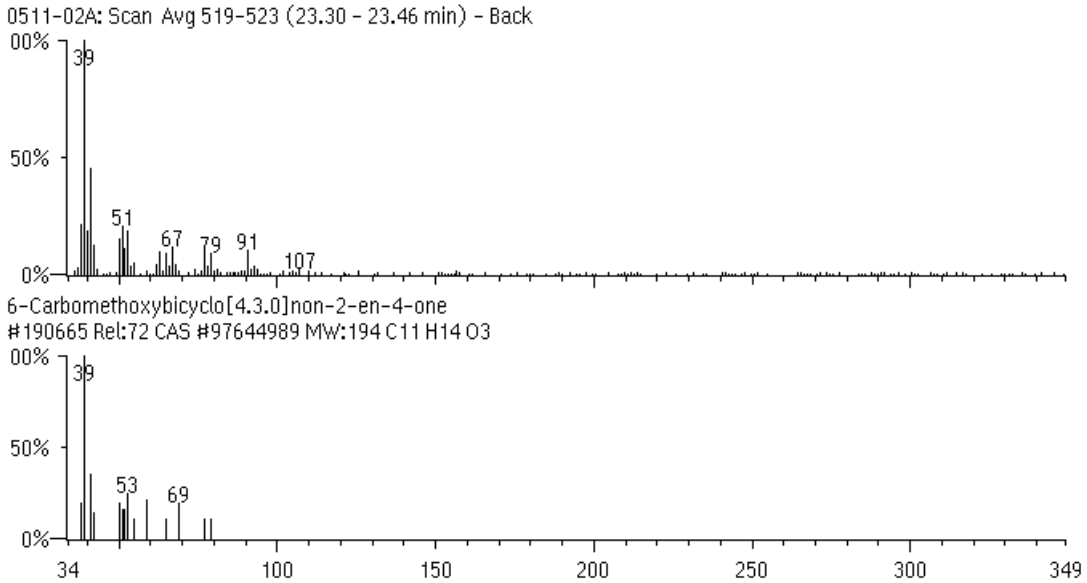
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
23.30-23.46	6-Carbomethoxybicyclo[4.3.0]non-2-en-4-one

Serial #190665 CAS #97644989
MW 194 Quality 309
C11 H14 O3



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

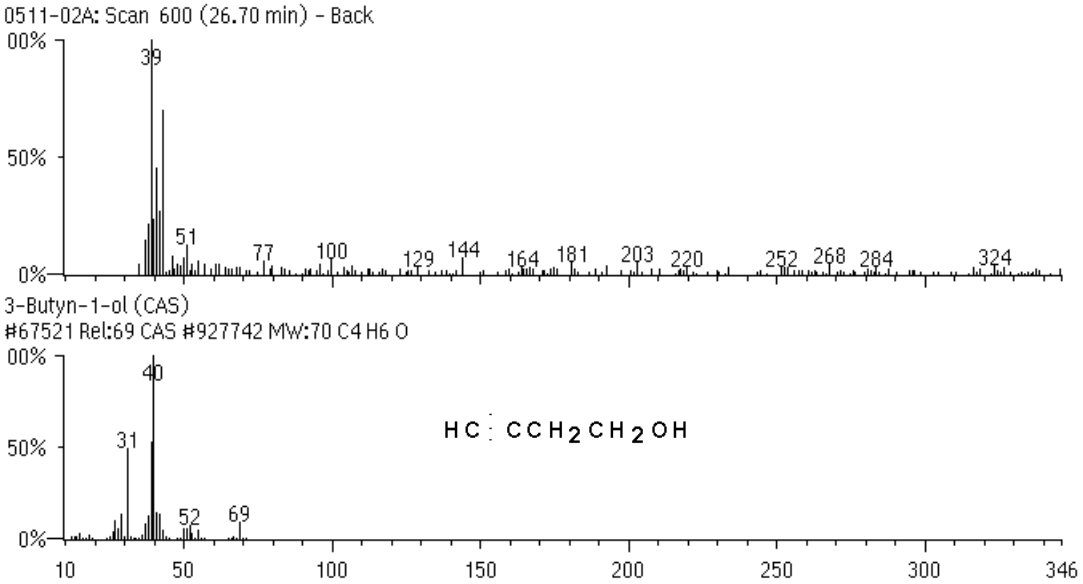
Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
26.70 3-	Butyn-1-ol (CAS)

3-Butynol
1-Butyn-4-ol
3-Butyne-1-ol
3-Butynyl alcohol
4-Hydroxy-1-butyne
2-Hydroxyethylacetylene
(2-Hydroxyethyl)acetylene
1-Hydroxy-3-butyne

Serial #67521 CAS #927742
MW 70 Quality 733
C4 H6 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

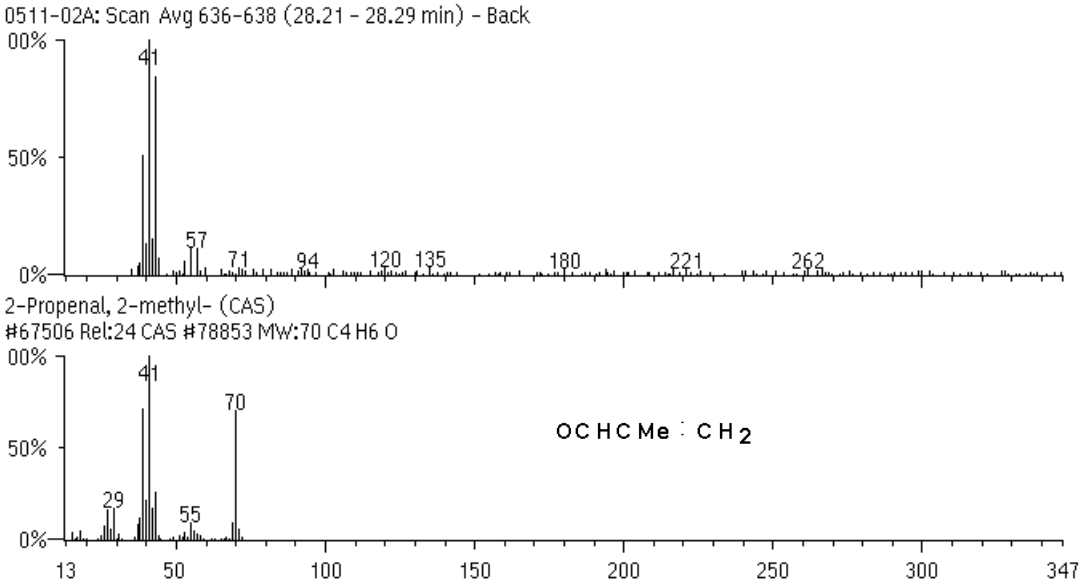
Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
28.21	2-Propenal, 2-methyl- (CAS)

2-Methylpropenal
Isobutenal
Methacrolein
2-Methylacrolein
Methacrylaldehyde
Methylacrylaldehyde
Methacrylic aldehyde
.alpha.-Methylacrolein

Serial #67506 CAS #78853
MW 70 Quality 274
C4 H6 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

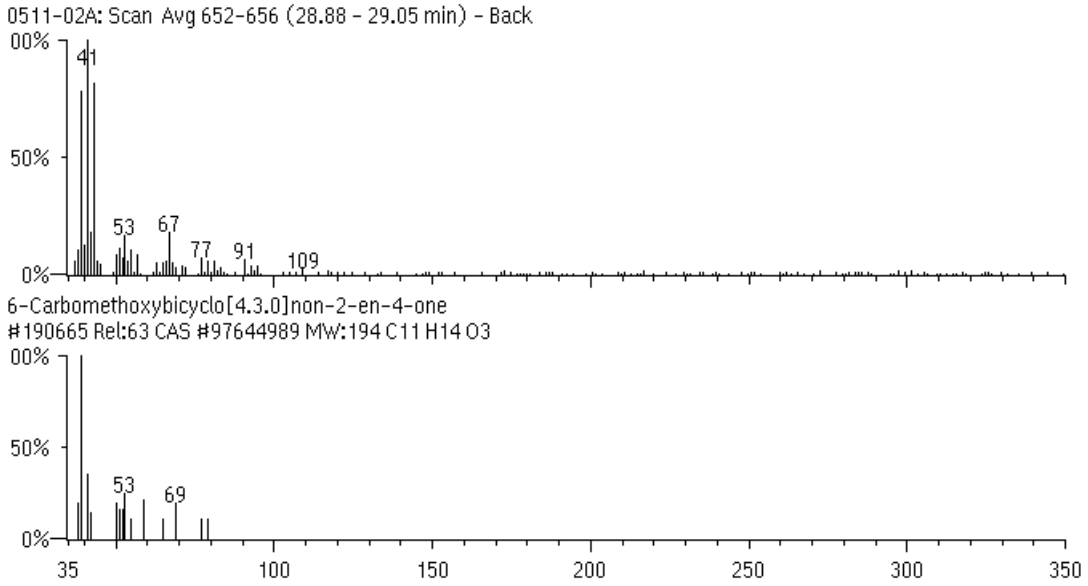
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
28.88-29.05	6-Carbomethoxybicyclo[4.3.0]non-2-en-4-one

Serial #190665 CAS #97644989
MW 194 Quality 309
C11 H14 O3



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

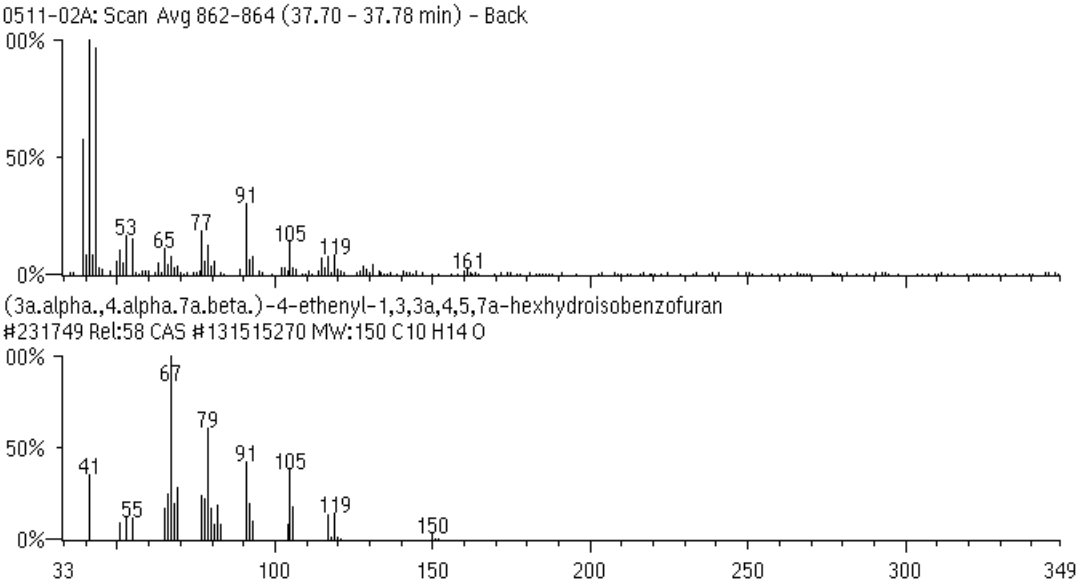
Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
37.70-37.78	(3a.alpha.,4.alpha.7a.beta.)-4-ethenyl-1,3,3a,4,5,7a-hexhydroisobenzofuran

Isobenzofuran, 4-ethenyl-1,3,3a,4,5,7a-hexahydro-, (3a.alpha.,4.alpha.,7a.beta.)-

Serial #231749 CAS #131515270
MW 150 Quality 562
C10 H14 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

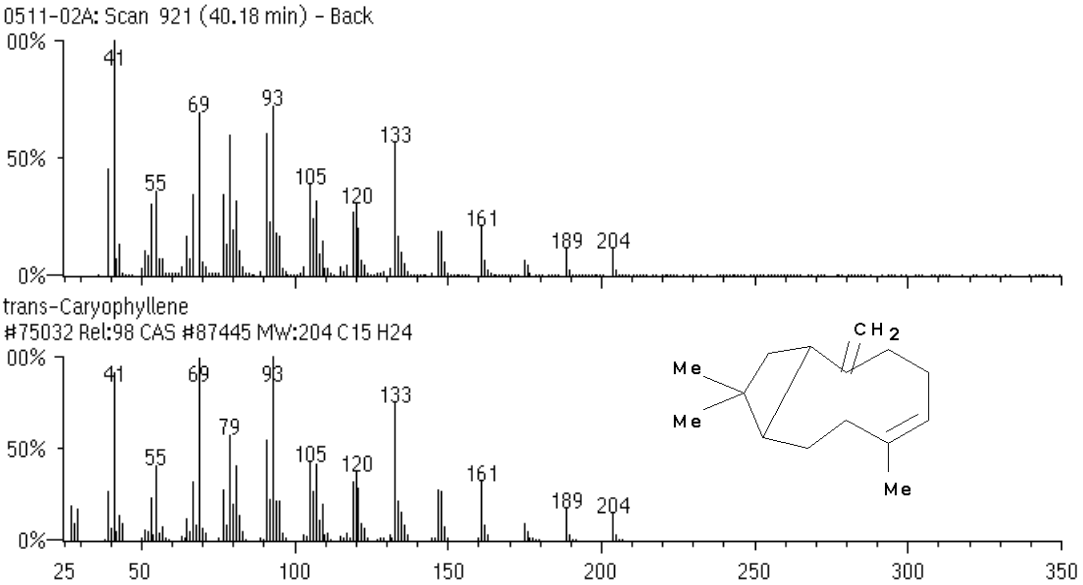
Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
40.18	trans-Caryophyllene

Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS)
l-Caryophyllene
(-)-Caryophyllene
Caryophyllene
.beta.-Caryophyllen
.beta.-Caryophyllene
.beta.-Caryophyllene, (-)
Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, (E)-(1R,9S)-(-)-
(-)-.beta.-Caryophyllene
CARYOPHYLLEN
BETA-CARYOPHYLLENE
4,11,11-trimethylbicyclo[7.2.0]undec-4-ene
.beta.-Caryophyllene,
(-)-trans-Caryophyllene

Serial #75032 CAS #87445
MW 204 Quality 981
C15 H24



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

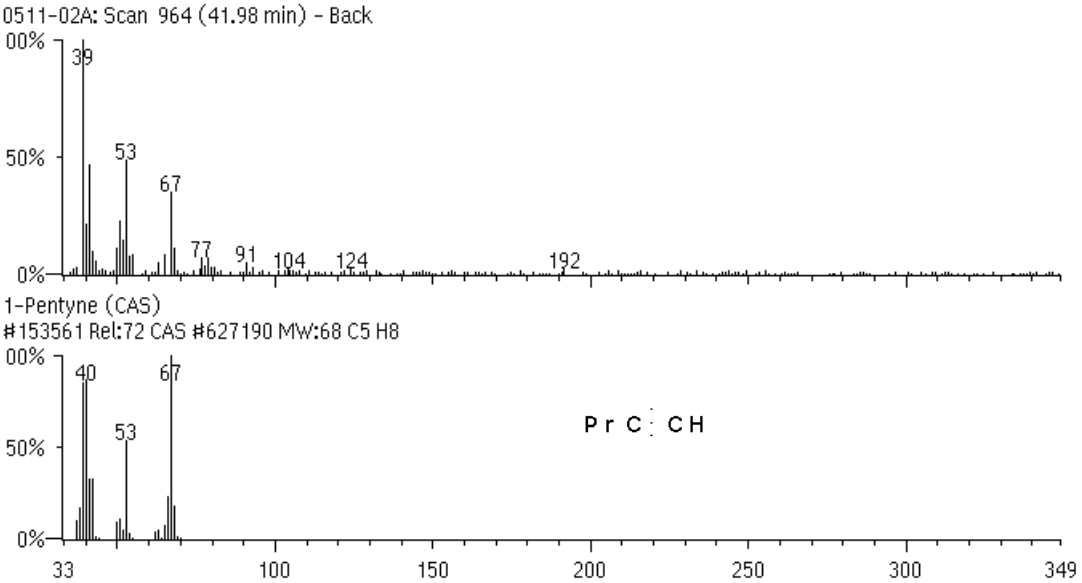
Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
41.98	1-Pentyne (CAS)

Propylacetylene
Acetylene, propyl-

Serial #153561 CAS #627190
MW 68 Quality 584
C5 H8



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

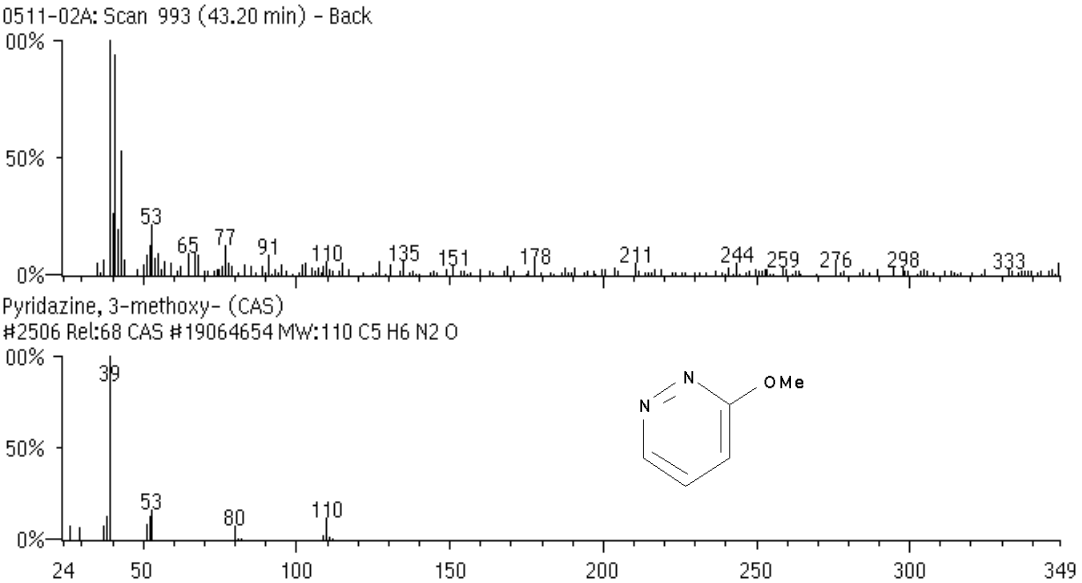
Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
43.20	Pyridazine, 3-methoxy- (CAS)

3-Methoxypyridazine

Serial #2506 CAS #19064654
MW 110 Quality 364
C5 H6 N2 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

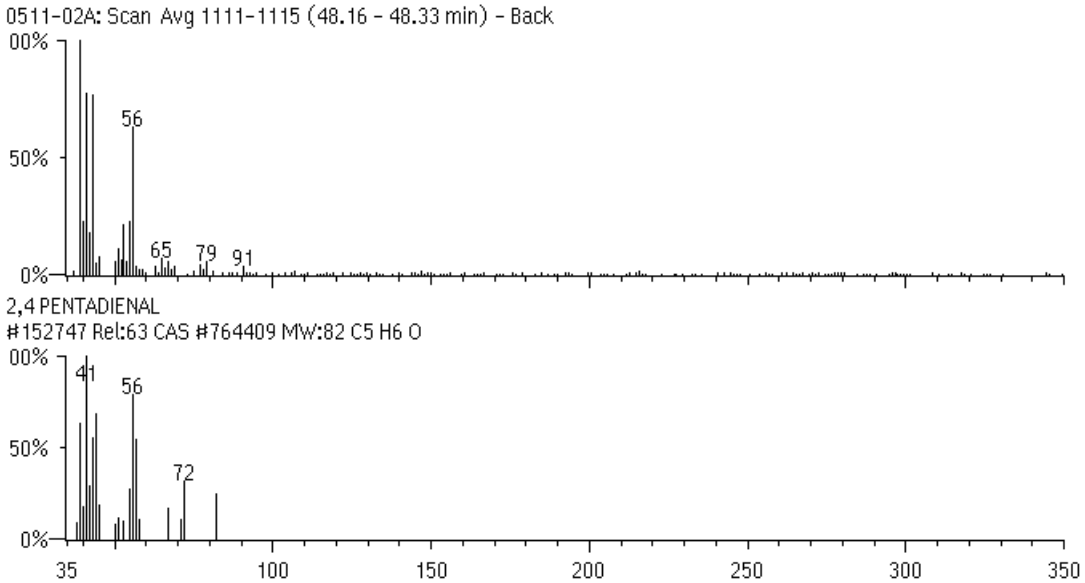
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
48.16-48.33	2,4 PENTADIENAL

Serial #152747 CAS #764409
MW 82 Quality 0
C5 H6 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

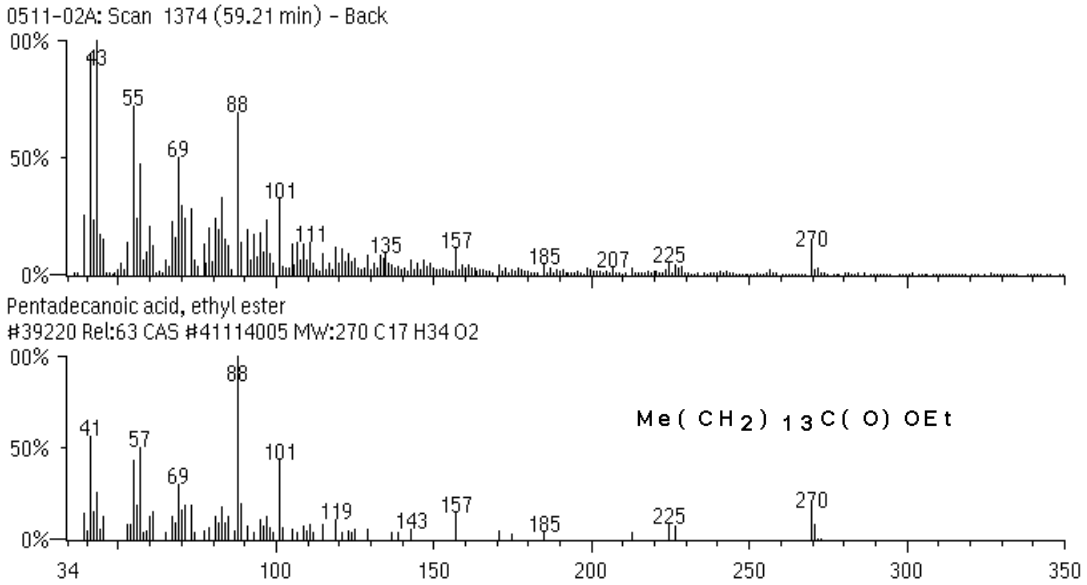
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
59.21	Pentadecanoic acid, ethyl ester

