

薰衣草精油的成分分析

摘要：采用 SCION 456C SQ 气相色谱-质谱联用仪对薰衣草精油中的化学成分进行了研究，共鉴定出 79 种化合物，其中主要的化合物为芳樟醇和乙酸芳樟酯，分别占总面积的 32.17% 和 28.63%，为该薰衣草精油的主要化学成分。

关键词：薰衣草精油；气相色谱-质谱联用



薰衣草是一种多年生草本或半灌木的植物，具有强烈的芳香气味，广泛用于单花香型中做定香剂及在非花香型的香精中做主香香料，是所有芳香油中用途最广、最安全的一种，俗称精油中的万金油。本应用通过气相色谱-质谱联用法对薰衣草精油中的挥发性化合物进行了分析。

1. 实验仪器及材料

SCION 456GC SQ 气质联用仪，天美（中国）科学仪器有限公司；薰衣草精油，某公司提供。

2. 实验方法

2.1 气相方法

DB-5ms 毛细管色谱柱 (30m×0.25mm×0.25μm)，初始温度 50 °C 保持 5 min，以 3 °C/min 升温至 240 °C，保持 2 min，以 10 °C/min 升温至 280 °C；进样口温度 280 °C，分流比 80:1，柱流量 1 mL/min，进样量 0.5 μL。

2.2 质谱方法

电子轰击离子源 (EI)，能量 70 eV；离子源温度 250 °C，传输线温度 280 °C，质量扫描范围 40~450 amu，溶剂延迟 3 min。

3. 实验结果

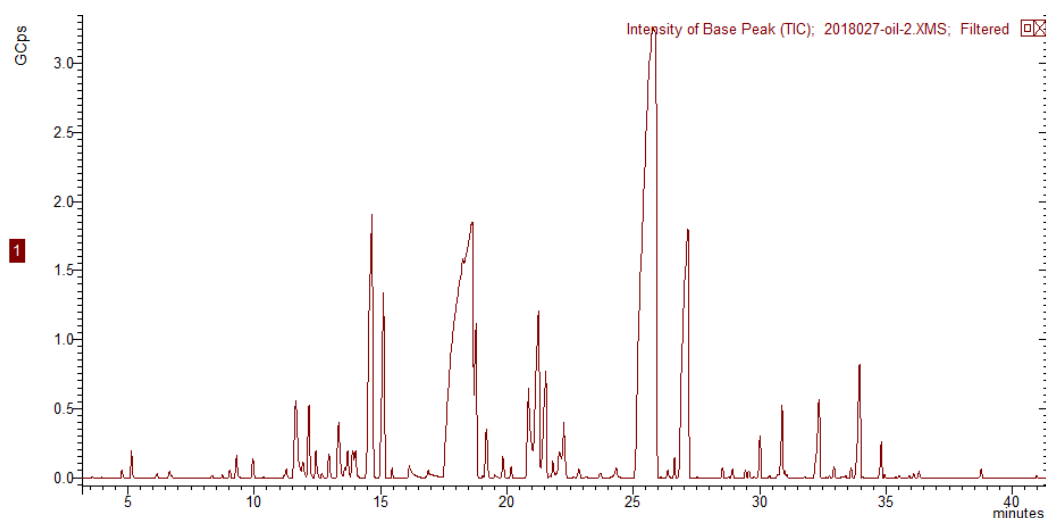


图 1 薰衣草精油的总离子流图 (TIC)

图 1 为薰衣草精油气质联机的总离子流图，通过 NIST 谱库对峰面积大约 10^8 的化合物进行鉴定，其峰面积与面积归一化结果如表 1 所示。

表 1 薰衣草精油的 GC-MS 分析结果

#	RT/min	组分名称	峰面积	含量/%
1	3.61	Toluene	1.48E+08	0.01
2	3.98	2-Butenal, 3-methyl-	1.48E+08	0.01
3	4.77	Acetic acid, butyl ester	6.39E+08	0.03
4	5.14	Hexane, 1-methoxy-	2.68E+09	0.15
5	6.14	3-Hexen-1-ol, (E)-	8.11E+08	0.04
6	6.66	1-Hexanol	9.96E+08	0.05
7	8.33	Propanoic acid, butyl ester	2.21E+08	0.01
8	8.75	Tricyclo[2.2.1.0(2,6)]heptane, 1,7,7-trimethyl-	4.02E+08	0.02
9	9.04	Bicyclo[3.1.0]hex-2-ene, 2-methylene-5-(1-methylethyl)-	1.05E+09	0.06
10	9.42	Oxepine, 2,7-dimethyl-	3.45E+08	0.02
11	9.95	Camphene	3.51E+09	0.19
12	10.37	Propanoic acid, 2-methyl-, butyl ester	2.86E+08	0.02
13	11.19	Bicyclo[3.1.0]hexane, 4-methylene-1-(1-methylethyl)-	3.21E+08	0.02
14	11.28	Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene-, (1S)-	1.38E+09	0.08
15	11.66	1-Octen-3-ol	1.20E+10	0.65
16	11.94	3-Octanone	3.14E+09	0.17
17	12.17	.beta.-Myrcene	1.23E+10	0.67
18	12.44	Butanoic acid, butyl ester	4.40E+09	0.24
19	12.68	.alpha.-Phellandrene	9.81E+08	0.05
20	12.96	3-Carene	4.31E+09	0.23
21	13.34	Acetic acid, hexyl ester	1.01E+10	0.55

续表 1 薰衣草精油的 GC-MS 分析结果

#	RT/min	组分名称	峰面积	含量/%
22	13.7	p-Cymene	3.16E+09	0.17
23	13.91	D-Limonene	4.81E+09	0.26
24	14	Eucalyptol	1.49E+10	0.81
25	14.66	trans-.beta.-Ocimene	8.50E+10	4.63
26	15.12	1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-, (Z)-	4.64E+10	2.53
27	15.46	.gamma.-Terpinene	1.38E+09	0.08
28	16.14	2-Furanmethanol, 5-ethenyltetrahydro- $\alpha,\alpha,5$ -trimethyl-	5.19E+09	0.28
29	17.42	3-Methyl-2-(2-methyl-2-butenyl)-furan	4.33E+08	0.02
30	18.63	Linalool	5.91E+11	32.17
31	18.78	1-Octen-3-yl-acetate	2.86E+10	1.56
32	19.19	2,4,6-Octatriene, 2,6-dimethyl-, (E,Z)	9.88E+09	0.54
33	19.85	(+)-2-Bornanone	5.26E+09	0.29
34	20.17	Propanoic acid, 2-methyl-, hexyl ester	1.92E+09	0.1
35	20.43	4-Chloro-3-n-butyltetrahydropyr	3.79E+08	0.02
36	20.85	endo-Borneol	1.42E+10	0.77
37	21.25	4-Hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl)-	5.56E+10	3.03
38	21.54	3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-, (R)-	3.91E+10	2.13
39	21.82	2-Cyclohexen-1-one, 4-(1-methylethyl)-	3.66E+09	0.2
40	22.08	Terpineol	7.85E+09	0.43
41	22.25	Propanoic acid, 2-methyl-, hexyl ester	2.22E+10	1.21
42	22.64	Acetic acid, undec-2-enyl ester	1.13E+08	