Serial #39220 CAS #41114005
MW 270 Quality 806
C17 H34 O2



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

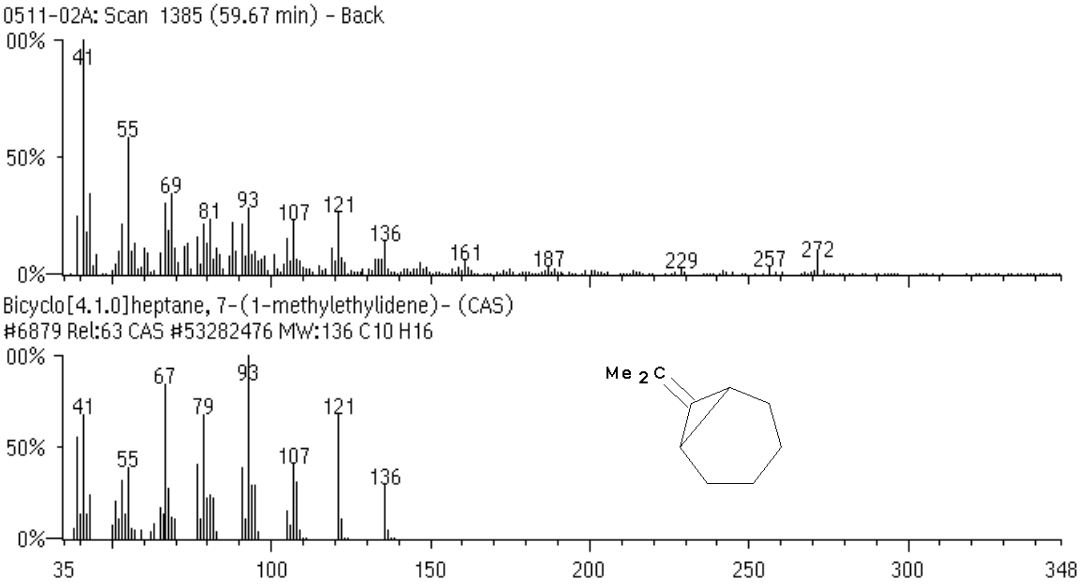
Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
59.67	Bicyclo[4.1.0]heptane, 7-(1-methylethylidene)- (CAS)

7-ISOPROPYLENYL BICYCLO(4.1.0(1-6))HEPTANE

Serial #6879 CAS #53282476
MW 136 Quality 974
C10 H16



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

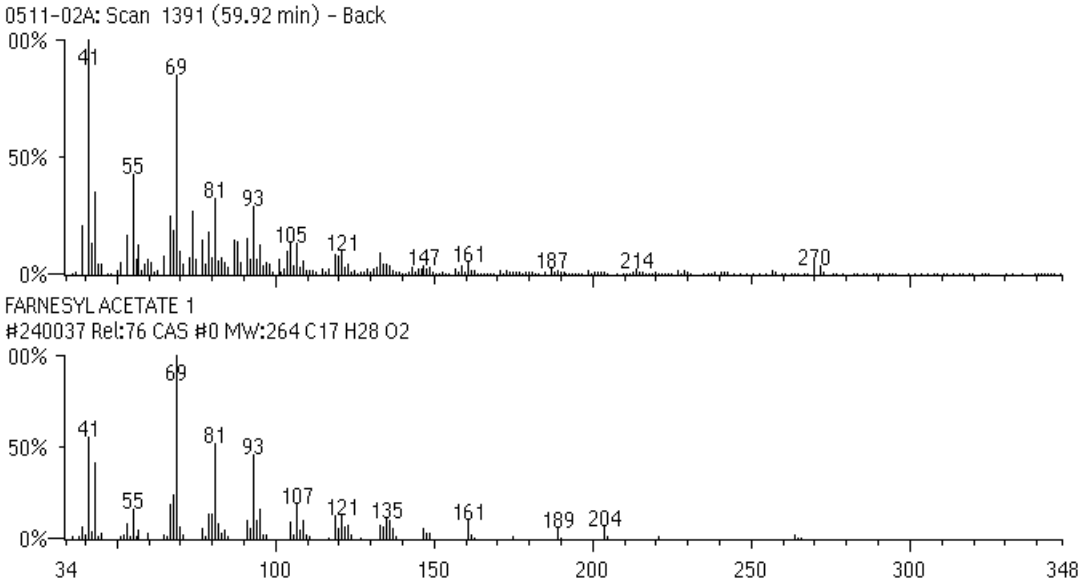
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
59.92	FARNESYL ACETATE 1

Serial #240037 CAS #0
MW 264 Quality 867
C17 H28 O2



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

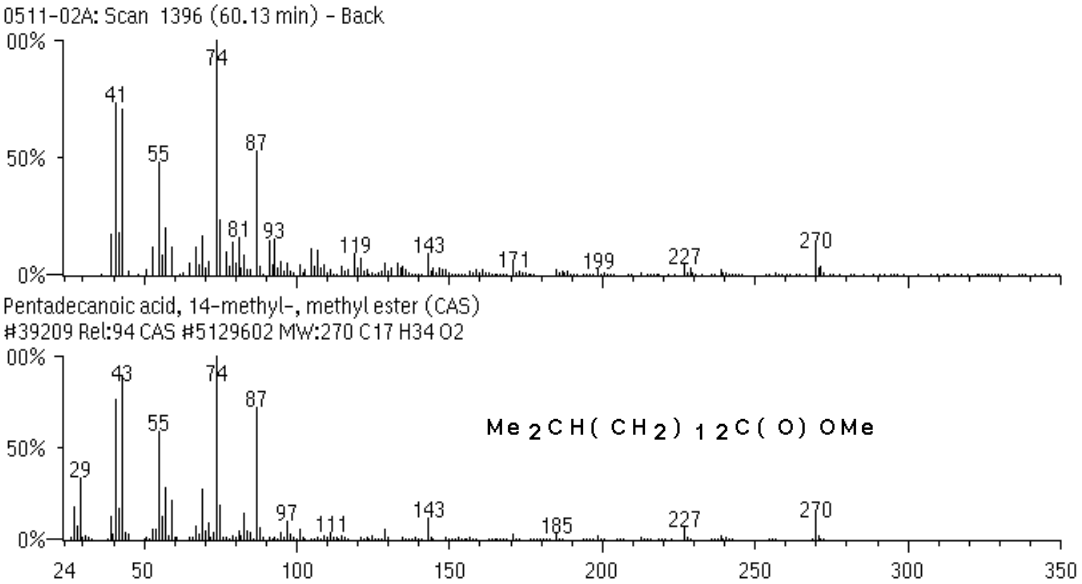
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
60.13	Pentadecanoic acid, 14-methyl-, methyl ester (CAS)

Serial #39209 CAS #5129602
MW 270 Quality 898
C17 H34 O2



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

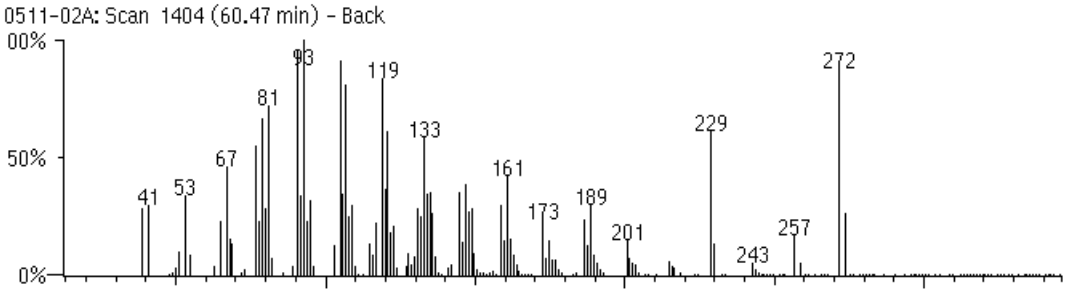
Fichier 0511-02A.TIC

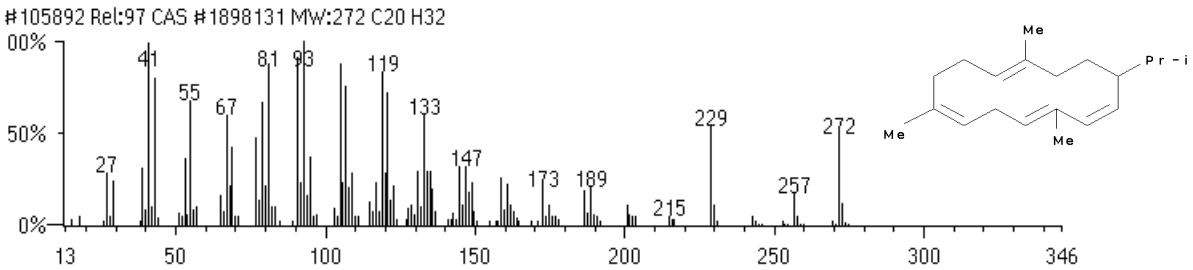
Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
60.47	Cembrene

1,3,6,10-Cyclotetradecatetraene, 3,7,11-trimethyl-14-(1-methylethyl)-, [S-(E,Z,E,E)]- (CAS)
Thunbergene
Thunbergen
1,3,6,10-Cyclotetradecatetraene, 14-isopropyl-3,7,11-trimethyl-, (+)-
(1S,2E,7E,11E)-2,4(18),7,11-Cembratraene
(S)-cembrene
(14S,1E,3Z,6E,10E)-14-isopropyl-3,7,11-trimethylcyclotetradeca-1,3,6,10-tetraene
1(S)-Cembrene
(S)-(+)-Cembrene
(+)-Thunbergene
(+)-Cembrene

Serial #105892 CAS #1898131
MW 272 Quality 900
C20 H32





DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

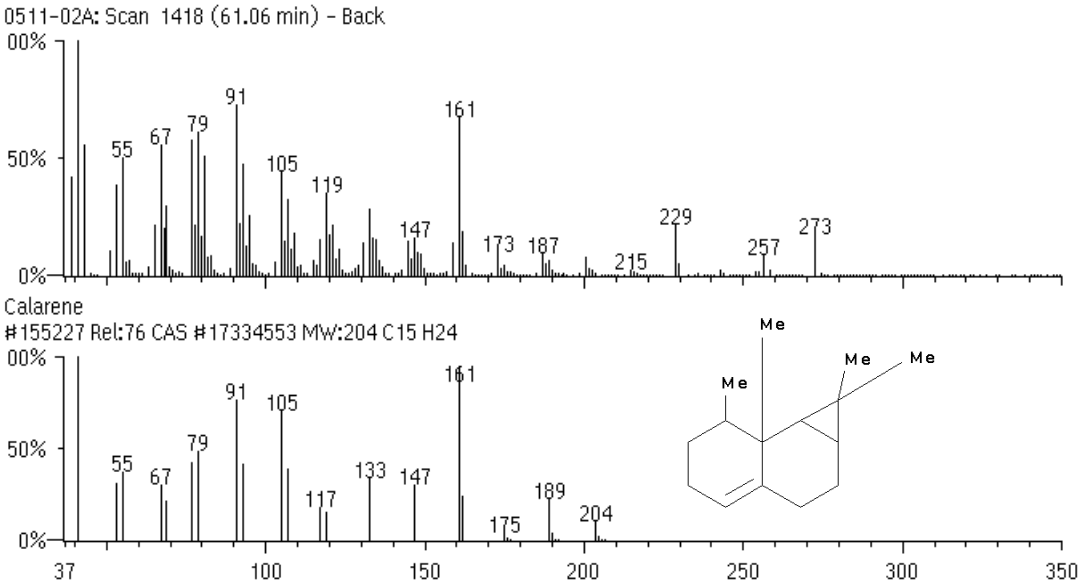
Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
61.06	Calarene

1H-Cyclopropa[a]naphthalene, 1a,2,3,5,6,7,7a,7b-octahydro-1,1,7,7a-tetramethyl-, [1aR-(1a.alpha.,7.alpha.,7a.alpha.,7b.alpha.)]- (CAS)
.beta.-Gurjunene
1(10)-Aristolene, (+)-
.delta.1(10)-Aristolene
1H-Cyclopropa[a]naphthalene, 1a,2,3,5,6,7,7a,7b-octahydro-1,1,7,7a-tetramethyl-, (1aR,7R,7aR,7bS)-(+)-
BETA-GURJUNENE
(+)-.DELTA.1(10)-Aristolene
(+)-1(10)-Aristolene

Serial #155227 CAS #17334553
MW 204 Quality 295
C15 H24



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

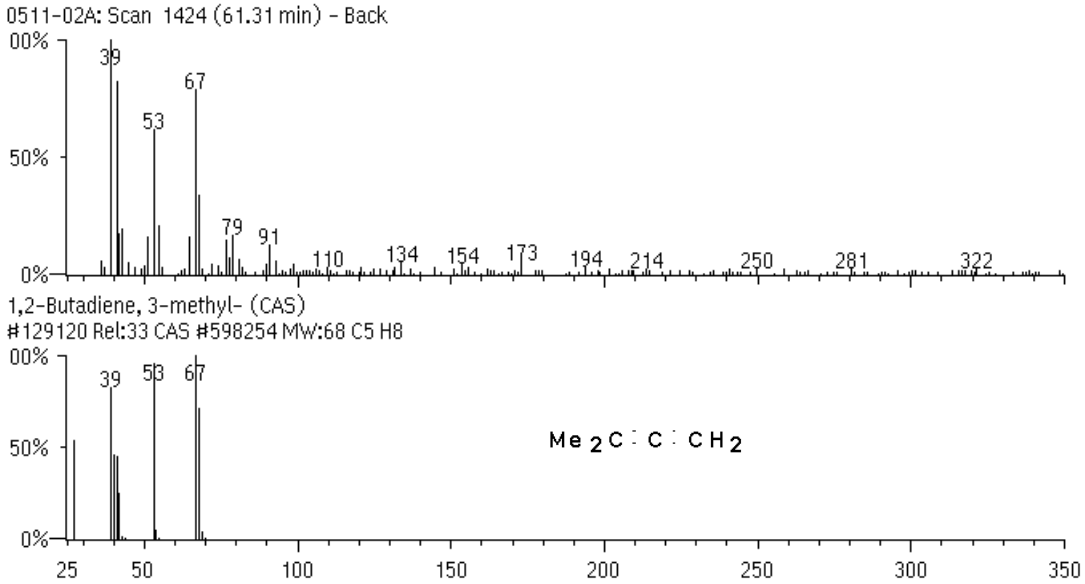
Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
61.31	1,2-Butadiene, 3-methyl- (CAS)

3-Methyl-1,2-butadiene
1,1-Dimethylallene
3,3-Dimethylallene
1,1-Dimethylallylene
2-Methyl-2,3-butadiene

Serial #129120 CAS #598254
MW 68 Quality 692
C5 H8



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

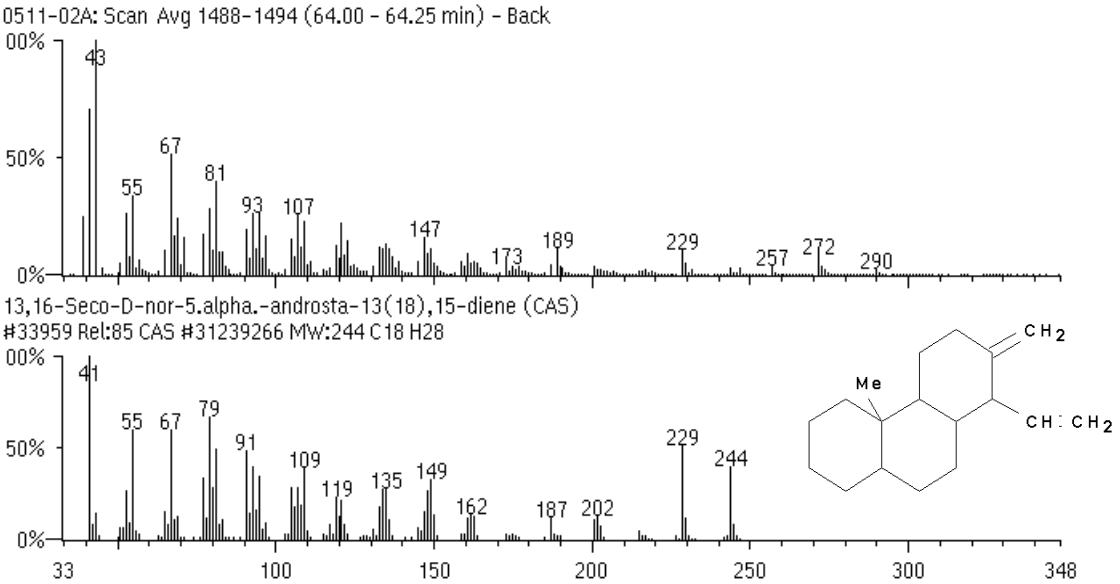
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
64.00-64.25	13,16-Seco-D-nor-5.alpha.-androsta-13(18),15-diene (CAS)

Serial #33959 CAS #31239266
MW 244 Quality 947
C18 H28



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

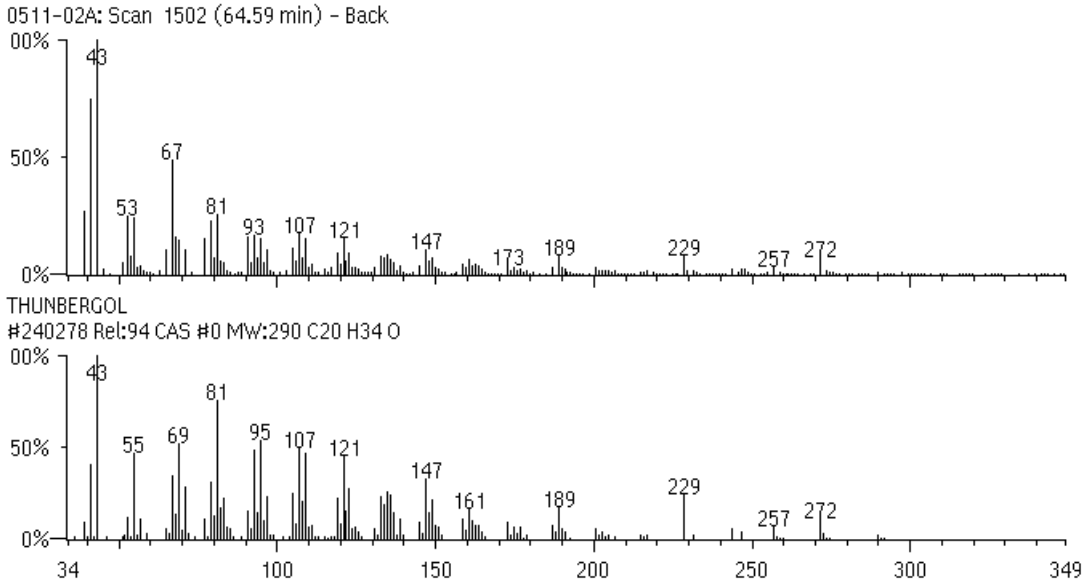
Fichier 0511-02A.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
64.59	THUNBERGOL

A CEMBRATRIENOL

Serial #240278 CAS #0
MW 290 Quality 862
C20 H34 O



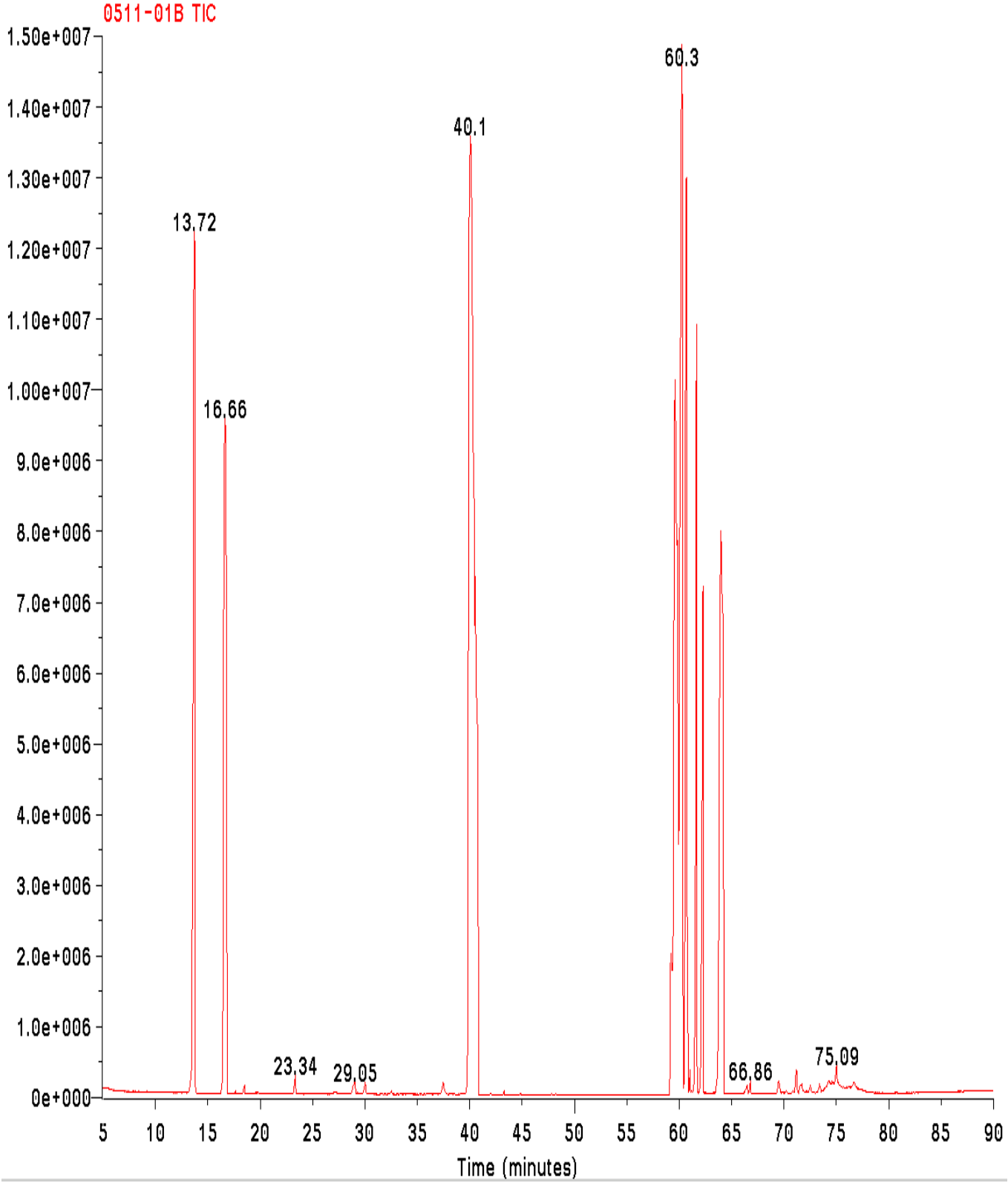


Figure 7
Chromatogramme ionique total **pins « sains »** (après méthylation « in-situ »)

DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Résumé des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-01B

RT (min.)	Aire	Nom chimique CAS #
13.43-13.81		.alpha.-pinene CAS #805-68-
16.49-16.75		.beta.-pinene CAS #127-91-3
17.67		1-penten-3-yne CAS #646-05-9
18.51		1-propyne, 3,3'-oxybis- CAS #6921-27-3
23.34		1,7-octadiyne CAS #871-84-1
27.16-27.25		2H-pyran, 2-(2,5-hexadiynyloxy)tetrahydro- CAS #40924-58-1
28.84-29.14		(Z,2R,6R)-2-(t-butyl)-5-propylidene-6-methyl-1,3-dioxan-4-one CAS #129287-47-4
29.93-30.14		myrcenol CAS #543-39-5
32.54		hotrienol CAS #20053-88-7
37.41-37.49		bicyclo[2.2.1]hept-2-ene CAS #498-66-8
40.01		trans-caryophyllene CAS #0
42.03-42.07		4-(1,5-dimethyl-4-hexenyl)-3-cyclohexen-1-one CAS #100572-83-6
47.87		oxirane, ethenyl- CAS #930-22-3
59.25		farnesol isomer B CAS #0
59.63		ethyl undecanoate CAS #0
59.88		hexadecanoic acid, methyl ester CAS #112-39-0
60.30		cembrene CAS #1898-13-1
60.72		thunbergol CAS #0
61.06		1,4-pentadiene CAS #591-93-5
61.69		hexadecanoic acid, ethyl ester CAS #628-97-7
62.32		manoyl oxide CAS #596-84-9
64.00		thumbergol CAS #0
66.52		1,2,5,6-diepoxycyclooctane CAS #27035-39-8
66.86		7 nonynoic acid CAS #56630-32-1
69.54		1,9-decadiyne CAS #1720-38-3
70.26-70.30		3-cyclodecine-1-ol CAS #97487-35-9
70.85-70.93		cis-9,trans-11-tetradecadien-1-yl acetate CAS #30562-09-5
71.18-71.35		methyl 20-hydroxyeicosan-5(Z),8(Z),11(Z),14(Z)-tetraenoate CAS #0
71.64-71.77		2-methyl-6-methylene-1,7-octadiene-3-ol CAS #22459105
72.61		2-hexanol, 2,5-dimethyl-, (s)- CAS #0
73.45		cyclopentaneundecanoic acid CAS #6053-49-2
74.33		1-methoxy-4-[5-methyl-2-(1-methylethyldene)cyclohexyl]-1,4-cyclohexadiene CAS #129262-02-8
74.92-75.17		5,8,10-undecatrien-3-ol CAS #56255-81-3
76.68-76.81		methyl 19-hydroxyeicosan-5(Z),8(Z),11(Z),14(Z)-tetraenoate CAS #0

DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

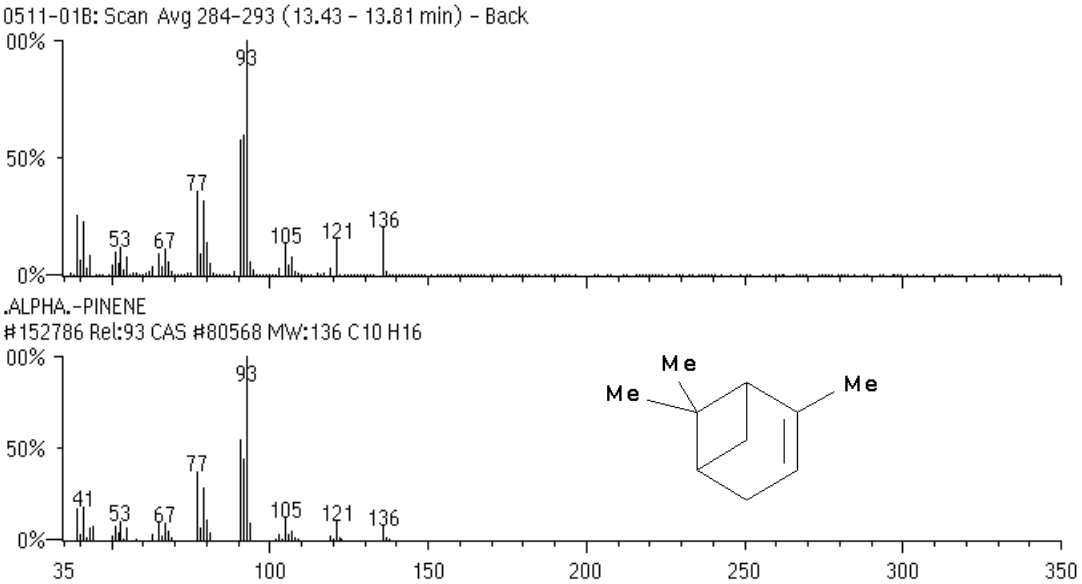
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
13.43-13.81		.ALPHA.-PINENE

DIHYDRO-para-CYMENE (OLD NAME)
2,6,6,-TRIMETHYL BICYCLO-(3,1,1)-2-HEPTENE
2-PINENE

Serial #152786 CAS #80568
MW 136 Quality 842
C10 H16



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

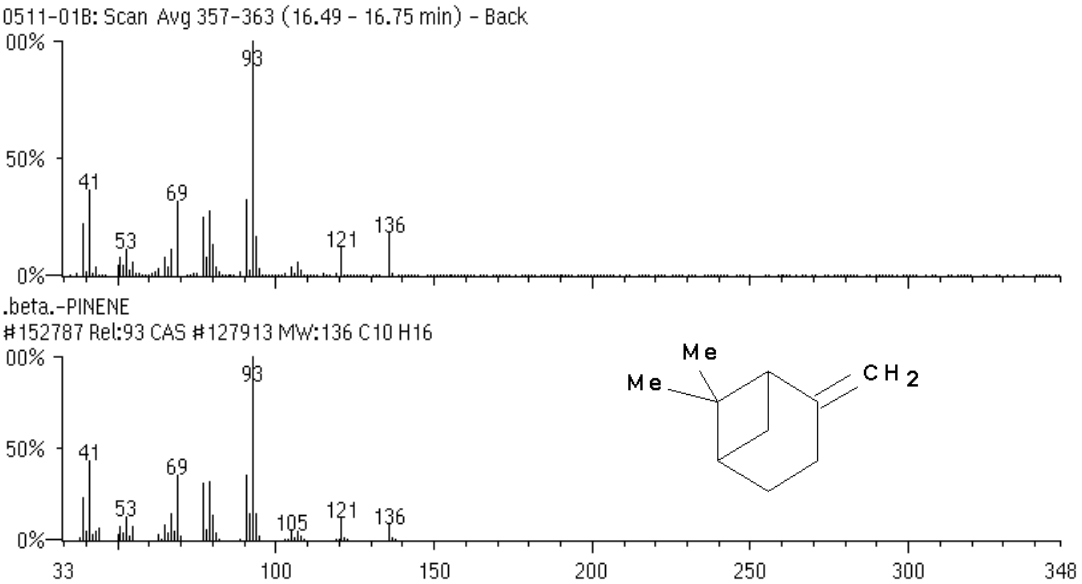
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
16.49-16.75		.beta.-PINENE

2(10)-PINENE

Serial #152787 CAS #127913
MW 136 Quality 867
C10 H16



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

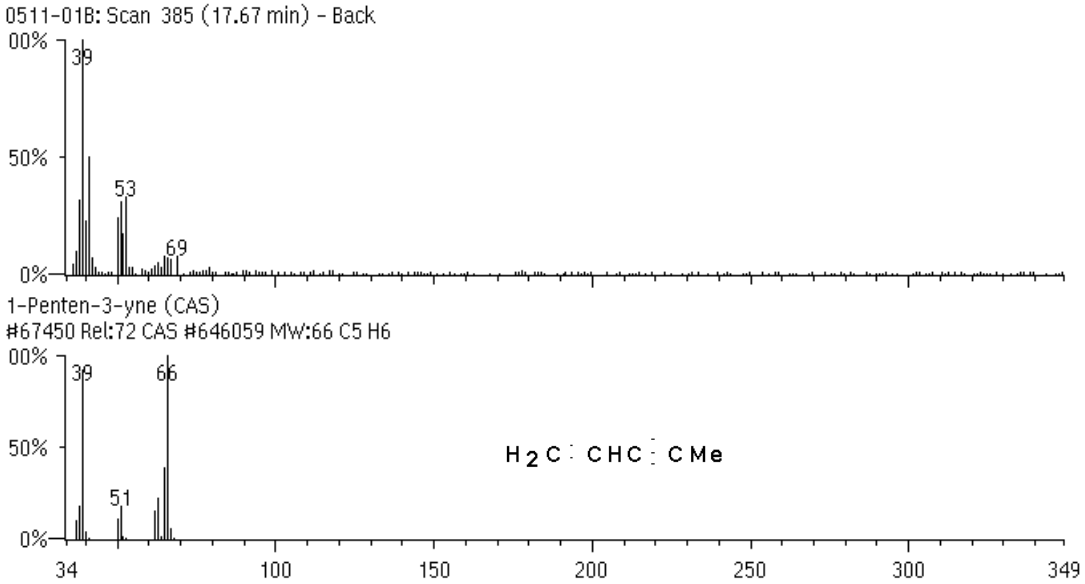
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
17.67		1-Penten-3-yne (CAS)
Pyrylen		
Pyrylene		
Vinylmethylacetylene		
Methyl vinylacetylene		

Serial #67450 CAS #646059
MW 66 Quality 692
C5 H6



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

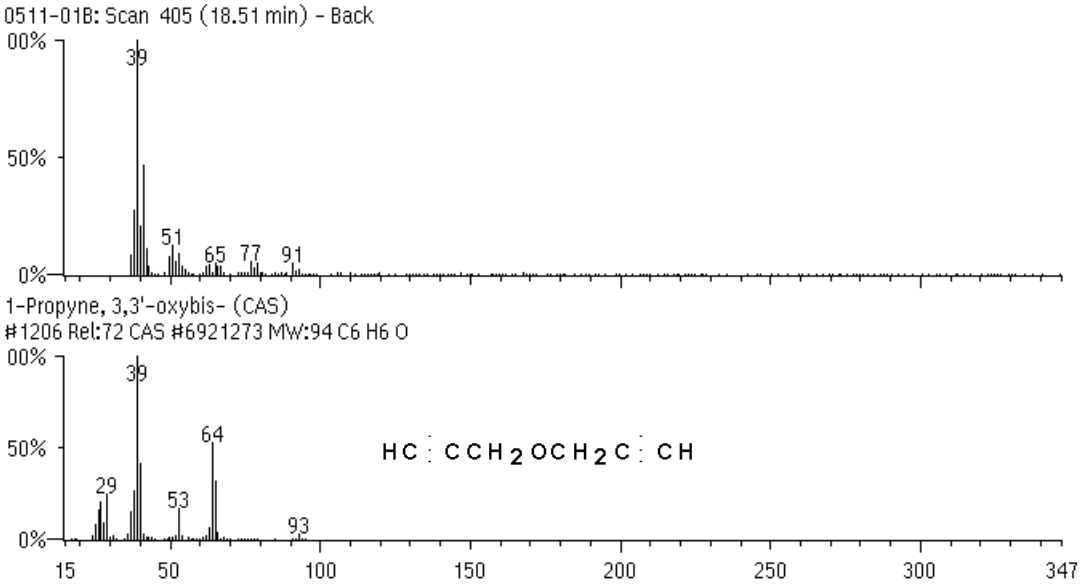
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
18.51		1-Propyne, 3,3'-oxybis- (CAS)

Dipropargyl ether
Propargyl ether
2-Propynyl ether
Dipropargyl oxide
Di(2-propynyl)ether

Serial #1206 CAS #6921273
MW 94 Quality 798
C6 H6 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

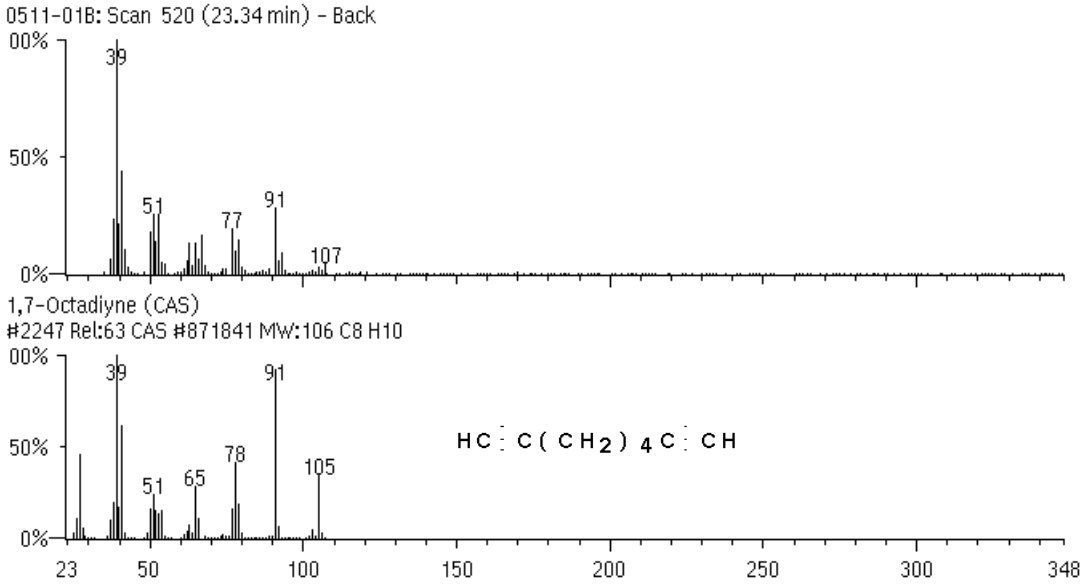
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
23.34		1,7-Octadiyne (CAS)

Serial #2247 CAS #871841
MW 106 Quality 999
C8 H10



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

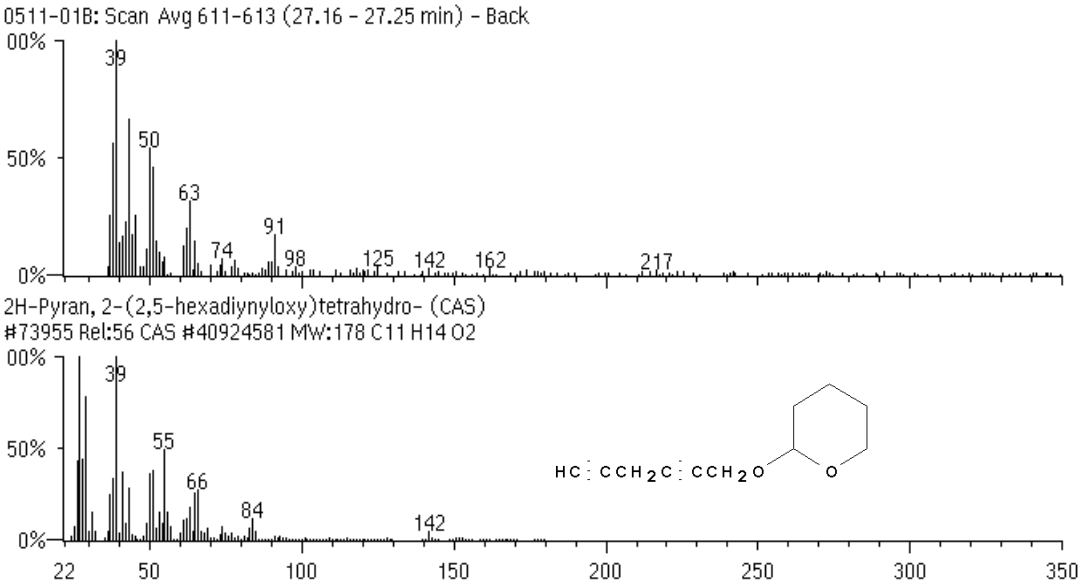
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
27.16-27.25		2H-Pyran, 2-(2,5-hexadiynyloxy)tetrahydro- (CAS)

2-(HEXA-2*,5*-DIYN-1*-OXY)-TETRAHYDROPYRAN

Serial #73955 CAS #40924581
MW 178 Quality 823
C11 H14 O2



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

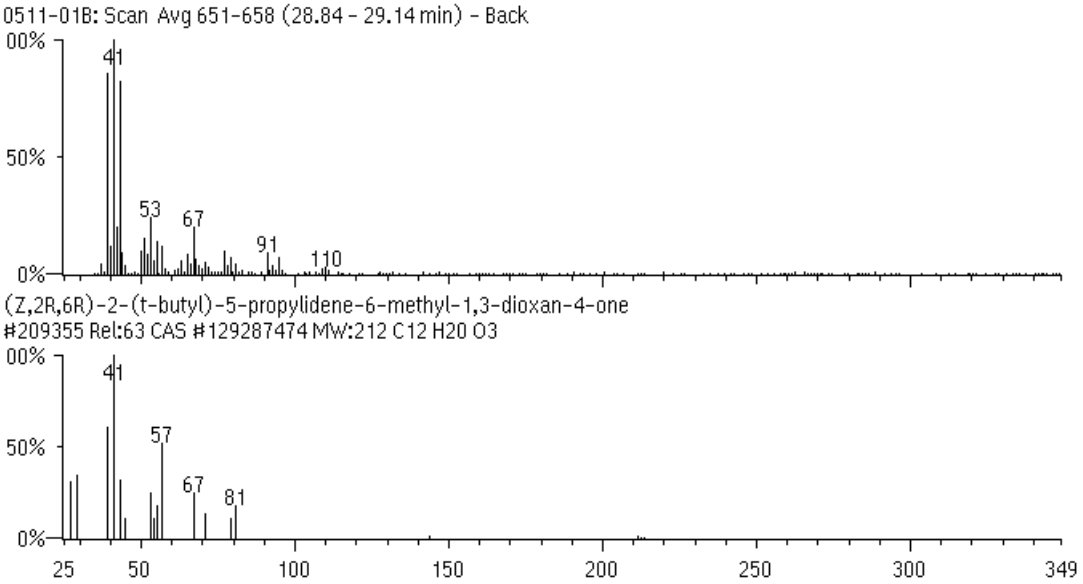
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
28.84-29.14		(Z,2R,6R)-2-(t-butyl)-5-propylidene-6-methyl-1,3-dioxan-4-one

Serial #209355 CAS #129287474
MW 212 Quality 301
C12 H20 O3



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

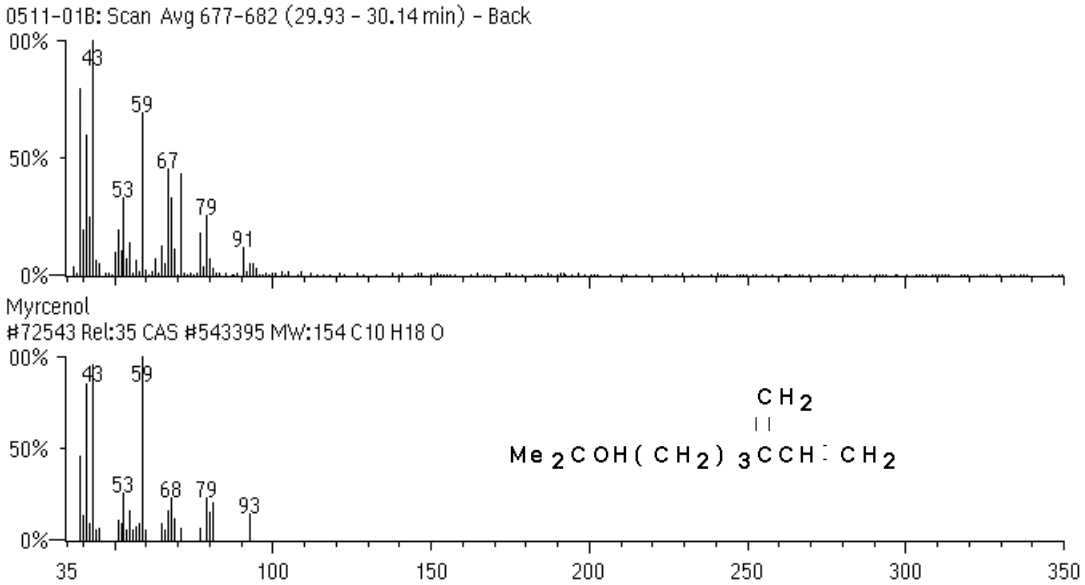
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
29.93-30.14		Myrcenol

7-Octen-2-ol, 2-methyl-6-methylene- (CAS)
2-Methyl-6-methylene-7-octen-2-ol
7-OCTENE-2-OL, 2-METHYL-6-METHYLENE-
2-myrcenol
7-Hydroxy-7-methyl-3-methylene-1-octene

Serial #72543 CAS #543395
MW 154 Quality 534
C10 H18 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

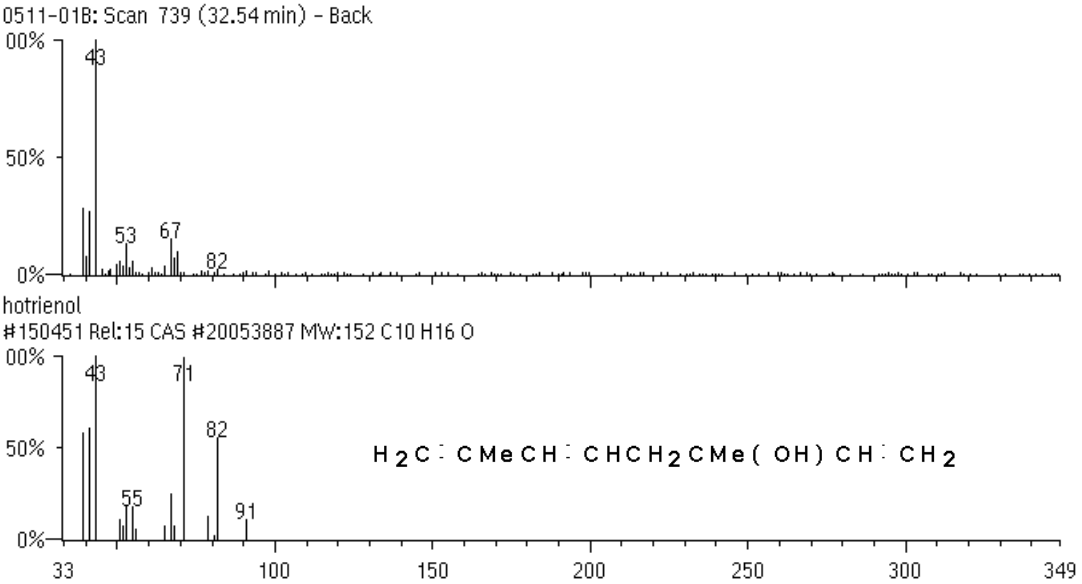
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
32.54		hotrienol

3,7-dimethyl-1,5,7-octatrien-3-ol
1,5,7-Octatrien-3-ol, 3,7-dimethyl-, [R-(E)]-
Hotrienol, trans-(-)-
1,5,7-Octatrien-3-ol, 3,7-dimethyl-, (E)-(R)-(-)-
(-)-trans-Khotrienol
trans-(-)-Hotrienol

Serial #150451 CAS #20053887
MW 152 Quality 343
C10 H16 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

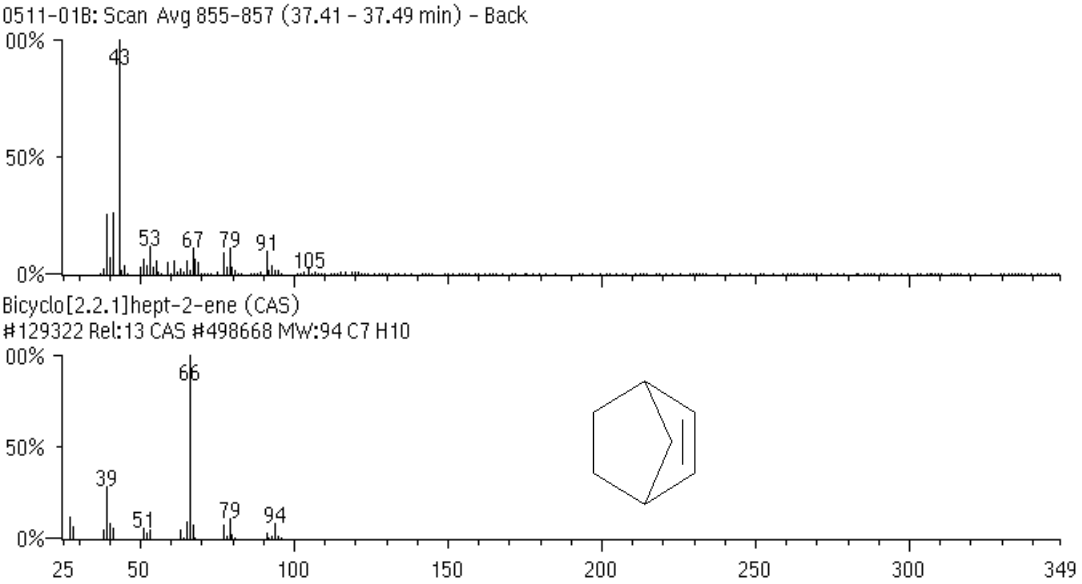
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
37.41-37.49		Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene (CAS)

Serial #129322 CAS #498668
MW 94 Quality 619
C7 H10



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

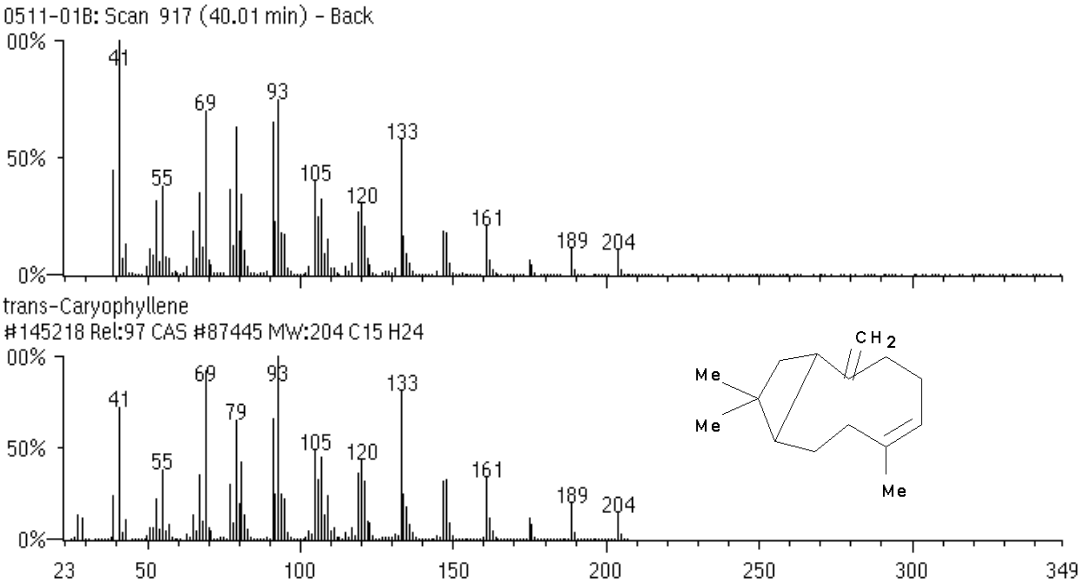
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
40.01		trans-Caryophyllene

Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS)
l-Caryophyllene
(-)-Caryophyllene
Caryophyllene
.beta.-Caryophyllen
.beta.-Caryophyllene
.beta.-Caryophyllene, (-)
Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, (E)-(1R,9S)-(-)-
(-)-.beta.-Caryophyllene
CARYOPHYLLEN
BETA-CARYOPHYLLENE
4,11,11-trimethylbicyclo[7.2.0]undec-4-ene
.beta.-Caryophyllene,
(-)-trans-Caryophyllene

Serial #145218 CAS #87445
MW 204 Quality 892
C15 H24



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

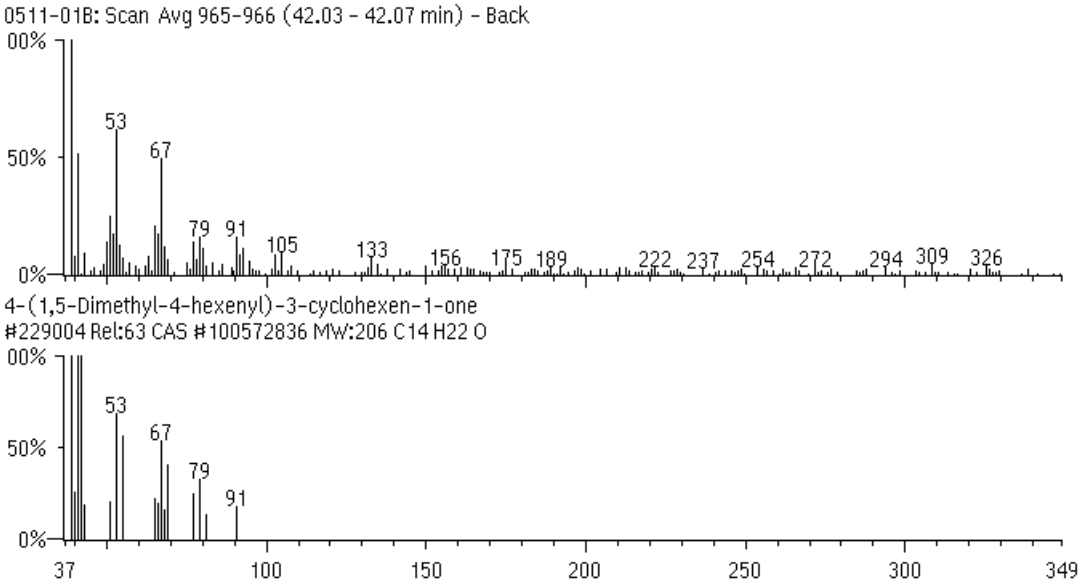
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
42.03-42.07		4-(1,5-Dimethyl-4-hexenyl)-3-cyclohexen-1-one

3-Cyclohexen-1-one, 4-(1,5-dimethyl-4-hexenyl)-, (.+-.)-

Serial #229004 CAS #100572836
MW 206 Quality 280
C14 H22 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

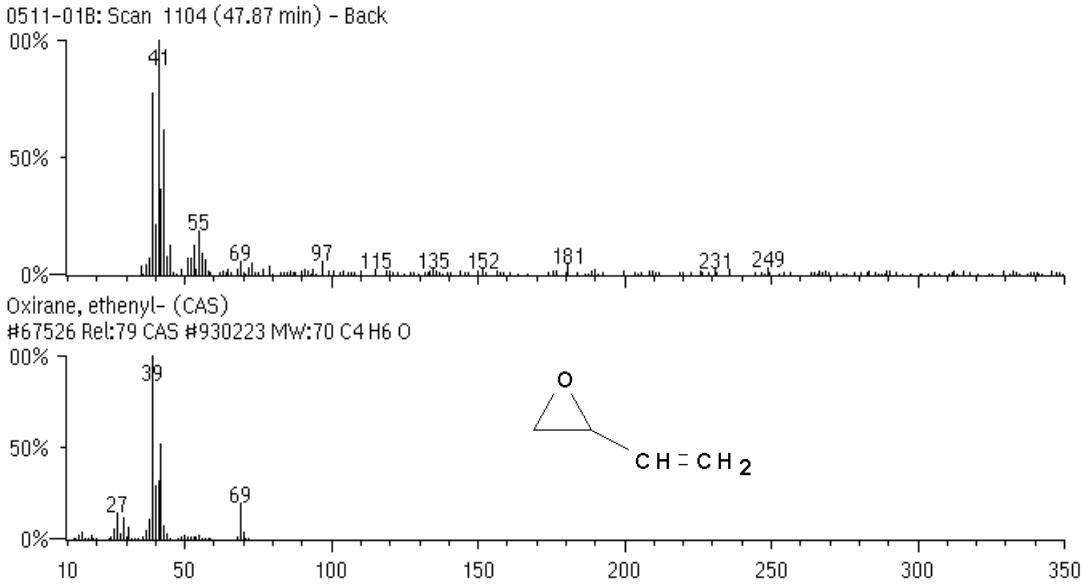
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
47.87		Oxirane, ethenyl- (CAS)

1-Butene, 3,4-epoxy-
OXIRANE, VINYL-
Butadiene monoxide
Ethenyloxirane
Butadiene epoxide
1,2-Epxoy-3-butene
1,2-Oxido-3-butene
1,2-Epoxy-3-butene
1,3-Butadiene oxide
Butadiene monoepoxide
3,4-Epoxy-1-butene
Vinyloxirane
1,3-Butadiene monooxide
Butadiene monooxide
Butadiene oxide
3,4-Epoxybutene
1,2-Epoxy-3-butylene
1,3-Butadiene monoepoxide
Vinyl epoxide

Serial #67526 CAS #930223
MW 70 Quality 877
C4 H6 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

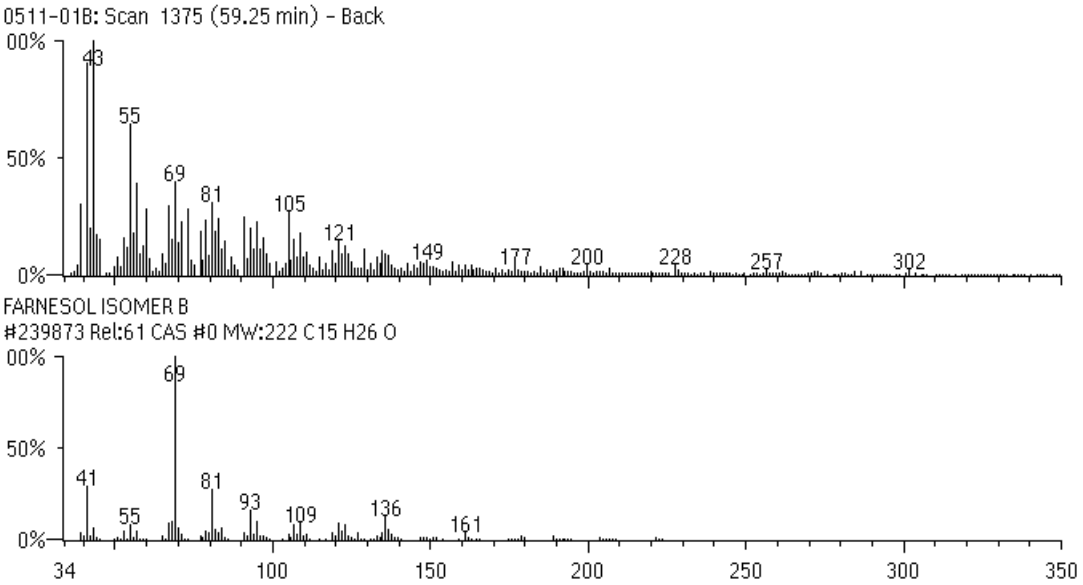
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
59.25		FARNESOL ISOMER B

Serial #239873 CAS #0
MW 222 Quality 899
C15 H26 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

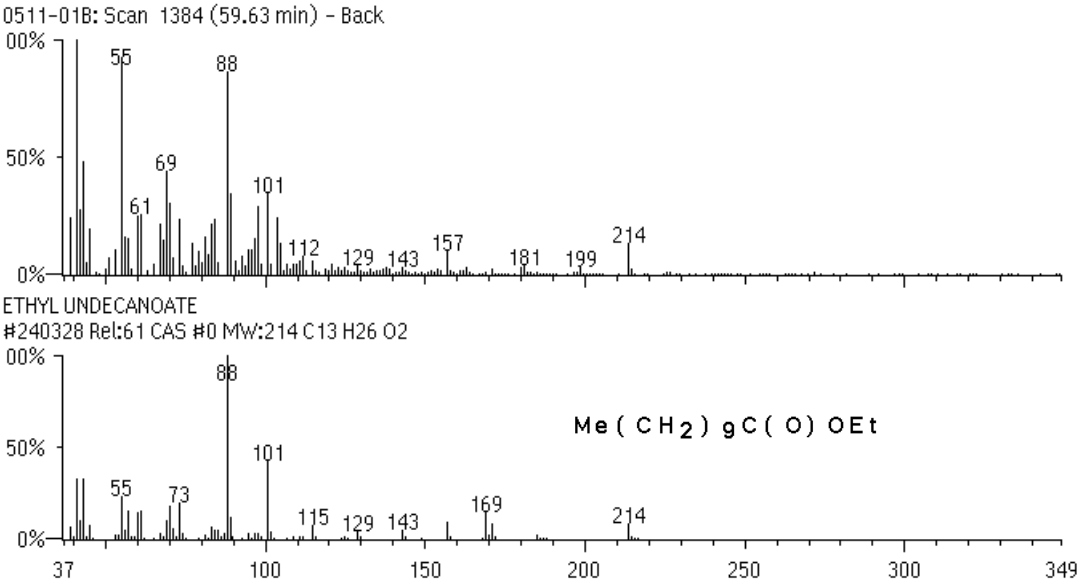
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
59.63		ETHYL UNDECANOATE

ETHYL HENDECANOATE

Serial #240328 CAS #0
MW 214 Quality 825
C13 H26 O2



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

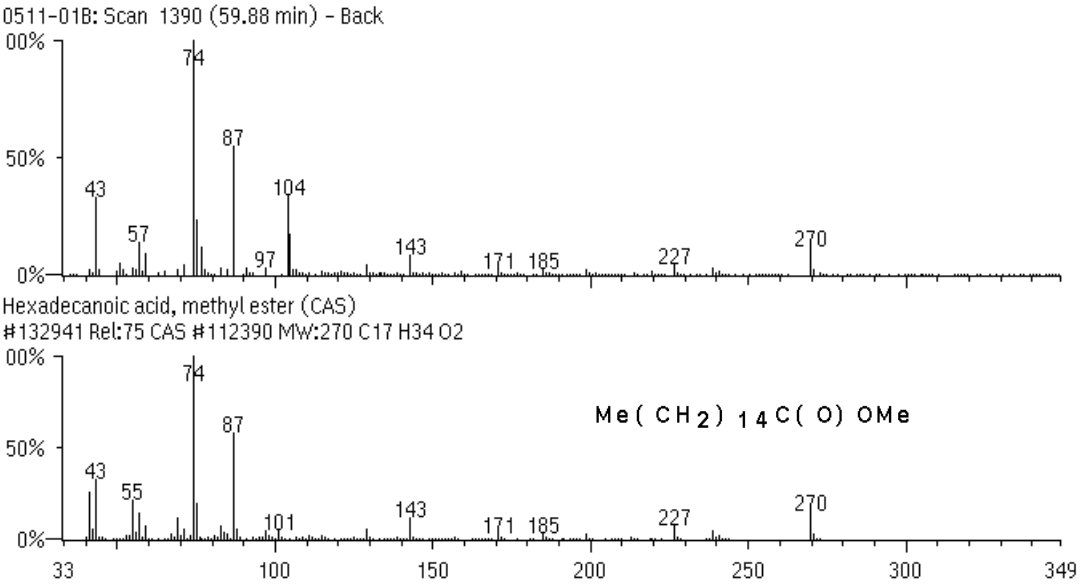
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
59.88		Hexadecanoic acid, methyl ester (CAS)

Methyl palmitate
Methyl hexadecanoate
Methyl n-hexadecanoate
Uniphat A60
Metholene 2216
Palmitic acid methyl ester
Palmitic acid, methyl ester
n-Hexadecanoic acid methyl ester
PALMITIC ACID-METHYL ESTER
METHYLPALMITATE

Serial #132941 CAS #112390
MW 270 Quality 892
C17 H34 O2



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

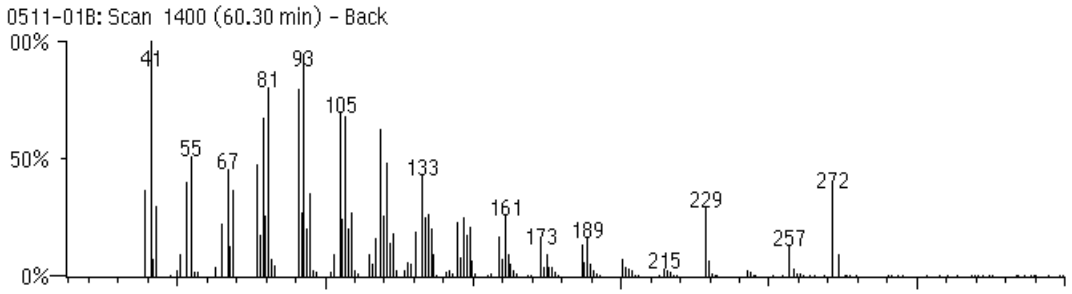
Fichier 0511-01B.TIC

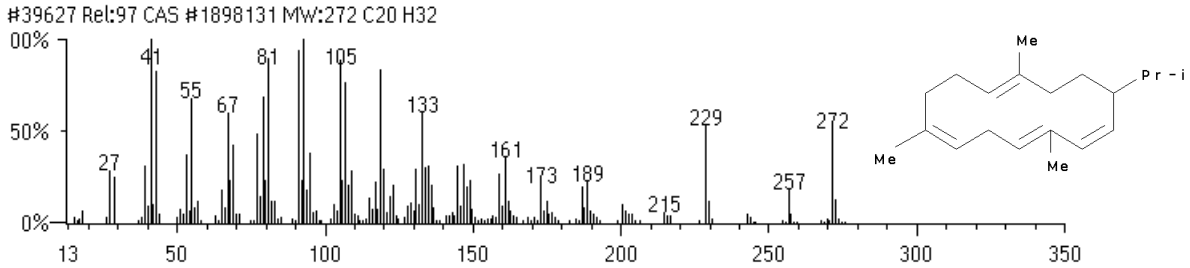
Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
60.30		Cembrene

1,3,6,10-Cyclotetradecatetraene, 3,7,11-trimethyl-14-(1-methylethyl)-, [S-(E,Z,E,E)]- (CAS)
Thunbergene
Thunbergen
1,3,6,10-Cyclotetradecatetraene, 14-isopropyl-3,7,11-trimethyl-, (+)-
(1S,2E,7E,11E)-2,4(18),7,11-Cembratraene
(S)-cembrene
(14S,1E,3Z,6E,10E)-14-isopropyl-3,7,11-trimethylcyclotetradeca-1,3,6,10-tetraene
1(S)-Cembrene
(S)-(+)-Cembrene
(+)-Thunbergene
(+)-Cembrene

Serial #39627 CAS #1898131
MW 272 Quality 898
C20 H32





DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

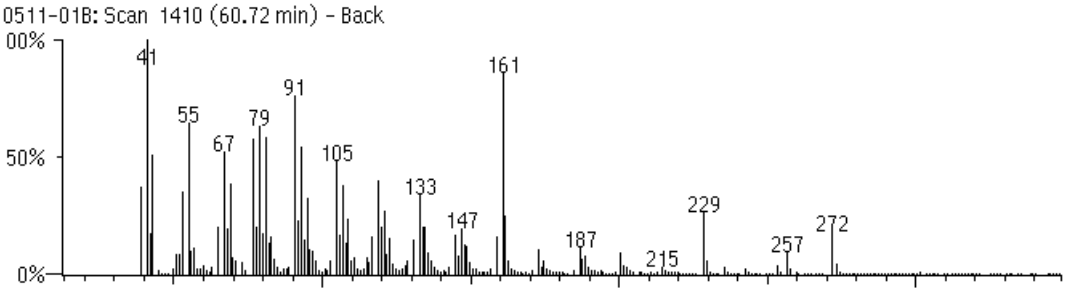
Fichier 0511-01B.TIC

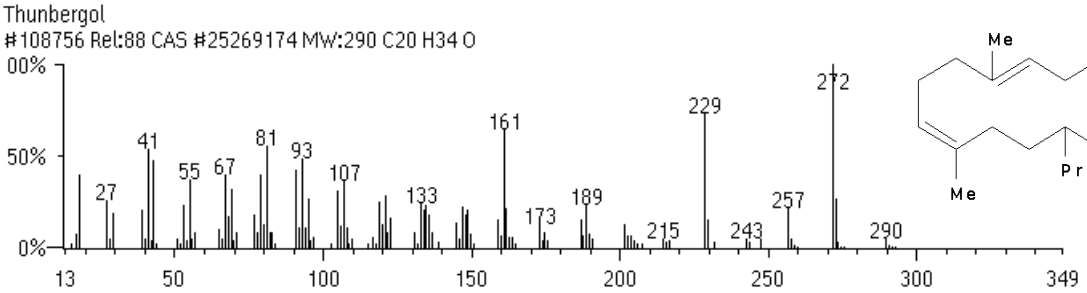
Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

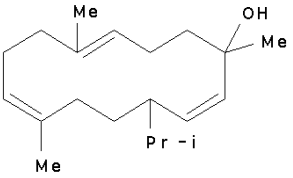
RT (min.)	Aire	Noms chimiques
60.72		Thunbergol

2,7,11-Cyclotetradecatrien-1-ol, 1,7,11-trimethyl-4-(1-methylethyl)-, [1R-(1R*,2E,4S*,7E,11E)]- (CAS)
(1S,2E,4S,7E,11E)-2,7,11-Cembratrien-4-ol
Isocembrol
2,7,11-Cyclotetradecatrien-1-ol, 4-isopropyl-1,7,11-trimethyl-

Serial #108756 CAS #25269174
MW 290 Quality 900
C20 H34 O







DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

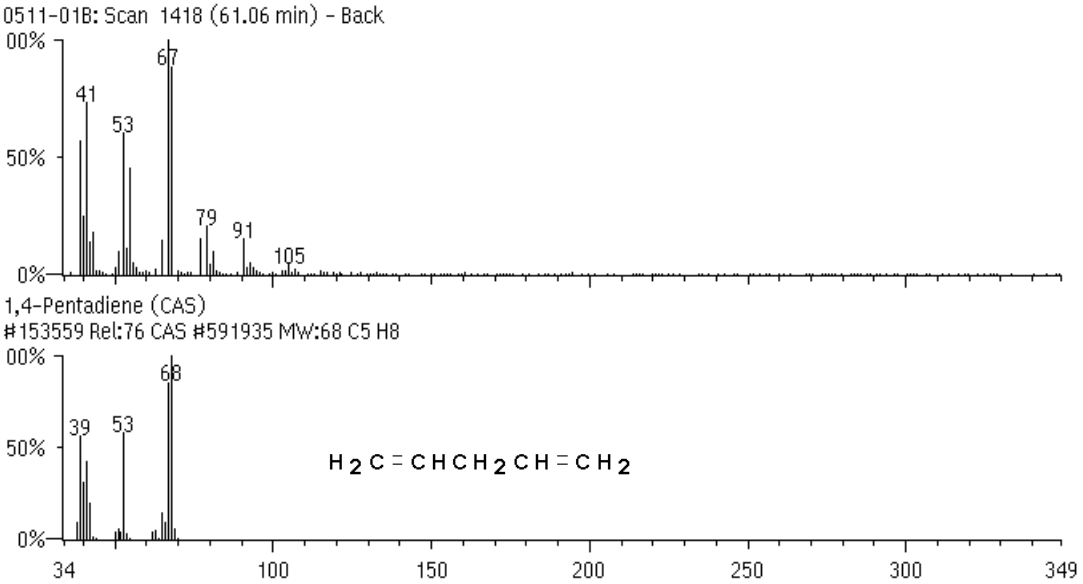
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
61.06		1,4-Pentadiene (CAS)

Penta-1,4-diene

Serial #153559 CAS #591935
MW 68 Quality 899
C5 H8



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

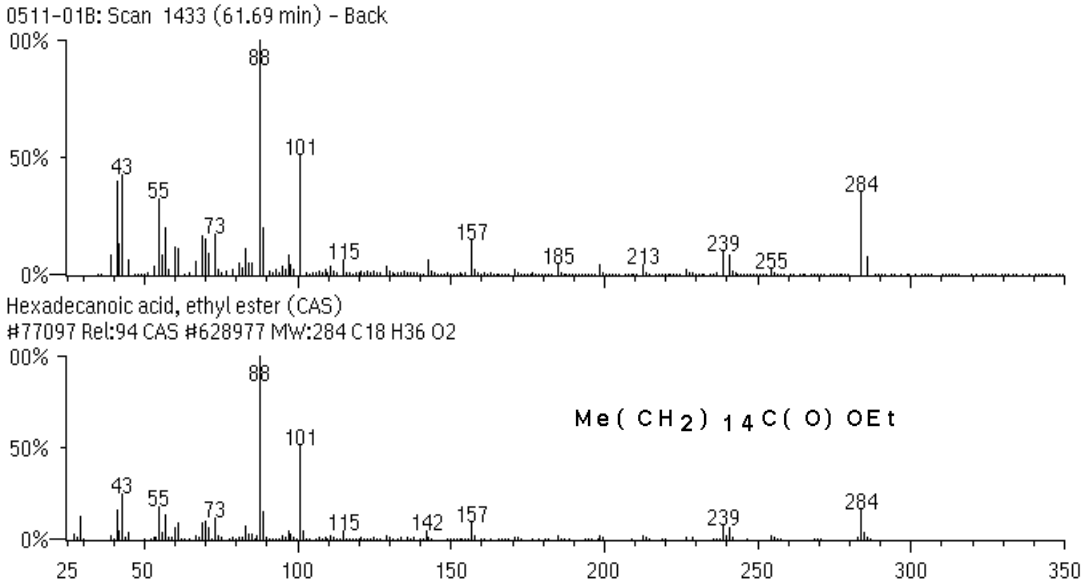
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
61.69		Hexadecanoic acid, ethyl ester (CAS)

Ethyl palmitate
HEXADECANOIC ACID ETHYL ESTER
Palmitic acid ethyl ester
Palmitic acid, ethyl ester
Ethyl hexadecanoate
ETHYL CETYLATE

Serial #77097 CAS #628977
MW 284 Quality 986
C18 H36 O2



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

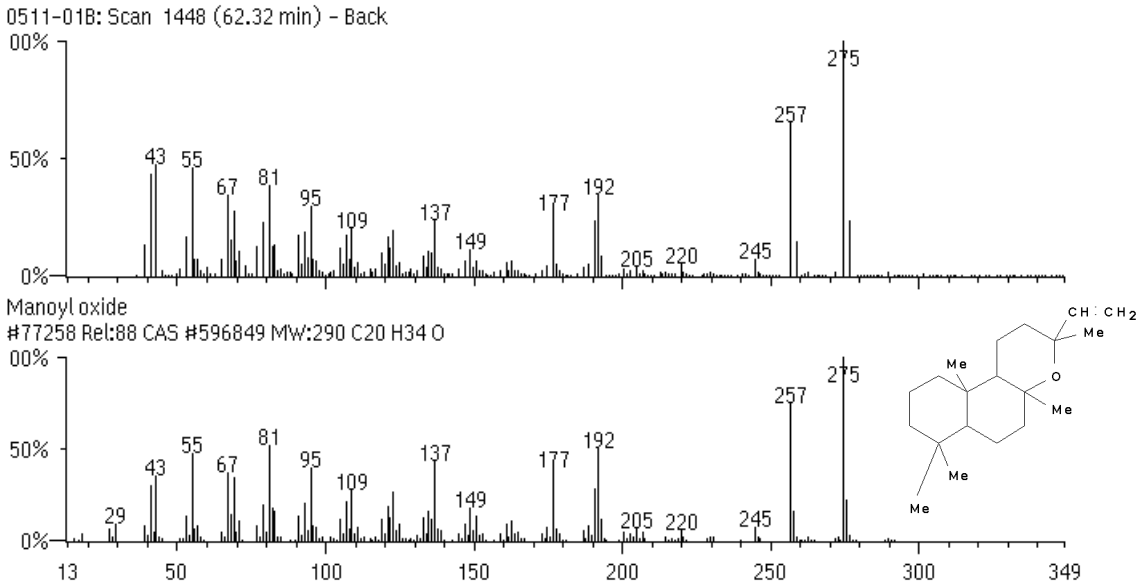
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
62.32		Manoyl oxide

1H-Naphtho[2,1-b]pyran, 3-ethenyldodecahydro-3,4a,7,7,10a-pentamethyl-, [3R-(3.alpha.,4a.beta.,6a.alpha.,10a.beta.,10b.alpha.)]- (CAS)
8.alpha.,13-Epoxylabd-14-ene
Labd-14-ene, 8,13-epoxy-, (13R)-

Serial #77258 CAS #596849
MW 290 Quality 841
C20 H34 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

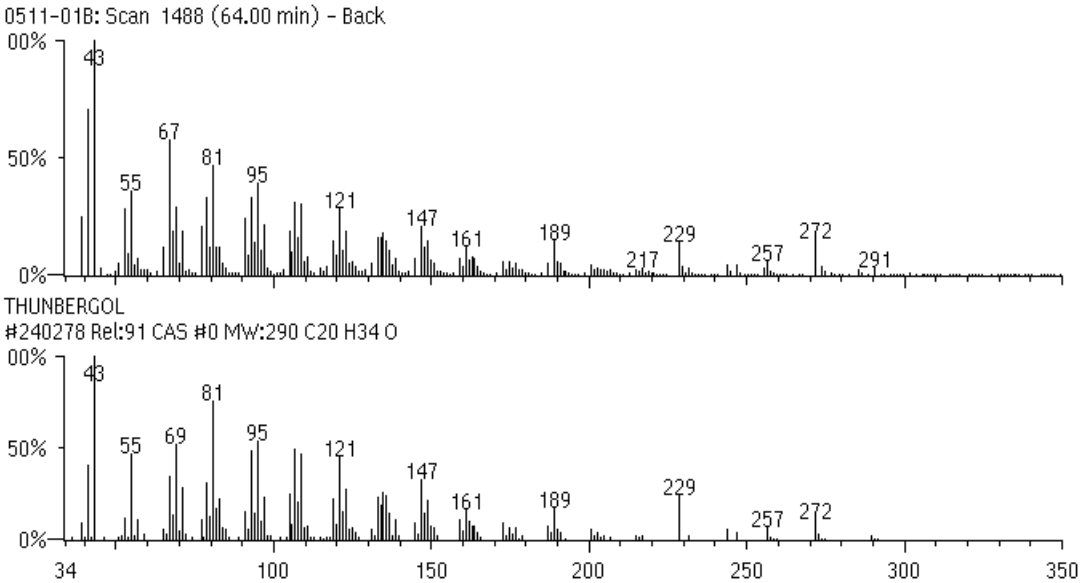
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
64.00		THUNBERGOL

A CEMBRATRIENOL

Serial #240278 CAS #0
MW 290 Quality 862
C20 H34 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

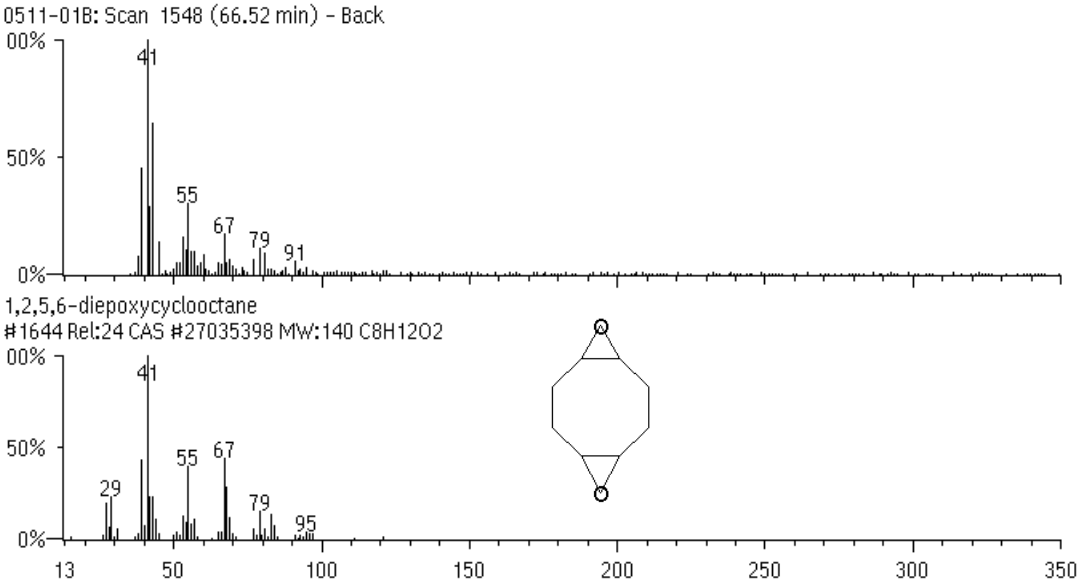
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
66.52		1,2,5,6-diepoxycyclooctane

2,7-dioxatricyclo[4.4.0.0(3,8)-]decane

Serial #1644 CAS #27035398
MW 140 Quality 129
C8H12O2



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

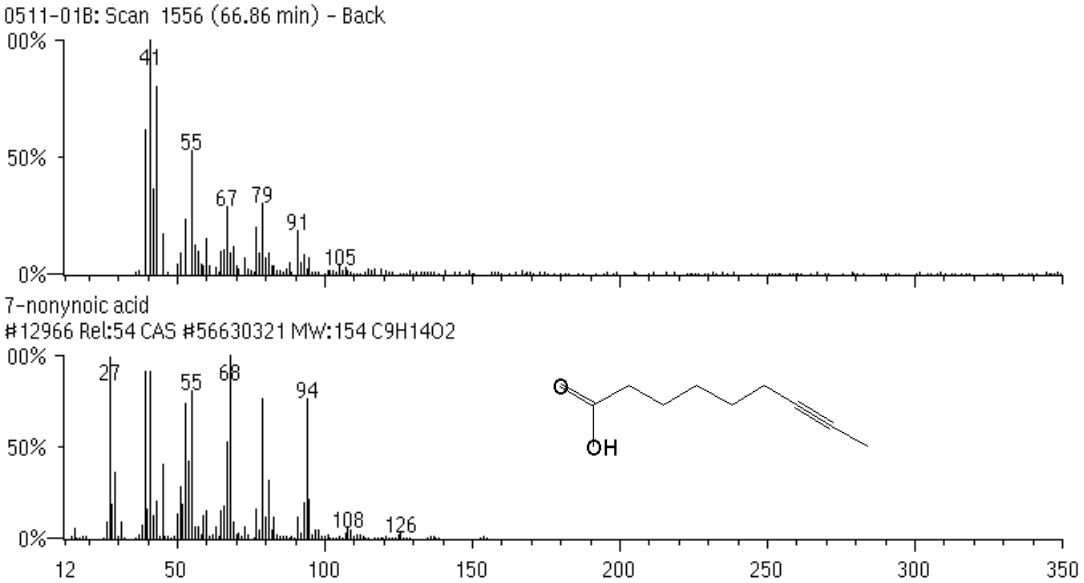
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
66.86		7-nonynoic acid

Serial #12966 CAS #56630321
MW 154 Quality 32
C9H14O2



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

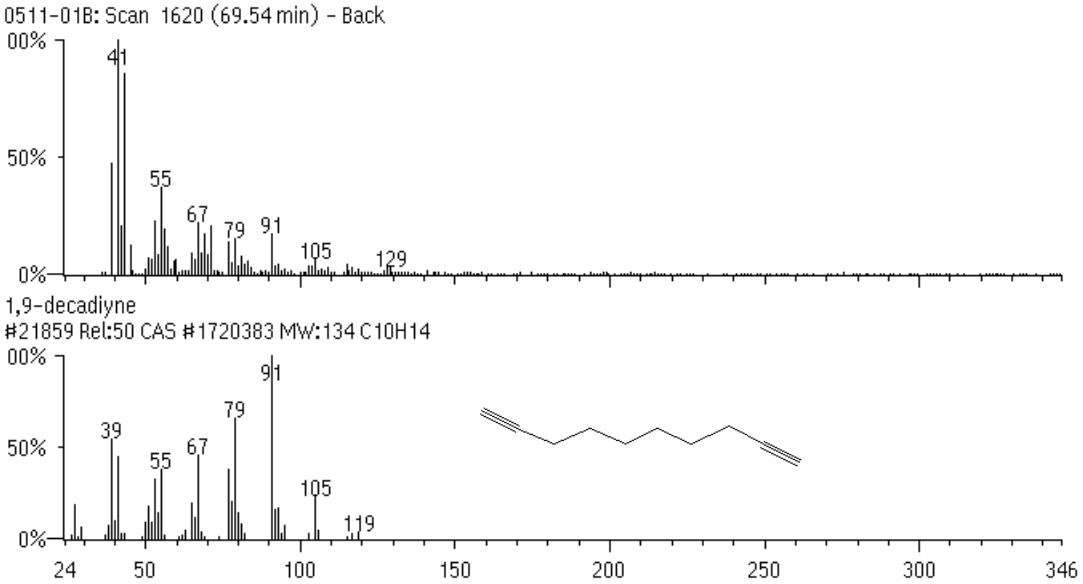
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
69.54		1,9-decadiyne

Serial #21859 CAS #1720383
MW 134 Quality 387
C10H14



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

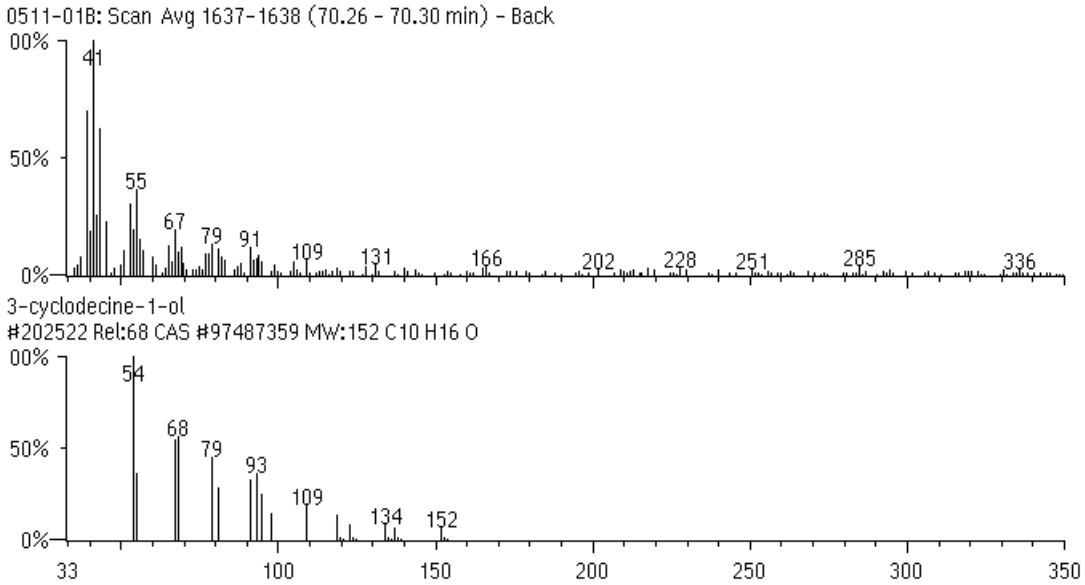
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
70.26-70.30		3-cyclodecine-1-ol

3-Cyclodecyn-1-ol

Serial #202522 CAS #97487359
MW 152 Quality 296
C10 H16 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

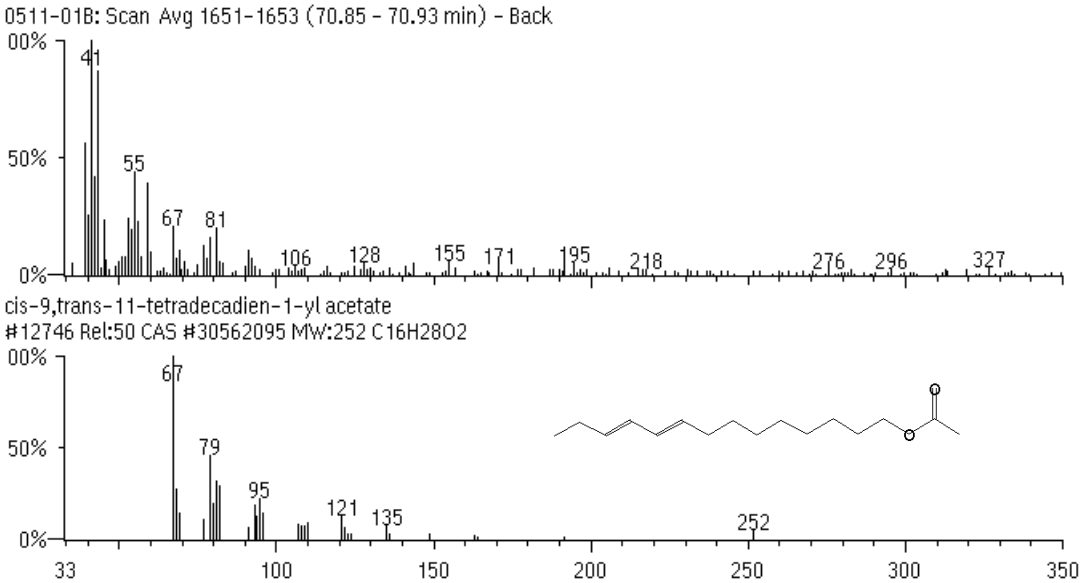
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
70.85-70.93		cis-9,trans-11-tetradecadien-1-yl acetate

9,11-tetradecadien-1-ol, acetate, (z,e)-

Serial #12746 CAS #30562095
MW 252 Quality 131
C16H28O2



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

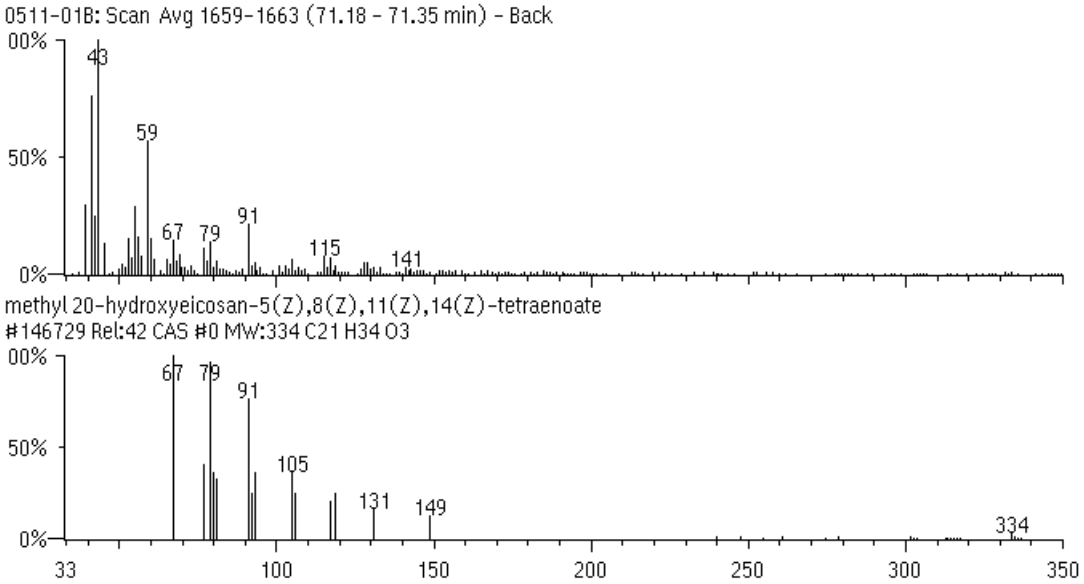
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
71.18-71.35		methyl 20-hydroxyeicosan-5(Z),8(Z),11(Z),14(Z)-tetraenoate

Serial #146729 CAS #0
MW 334 Quality 260
C21 H34 O3



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

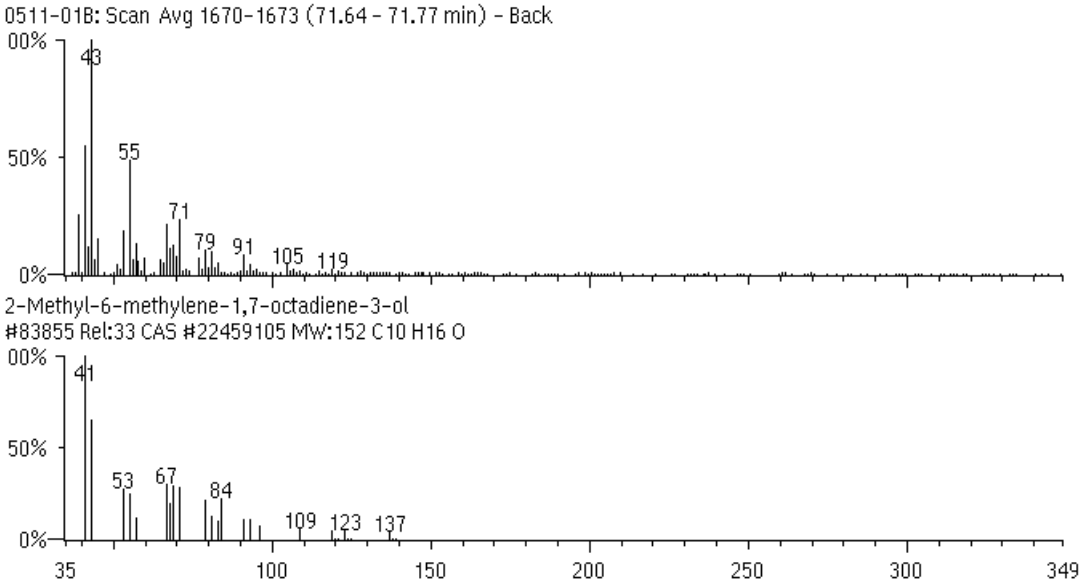
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
71.64-71.77		2-Methyl-6-methylene-1,7-octadiene-3-ol

1,7-Octadien-3-ol, 2-methyl-6-methylene-

Serial #83855 CAS #22459105
MW 152 Quality 444
C10 H16 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

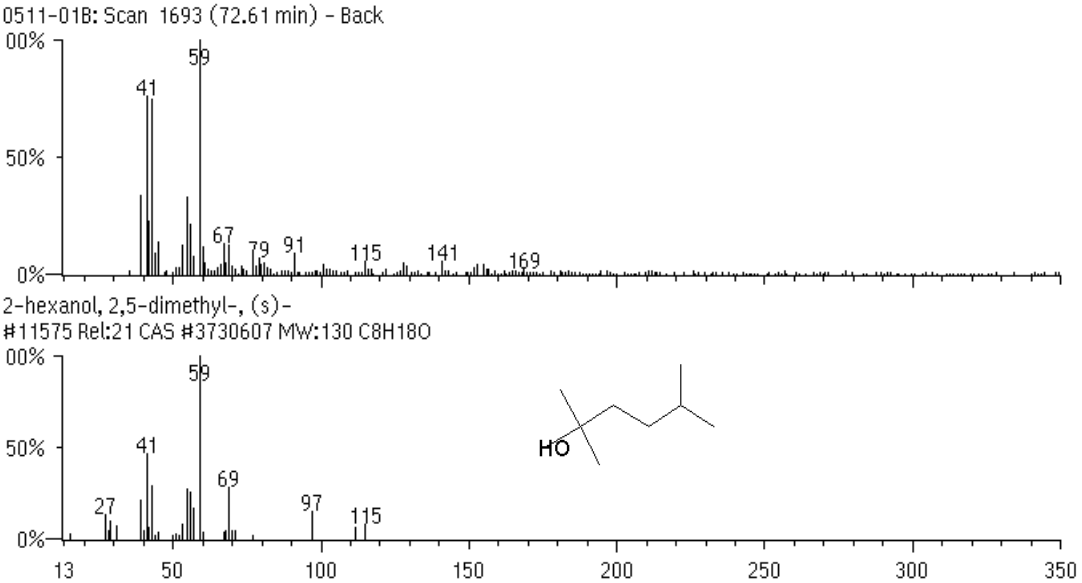
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
72.61		2-hexanol, 2,5-dimethyl-, (s)-

2-hexanol, 2,5-dimethyl-, (s)-(+)-
2,5-dimethyl-2-hexanol
2-hexanol, 2,5-dimethyl-

Serial #11575 CAS #3730607
MW 130 Quality 481
C8H18O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

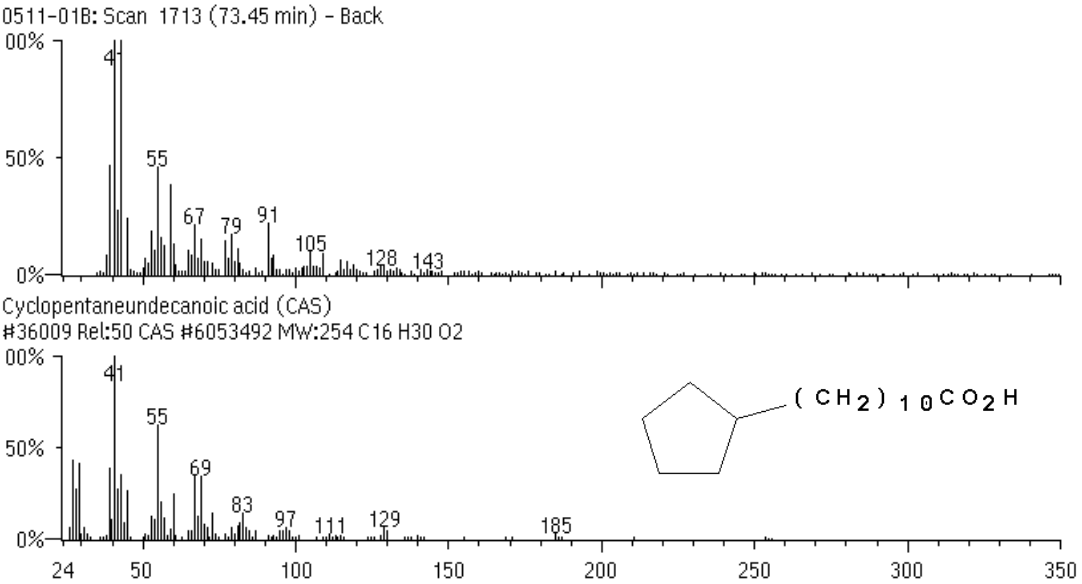
Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
73.45		Cyclopentaneundecanoic acid (CAS)

11-CYCLOPENTANYLUNDECANOIC ACID
DIHYDROHYDNOCARPIC ACID

Serial #36009 CAS #6053492
MW 254 Quality 973
C16 H30 O2



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

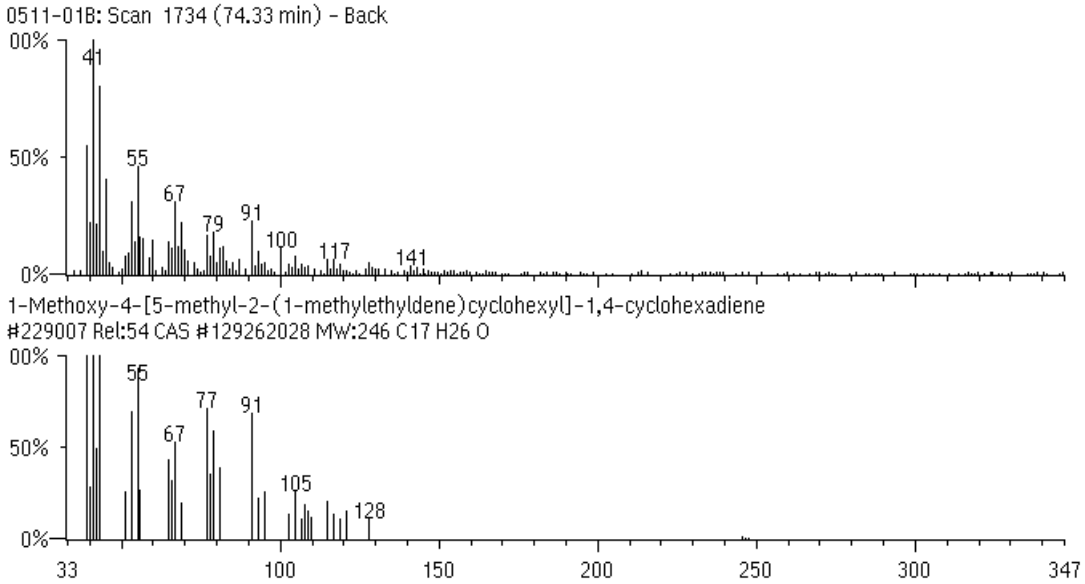
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
74.33		1-Methoxy-4-[5-methyl-2-(1-methylethyldene)cyclohexyl]-1,4-cyclohexadiene

Serial #229007 CAS #129262028
MW 246 Quality 451
C17 H26 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

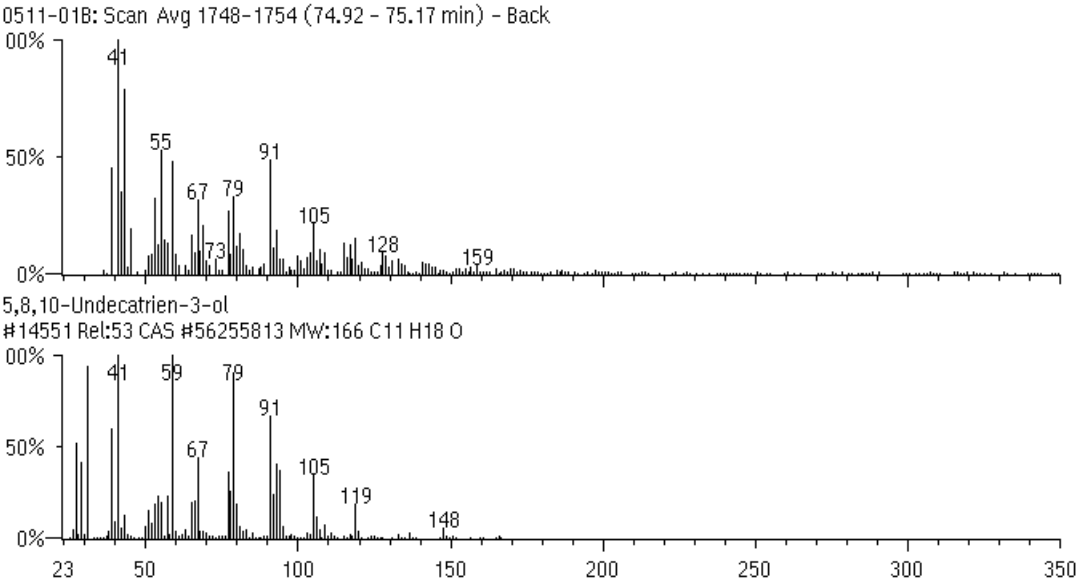
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
74.92-75.17		5,8,10-Undecatrien-3-ol

Serial #14551 CAS #56255813
MW 166 Quality 992
C11 H18 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

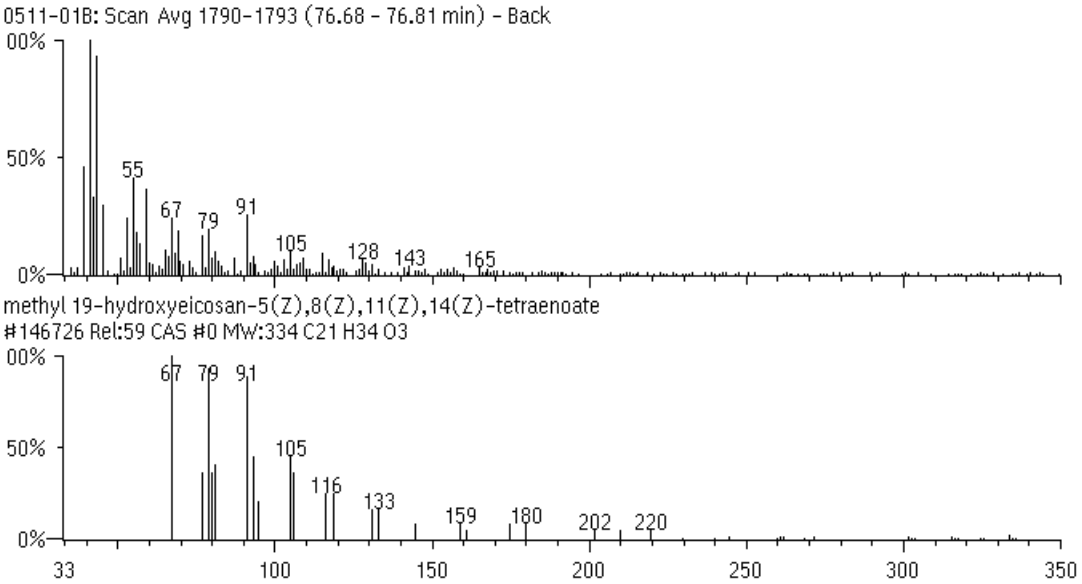
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-01B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Aire	Noms chimiques
76.68-76.81		methyl 19-hydroxyeicosan-5(Z),8(Z),11(Z),14(Z)-tetraenoate

Serial #146726 CAS #0
MW 334 Quality 363
C21 H34 O3



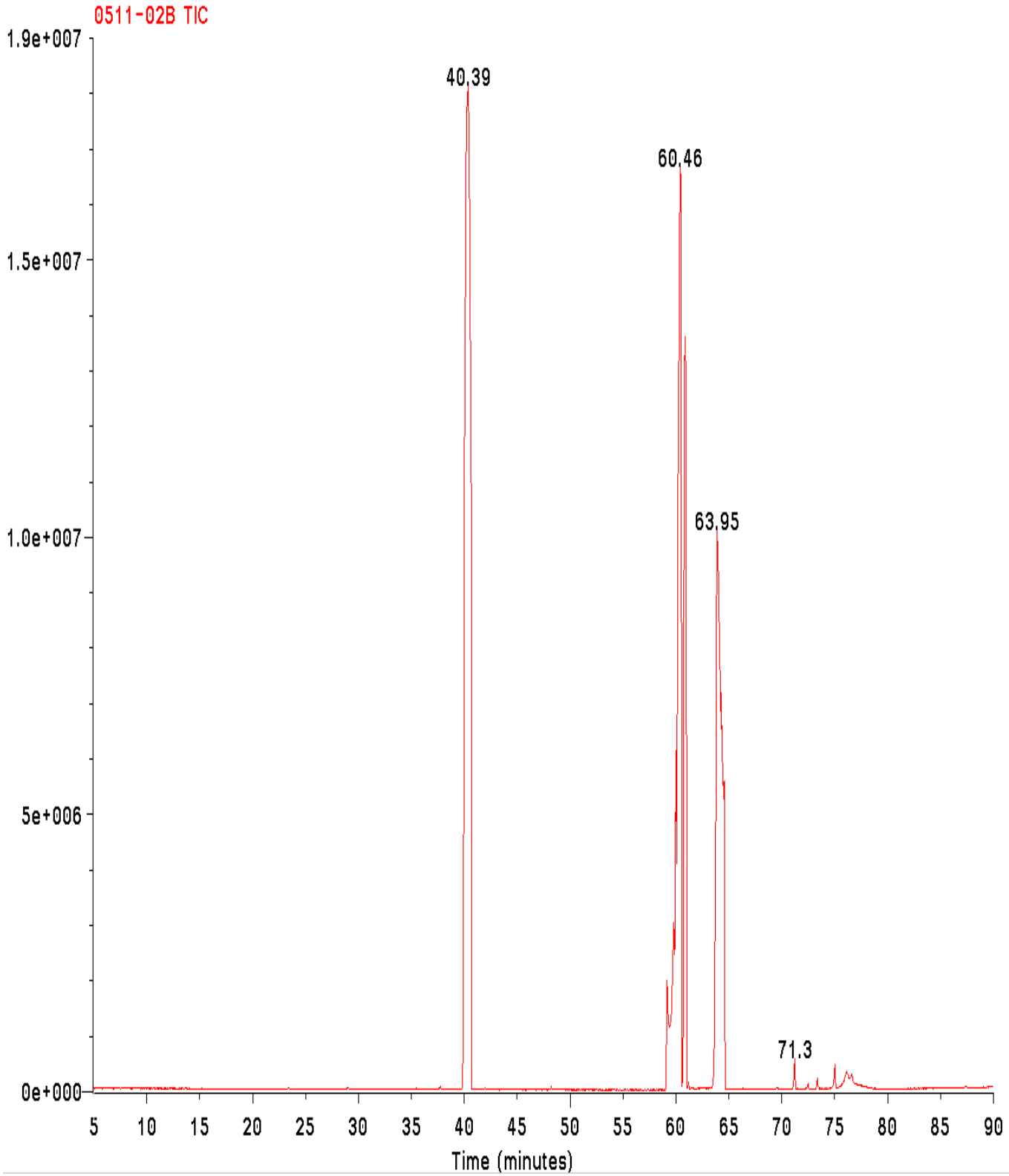


Figure 8
Chromatogramme ionique total **pins « malades »** (après méthylation in-situ »)

DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Résumé des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-02B

RT (min.)	Nom chimique CAS #
23.38-23.46	6-carbomethoxybicyclo[4.3.0]non-2-en-4-one CAS #97644-98-9
29.00	2,3-trans-dimethyl-2-methoxyl-isopropylidenecyclo-propane CAS #0
37.82	6-(1Z,3-butadienyl)-1,4-cycloheptadiene CAS #84899-15-0
40.39	trans-caryophyllene CAS #0
42.02	3,4-epoxy-hept-5-ene-1-yne (cis,trans 38:62) CAS #80956-81-6
59.20	ethyl 9-decenoate CAS #0
59.83	l-limonene CAS #5989-54-8
60.04	hexadecanoic acid, methyl ester CAS #112-39-0
60.42	cembrene CAS #1898-13-1
60.97	cembrene CAS #1898-13-1
61.26	1,2-butadiene, 3-methyl- CAS #598-25-4
63.95	thunbergol CAS #0
71.30	2,2-dicyclopropyl-3-methylenebicyclo[3.2.1]oct-6-ene CAS #0
73.44	myrcenol CAS #543-39-5
75.08	trans-caryophyllene CAS #0
76.21	4-[5-methyl-2-(1-methylethylidene)cyclohexyl]-3-cyclohexen-1-one CAS #129194-15-6
76.72	pentanedioic acid, 2-oxo-, dimethyl ester CAS #13192-04-6

DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

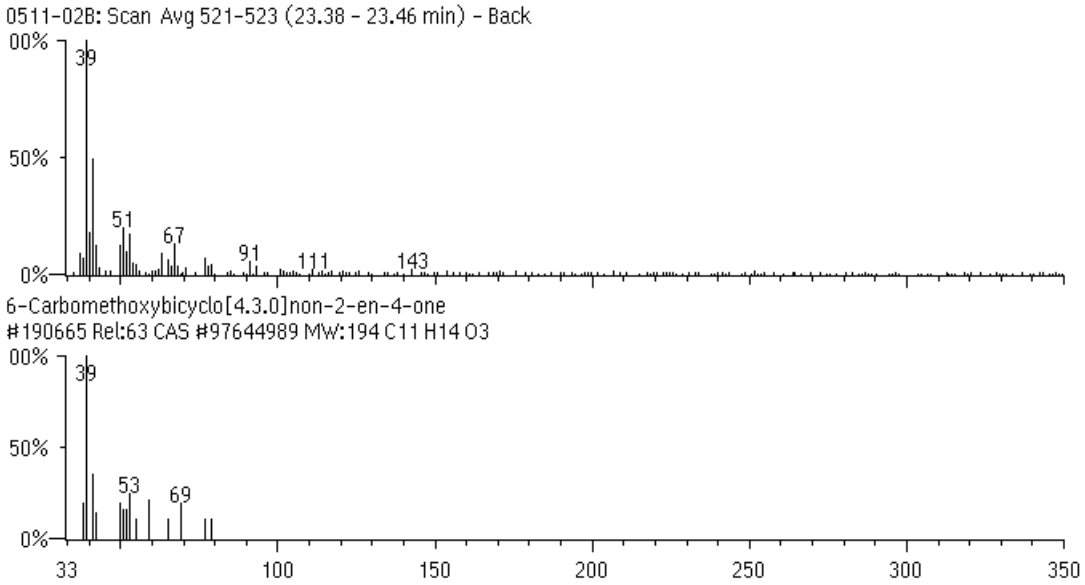
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-02B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
23.38-23.46	6-Carbomethoxybicyclo[4.3.0]non-2-en-4-one

Serial #190665 CAS #97644989
MW 194 Quality 309
C11 H14 O3



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

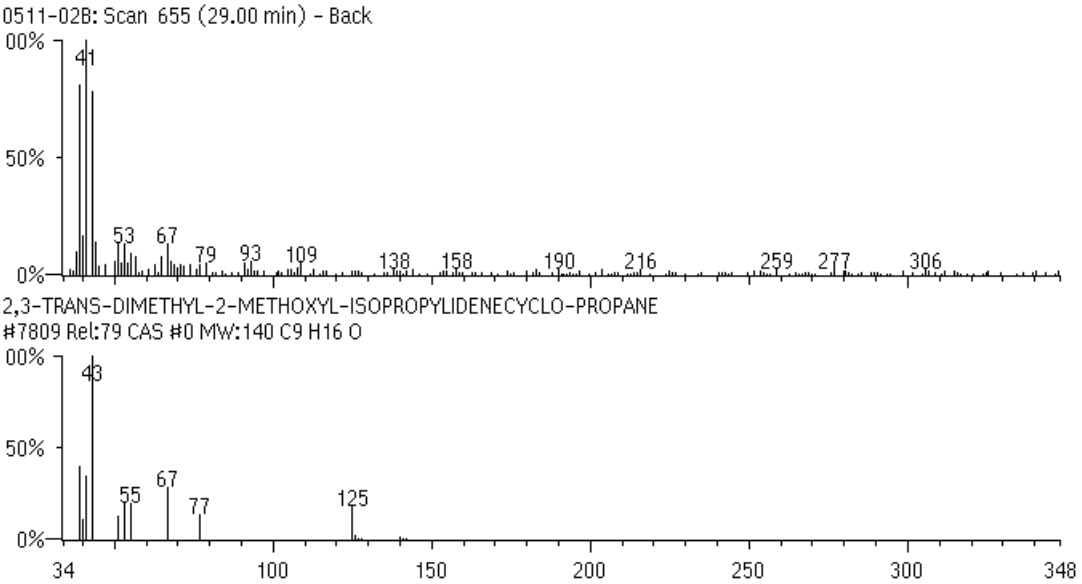
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-02B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
29.00	2,3-TRANS-DIMETHYL-2-METHOXYL-ISOPROPYLIDENECYCLO-PROPANE

Serial #7809 CAS #0
MW 140 Quality 251
C9 H16 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

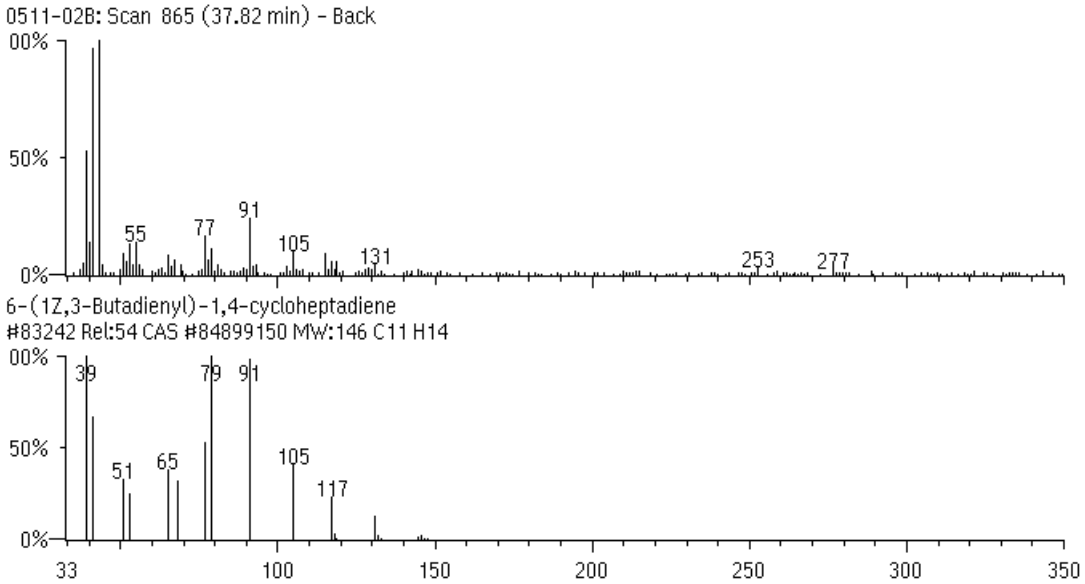
Fichier 0511-02B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
37.82	6-(1Z,3-Butadienyl)-1,4-cycloheptadiene

1,4-Cycloheptadiene, 6-(1,3-butadienyl)-, (Z)-(.+-.)- (CAS)
6-[(1Z)-1,3-BUTADIENYL]-1,4-CYCLOHEPTADIENE

Serial #83242 CAS #84899150
MW 146 Quality 342
C11 H14



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

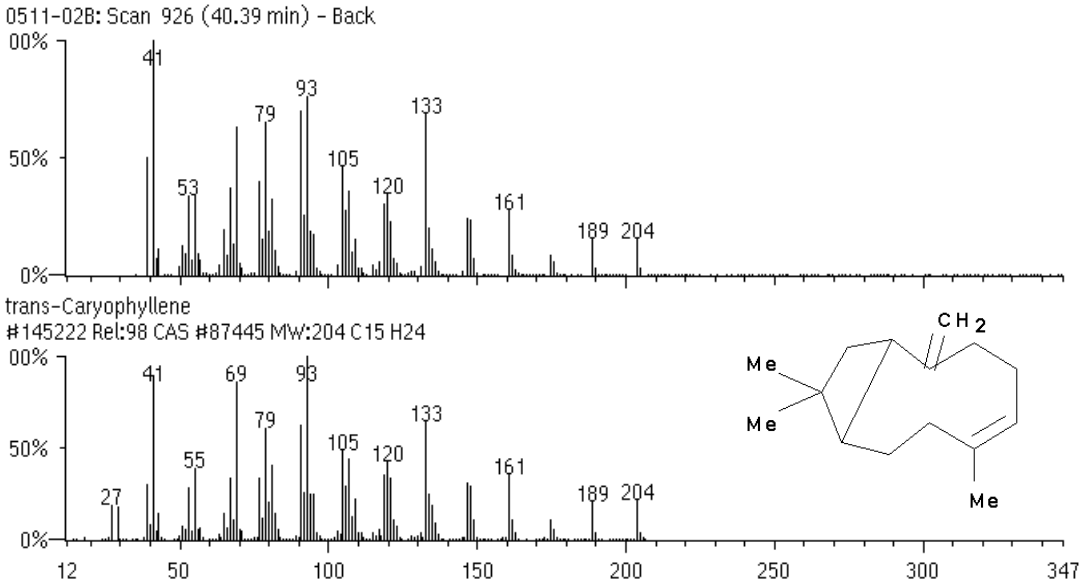
Fichier 0511-02B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
40.39	trans-Caryophyllene

Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS)
l-Caryophyllene
(-)-Caryophyllene
Caryophyllene
.beta.-Caryophyllen
.beta.-Caryophyllene
.beta.-Caryophyllene, (-)
Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, (E)-(1R,9S)-(-)-
(-)-.beta.-Caryophyllene
CARYOPHYLLEN
BETA-CARYOPHYLLENE
4,11,11-trimethylbicyclo[7.2.0]undec-4-ene
.beta.-Caryophyllene,
(-)-trans-Caryophyllene

Serial #145222 CAS #87445
MW 204 Quality 866
C15 H24



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

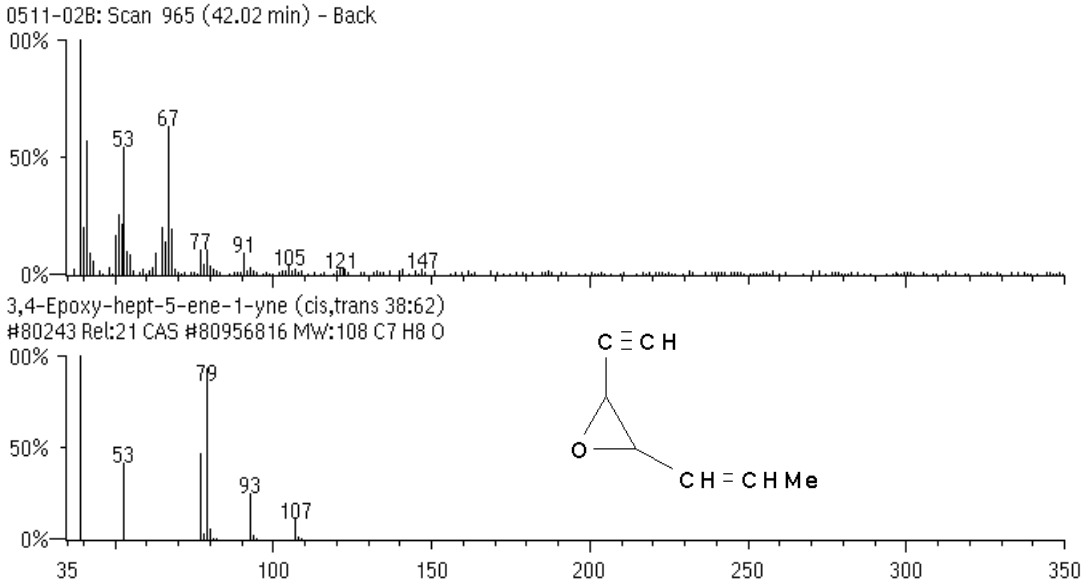
Fichier 0511-02B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
42.02	3,4-Epoxy-hept-5-ene-1-yne (cis,trans 38:62)

Oxirane, 2-ethynyl-3-(1-propenyl)-, cis- (CAS)
3,4-Epoxy-5-methyl-hex-5-ene-1-yne (cis,trans 16:84)

Serial #80243 CAS #80956816
MW 108 Quality 232
C7 H8 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

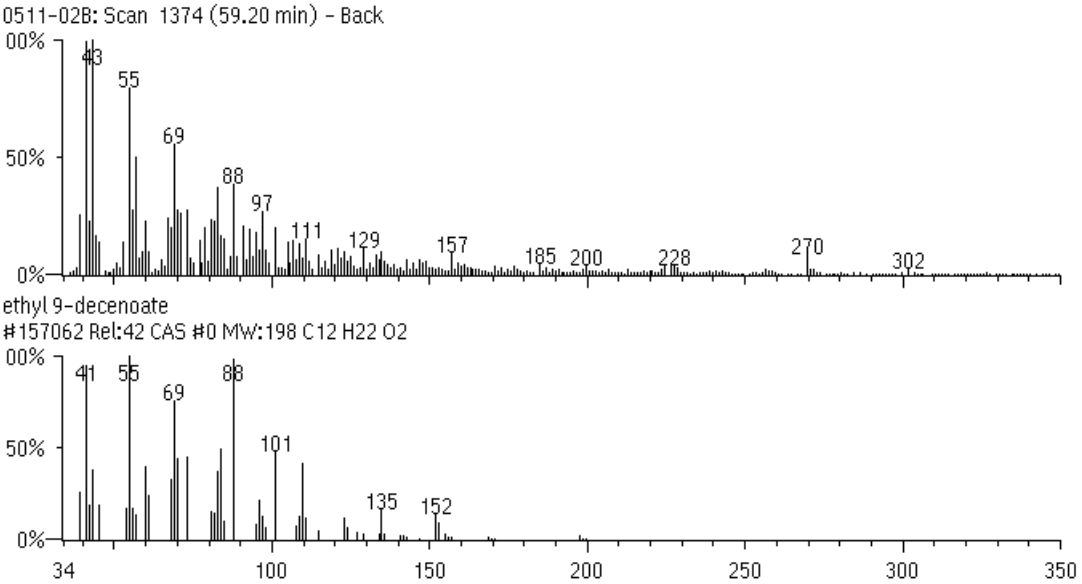
Fichier 0511-02B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
59.20	ethyl 9-decenoate

ETHYL 9-DECANOATE

Serial #157062 CAS #0
MW 198 Quality 842
C12 H22 O2



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

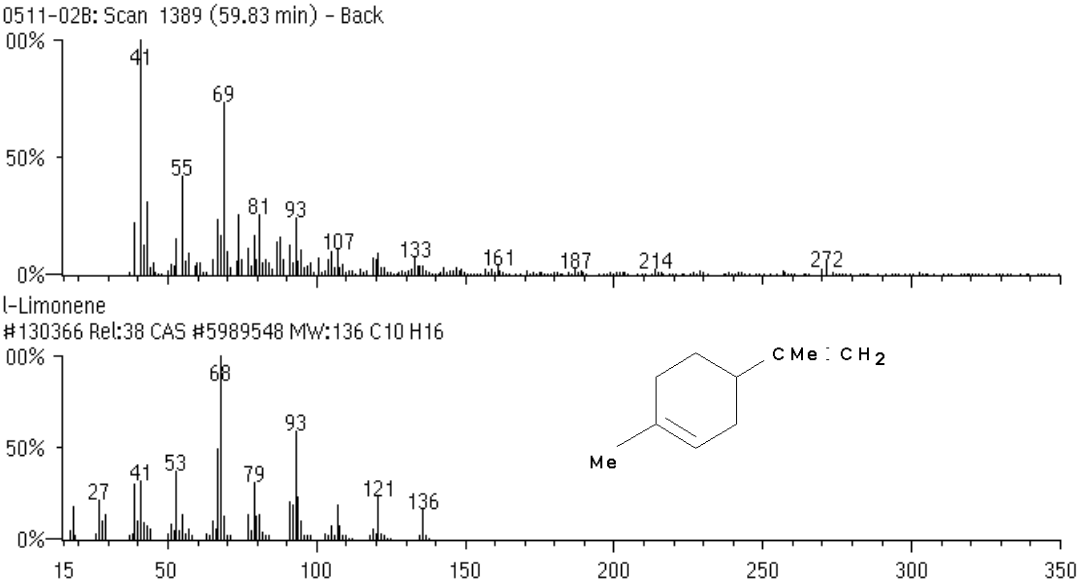
Fichier 0511-02B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
59.83	l-Limonene

Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, (S)- (CAS)
$ (-)-Limonene
p-Mentha-1,8-diene, (S)-(-)-
(-)-Limonene
(-)-(S)-Limonene
(S)-Limonene
.beta.-Limonene
(S)-(-)-Limonene

Serial #130366 CAS #5989548
MW 136 Quality 892
C10 H16



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

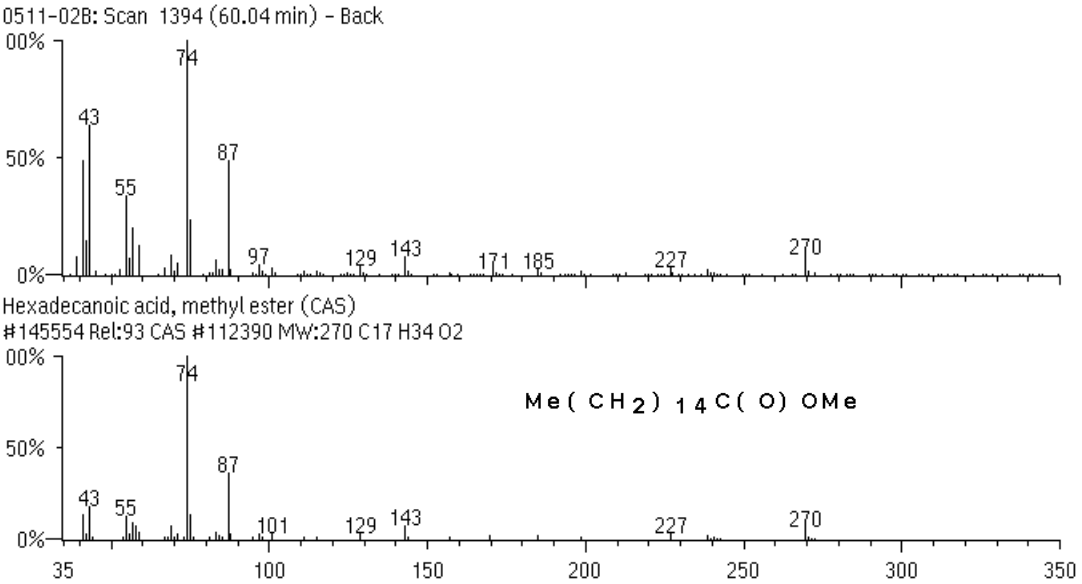
Fichier 0511-02B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
60.04	Hexadecanoic acid, methyl ester (CAS)

Methyl palmitate
Methyl hexadecanoate
Methyl n-hexadecanoate
Uniphat A60
Metholene 2216
Palmitic acid methyl ester
Palmitic acid, methyl ester
n-Hexadecanoic acid methyl ester
PALMITIC ACID-METHYL ESTER
METHYLPALMITATE

Serial #145554 CAS #112390
MW 270 Quality 555
C17 H34 O2



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

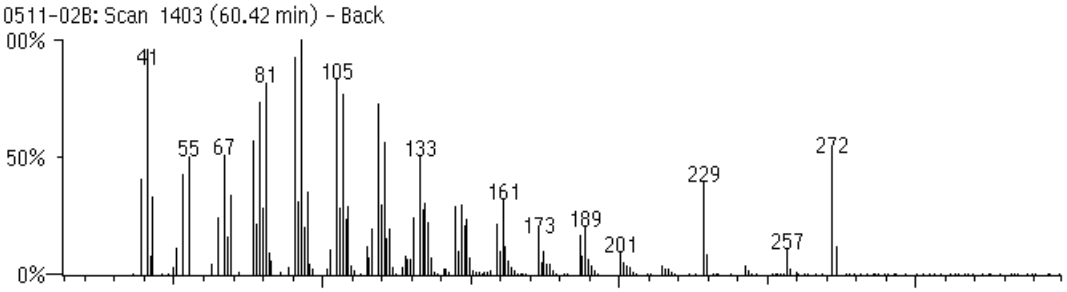
Fichier 0511-02B.TIC

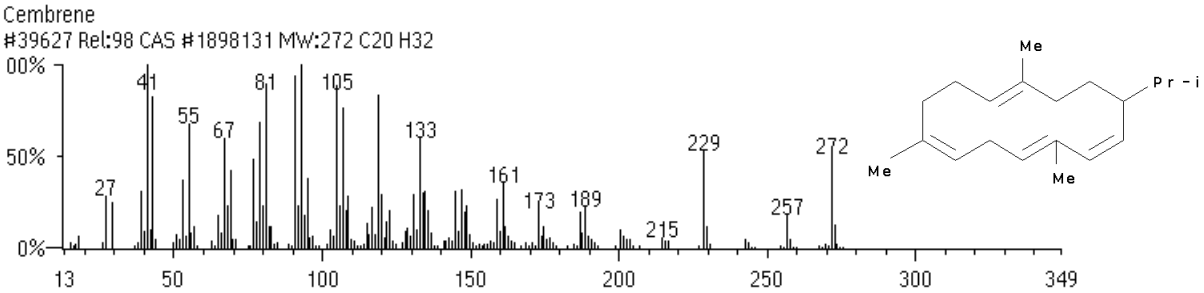
Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
60.42	Cembrene

1,3,6,10-Cyclotetradecatetraene, 3,7,11-trimethyl-14-(1-methylethyl)-, [S-(E,Z,E,E)]- (CAS)
Thunbergene
Thunbergen
1,3,6,10-Cyclotetradecatetraene, 14-isopropyl-3,7,11-trimethyl-, (+)-
(1S,2E,7E,11E)-2,4(18),7,11-Cembratraene
(S)-cembrene
(14S,1E,3Z,6E,10E)-14-isopropyl-3,7,11-trimethylcyclotetradeca-1,3,6,10-tetraene
1(S)-Cembrene
(S)-(+)-Cembrene
(+)-Thunbergene
(+)-Cembrene

Serial #39627 CAS #1898131
MW 272 Quality 898
C20 H32





DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

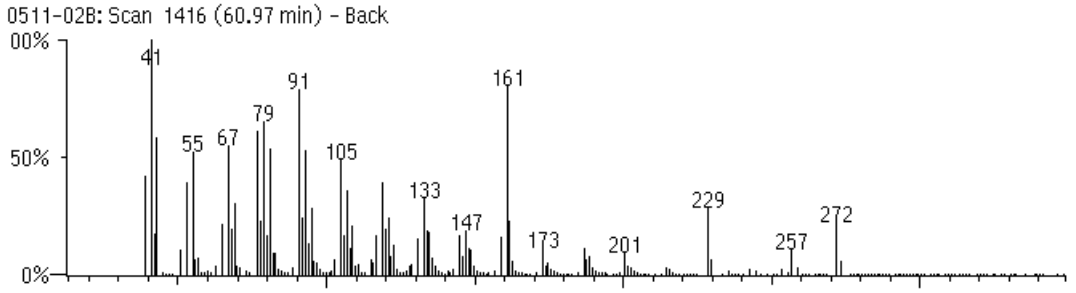
Fichier 0511-02B.TIC

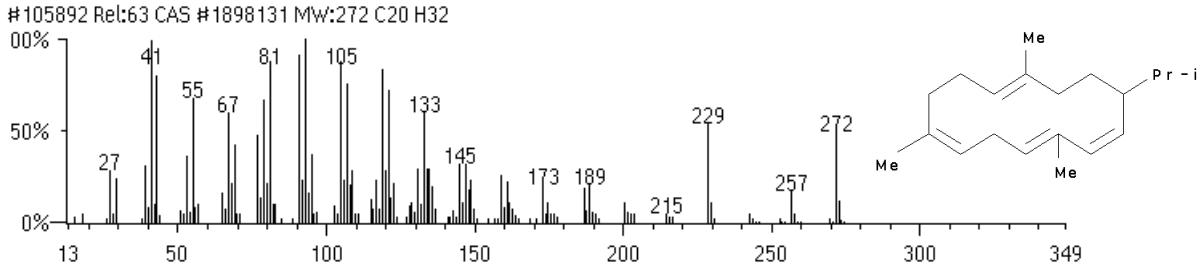
Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
60.97	Cembrene

1,3,6,10-Cyclotetradecatetraene, 3,7,11-trimethyl-14-(1-methylethyl)-, [S-(E,Z,E,E)]- (CAS)
Thunbergene
Thunbergen
1,3,6,10-Cyclotetradecatetraene, 14-isopropyl-3,7,11-trimethyl-, (+)-
(1S,2E,7E,11E)-2,4(18),7,11-Cembratraene
(S)-cembrene
(14S,1E,3Z,6E,10E)-14-isopropyl-3,7,11-trimethylcyclotetradeca-1,3,6,10-tetraene
1(S)-Cembrene
(S)-(+)-Cembrene
(+)-Thunbergene
(+)-Cembrene

Serial #105892 CAS #1898131
MW 272 Quality 900
C20 H32





DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

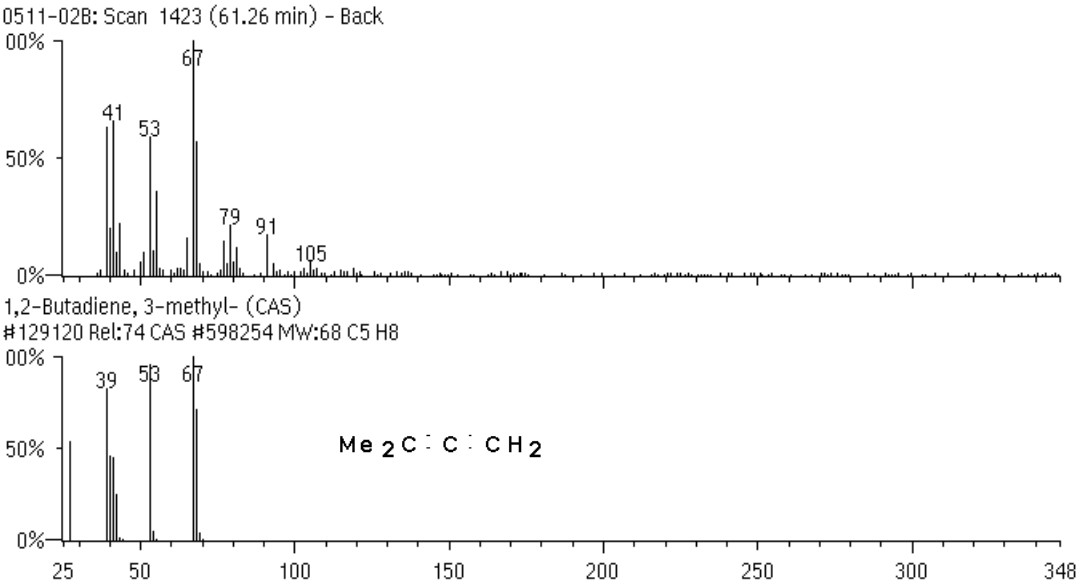
Fichier 0511-02B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
61.26	1,2-Butadiene, 3-methyl- (CAS)

3-Methyl-1,2-butadiene
1,1-Dimethylallene
3,3-Dimethylallene
1,1-Dimethylallylene
2-Methyl-2,3-butadiene

Serial #129120 CAS #598254
MW 68 Quality 692
C5 H8



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

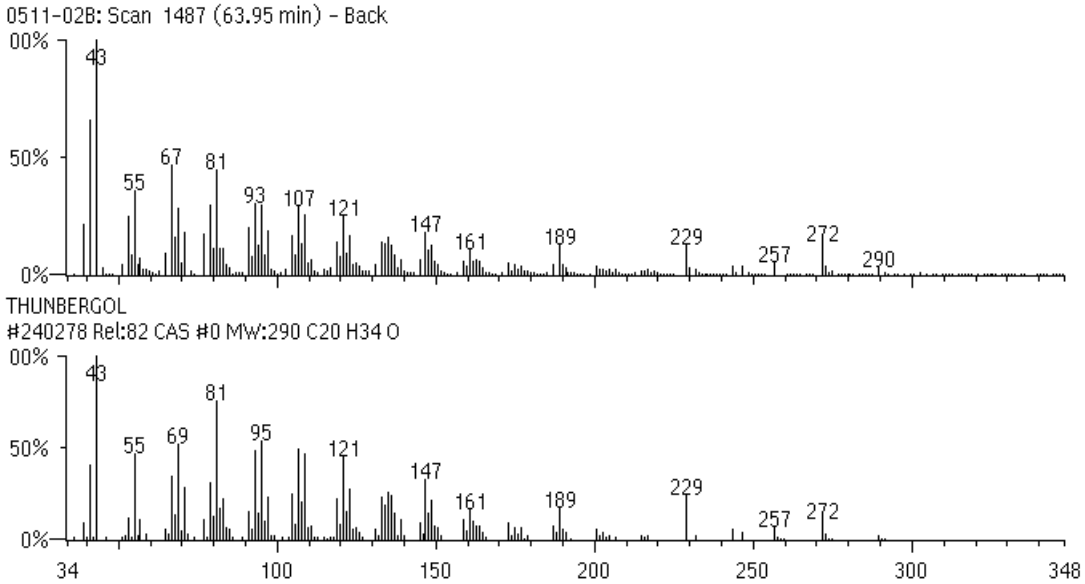
Fichier 0511-02B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
63.95	THUNBERGOL

A CEMBRATRIENOL

Serial #240278 CAS #0
MW 290 Quality 862
C20 H34 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

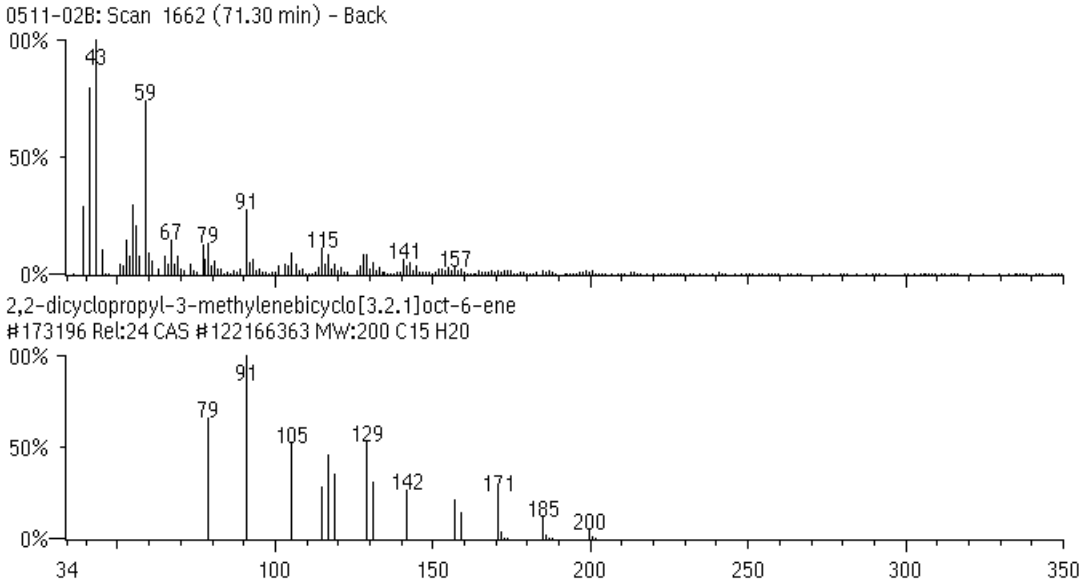
Fichier 0511-02B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
71.30	2,2-dicyclopropyl-3-methylenebicyclo[3.2.1]oct-6-ene

Bicyclo[3.2.1]oct-6-ene, 2,2-dicyclopropyl-3-methylene-, (.+-.)-

Serial #173196 CAS #122166363
MW 200 Quality 177
C15 H20



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

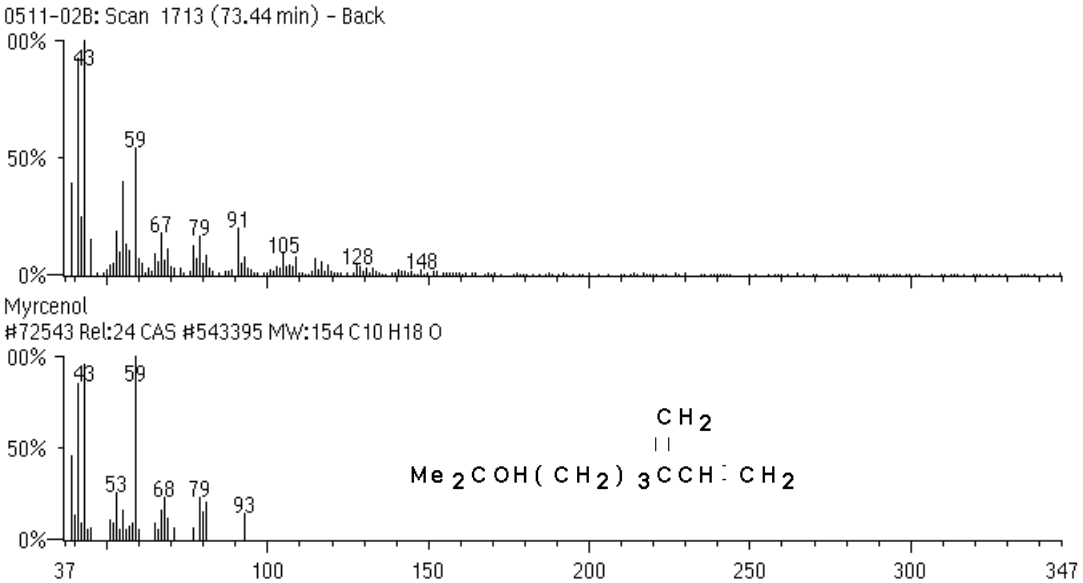
Fichier 0511-02B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
73.44	Myrcenol

7-Octen-2-ol, 2-methyl-6-methylene- (CAS)
2-Methyl-6-methylene-7-octen-2-ol
7-OCTENE-2-OL, 2-METHYL-6-METHYLENE-
2-myrcenol
7-Hydroxy-7-methyl-3-methylene-1-octene

Serial #72543 CAS #543395
MW 154 Quality 534
C10 H18 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

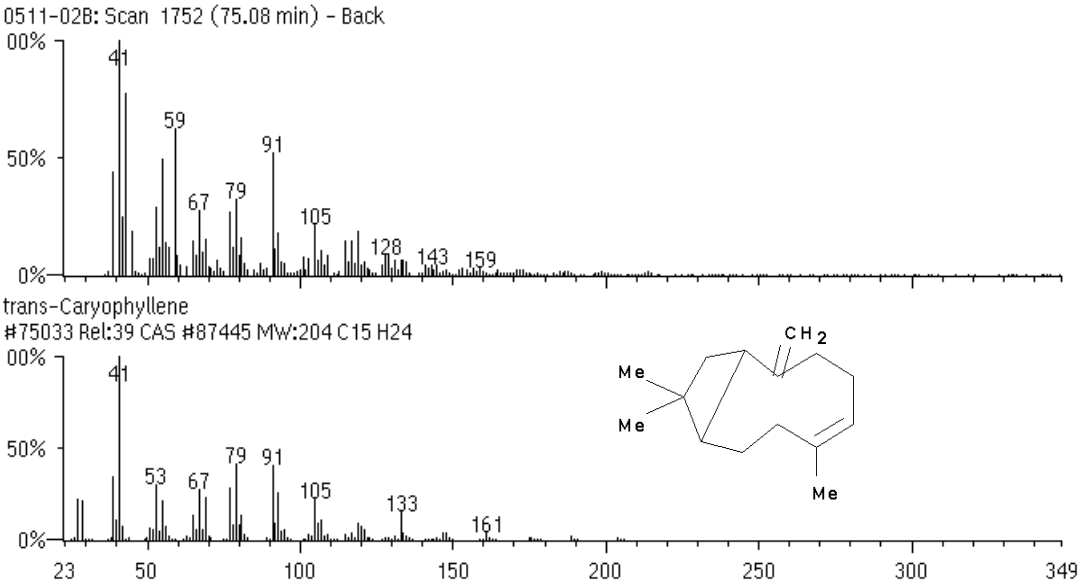
Fichier 0511-02B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
75.08	trans-Caryophyllene

Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS)
l-Caryophyllene
(-)-Caryophyllene
Caryophyllene
.beta.-Caryophyllen
.beta.-Caryophyllene
.beta.-Caryophyllene, (-)
Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, (E)-(1R,9S)-(-)-
(-)-.beta.-Caryophyllene
CARYOPHYLLEN
BETA-CARYOPHYLLENE
4,11,11-trimethylbicyclo[7.2.0]undec-4-ene
.beta.-Caryophyllene,
(-)-trans-Caryophyllene

Serial #75033 CAS #87445
MW 204 Quality 900
C15 H24



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

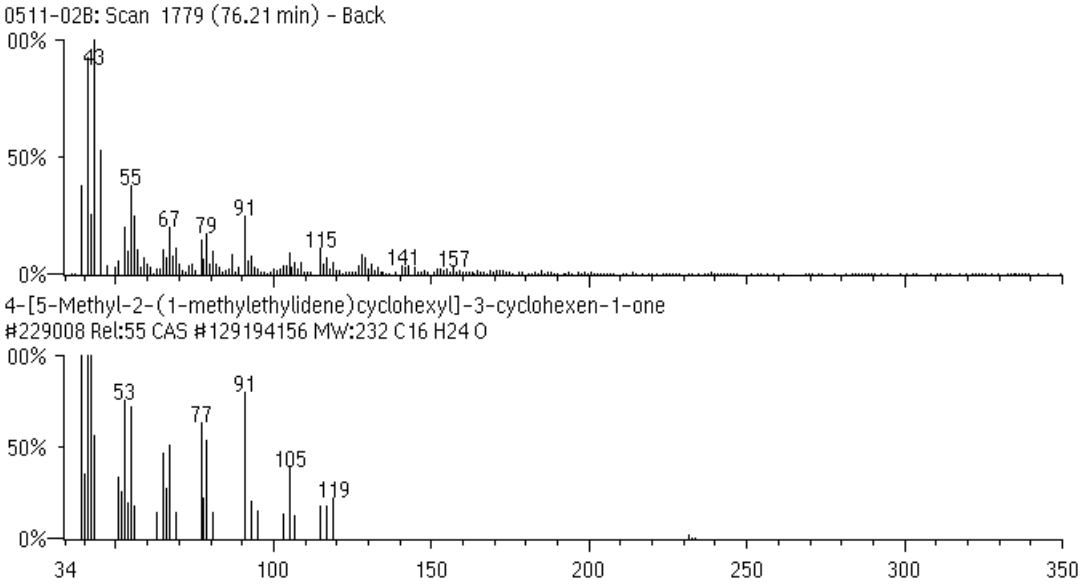
(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

Fichier 0511-02B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
76.21	4-[5-Methyl-2-(1-methylethylidene)cyclohexyl]-3-cyclohexen-1-one

Serial #229008 CAS #129194156
MW 232 Quality 437
C16 H24 O



DEPISTAGE SYSTEMATIQUE GC/MS : Détail des propositions de similitude spectrale

(algorithme de recherche PBM sur 700.000 spectres de masse de référence : spectrothèques Wiley-NBS + NIST-EPA-MSDC + propriétaire AnAlytikA)

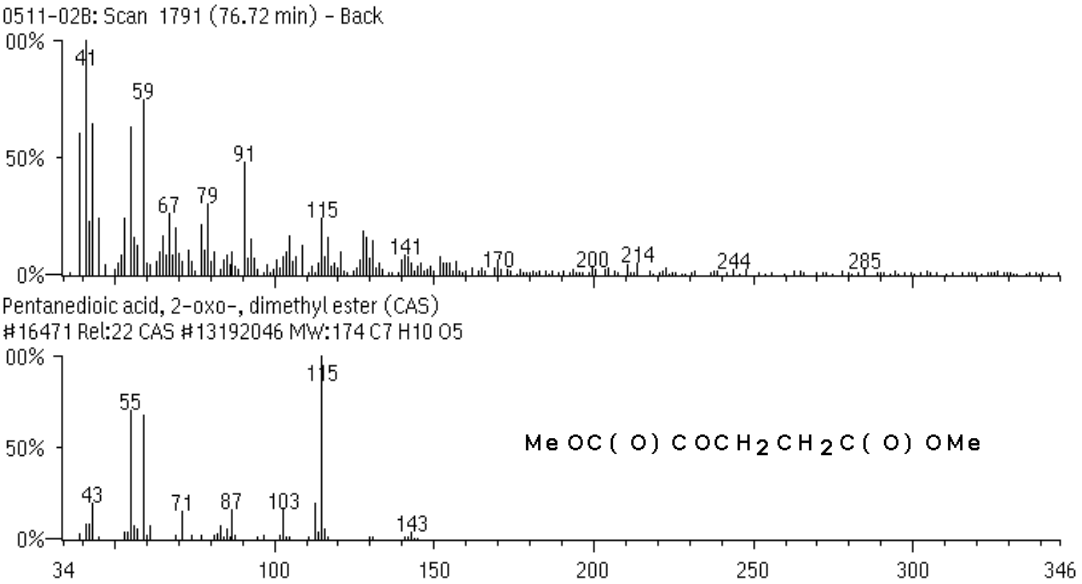
Fichier 0511-02B.TIC

Rel = % similitude spectrale
% > 75 = identifié - **31 < % < 75%** = très probable - **10 < % < 30** = probable - **% < 10** = possible

RT (min.)	Noms chimiques
76.72	Pentanedioic acid, 2-oxo-, dimethyl ester (CAS)

Dimethyl 2-oxoglutarate
Glutaric acid, 2-oxo-, dimethyl ester

Serial #16471 CAS #13192046
MW 174 Quality 1000
C7 H10 O5



Nos prestations sont réalisées en conformité avec les critères de la norme internationale ISO 17025
Ceci atteste de notre compétence technique dans les domaines de la chromatographie et de la spectrométrie de masse ainsi que du bon fonctionnement de notre système interne de management de la qualité.

CONDITIONS EXPERIMENTALES

Dépistage systématique GC/MS (1000 amu)
selon protocole analytique interne N° 160511

Echantillons

Référence AnAlytikA	Description
160511-01	Aiguilles de pins « sains »
160511-02	Aiguilles de pins « malades »

Traitement des échantillons

Pré-concentration
Extraction solide-liquide
Masse extraite (g): 2000
Solvant: pentane,_2,2,4-trimethyl-=isooctane CAS# 540-84-1

Dérivatisation
Réactif: tétraméthyl ammonium hydroxide=TMAH
Température (°C): 250 (injecteur)

Fichiers de données

Data: 0511-01A.TKF
Sample Pin sain Vol 1
CPSil-13CB_(polaire_Tmax=275-300C) 50m_0.32mm_1.2um 30C-(5min)-(3C/min)-250C-(10min)- DS=2min RUN=90min
H2=30mL/min @ 3psi SL=1.2min INJ=250C DET=265C Scan=35-350amu EMV=3000V THR=0
Scan Parameters:
SCAN every 10 secs for 2 min, base range GCMS_Off
SCAN every 0 secs for 88 min, base range MS_On 35-350 MS_On

Data: 0511-02A.TKF
Sample Pin malade Vol 2
CPSil-13CB_(polaire_Tmax=275-300C) 50m_0.32mm_1.2um 30C-(5min)-(3C/min)-250C-(10min)- DS=2min RUN=90min
H2=30mL/min @ 3psi SL=1.2min INJ=250C DET=265C Scan=35-350amu EMV=3000V THR=0
Scan Parameters:
SCAN every 10 secs for 2 min, base range GCMS_Off
SCAN every 0 secs for 88 min, base range MS_On 35-350 MS_On

Data: 0511-01B.TKF
Sample Pin sain + TMAH Vol 1
CPSil-13CB_(polaire_Tmax=275-300C) 50m_0.32mm_1.2um 30C-(5min)-(3C/min)-250C-(10min)- DS=2min RUN=90min
H2=30mL/min @ 3psi SL=1.2min INJ=250C DET=265C Scan=35-350amu EMV=3000V THR=0
Scan Parameters:
SCAN every 10 secs for 2 min, base range GCMS_Off
SCAN every 0 secs for 88 min, base range MS_On 35-350 MS_On

Data: 0511-02B.TKF
Sample Pin malade + TMAH Vol 2
CPSil-13CB_(polaire_Tmax=275-300C) 50m_0.32mm_1.2um 30C-(5min)-(3C/min)-250C-(10min)- DS=2min RUN=90min
H2=30mL/min @ 3psi SL=1.2min INJ=250C DET=265C Scan=35-350amu EMV=3000V THR=0
Scan Parameters:
SCAN every 10 secs for 2 min, base range GCMS_Off
SCAN every 0 secs for 88 min, base range MS_On 35-350 MS_On

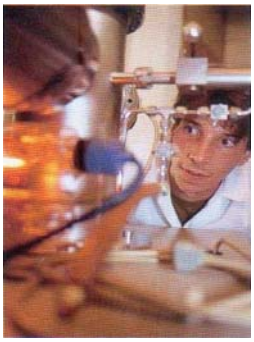
Nos prestations sont réalisées en conformité avec les critères de la norme internationale ISO 17025
Ceci atteste de notre compétence technique dans les domaines de la chromatographie et de la spectrométrie de masse ainsi que du bon fonctionnement de notre système interne de management de la qualité.

Centre indépendant Analytika
Investigations & expertises des contaminations chimiques
au service des particuliers, associations et entreprises depuis 1991

Partenaire de l'ADEME, de la Région PACA et du TGI d'Aix en Provence

Le centre Analytika : un acteur innovant pour toutes investigations de la contamination chimique des milieux et des produits.

Pionnier français de l'investigation systématique en chimie analytique, le centre Analytika intervient depuis 1991 au service des entreprises, associations ou particuliers, réalisant le dépistage de tous les contaminants chimiques éventuellement détectables dans les milieux naturels (air, sol, eau), les matières premières, et les produits manufacturés, au-delà de la seule réglementation en vigueur.



1. Structure autonome, privée et totalement indépendante.
2. Centre de recherche doté de puissants moyens analytiques de détection et d'identification.
3. Approche globale et systématique (non-"ciblée") de l'investigation, pour une vision sincère, complète et documentée de l'ensemble des contaminants effectivement présents dans l'échantillon expertisé.

Nos prestations s'adressent donc à quiconque désire connaître précisément et complètement nature et ampleur d'une pollution dont il craint ou suspecte l'existence dans son environnement, quel que soit le cadre dans lequel s'inscrit sa démarche :

- Particuliers, associations ou collectivités préoccupés de la qualité environnementale et de la salubrité des lieux de vie et des produits de consommation.

- Professionnels et industriels éco-responsables soucieux de la qualité de leurs matières premières et produits finis autant que de l'impact de leurs activités sur l'environnement ou la santé de leurs équipes.

Que votre motivation soit économique, réglementaire, écologique, ou technologique
confiez- vos travaux analytiques
au

Centre indépendant Analytika
Investigations & expertises
des contaminations chimiques
au service des particuliers, associations et entreprises depuis 1991

Investigation systématique non-"ciblée" de tous les contaminants chimiques **détectables** dans tous types d'échantillons (sols, eaux, air atmosphérique, produits manufacturés, polymères ou autres) avec identification par recherche de similitude spectrale.

Rapport analytique avec conclusions toxico-chimiques et résultats détaillés (pour chaque molécule détectée, sont fournis : nom chimique CAS et synonymes commerciaux, formule développée graphique et degré % de similitude spectrale).

Structure autonome et indépendante s'appuyant sur des techniques de pointe et un mode opératoire original de dépistage systématique (non-"ciblé"), nos prestations apportent - *au-delà de la seule réglementation en vigueur* - une réponse scientifique sincère, complète et documentée aux préoccupations relatives à la contamination chimique des milieux naturels et des produits manufacturés.

Libre des faiblesses du mode de fonctionnement des laboratoires accrédités, le nouvel éclairage apporté par nos preuves scientifiques complète leurs résultats partiels et les contredit même parfois.

Le centre Analytika poursuit cependant sa mission, convaincu du bien-fondé et de l'utilité sociétale de cette démarche innovante.

Votre contact : Tél.: +33 (0) 6 1866 7432
Bernard Tailliez bernard.tailliez@analytika.fr
Gérant – Fondateur http://www.analytika.fr

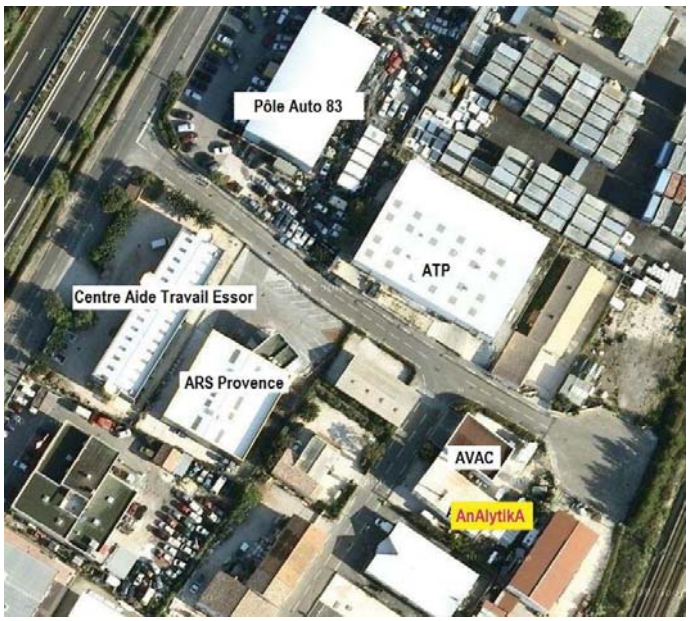
ANALYTIKA
Investigations & Expertises des contaminations chimiques

L'obligation de subir nous donne le Droit de Savoir (Jean ROSTAND 1894-1977)

Accès aux locaux du Centre Analytika

(GPS 43°13'49.76"N - 6°04'57.17"E}

https://www.google.com/maps/place/AnAlytikA/@43.2303366,6.0828123,18z/data=!4m2!3m1!1s0x12c93dee9fece 9fb:0xc20cf9bf6ba1ab0c/



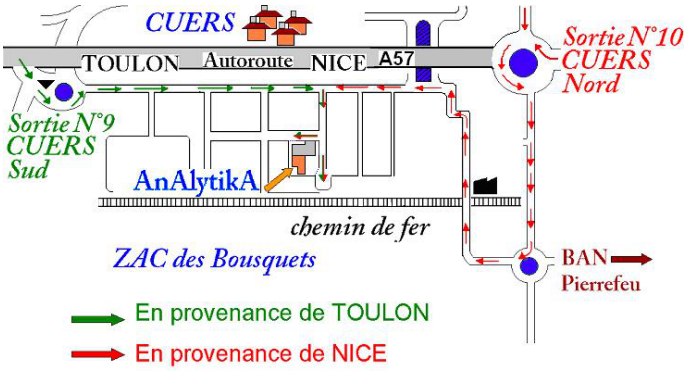
Visiteurs : 19 Rue de la Création / Livraisons : 130 Rue de l'Innovation
83390 Cuers (France)

En arrivant de l'ouest (Toulon ou Signes) par RN 97 ou A 57 :

emprunter la *sortie N° 9 Cuers-Sud*, puis à droite en direction de *ZAC des Bousquets* (reste alors à parcourir 1,5 Km environ).
A partir du plan d'orientation de la ZAC {où nous sommes repérés *Laboratoire ANALYTiKA*), longer l'autoroute *Boulevard des Bousquets* pendant 1300 m environ vers l'est et Nice.
Avant le garage Pôle Auto 83 (hangar bleu), tournez à droite *Rue de l'Innovation*, poursuivez jusqu'au bout de la rue et garez votre véhicule sur le parking circulaire en bordure de la voie ferrée.

En arrivant du Nord (Brignoles) ou de l'est (Nice) par RN 97 ou A 57 :

emprunter la *sortie N° 10 Cuers-Nord*, puis la *D14* (reste alors à parcourir 2,5 Km environ) en directions de *Cuers - Pierrefeu - Puget Ville*, puis de *Base Aéronavale*, et enfin de *ZAC des Bousquets*.
Après le passage à niveau SNCF, prendre à gauche en direction de *ZAC des Bousquets* et longer l'autoroute *Boulevard des Bousquets* pendant 400 m environ vers l'ouest et Toulon.
Après le garage Pôle Auto 83 {hangar bleu), tourner à gauche *Rue de l'Innovation*, poursuivre jusqu'au bout de la rue et garer votre véhicule sur le parking circulaire en bordure de la voie ferrée.



Votre contact : Tél.: +33 (0) 6 1866 7432
Bernard Tailliez bernard.tailliez@analytika.fr
Gérant – Fondateur http://www.analytika.fr

ANALYTIKA
Investigations & Expertises des contaminations chimiques

L'obligation de subir nous donne le Droit de Savoir (Jean ROSTAND 1894-1977)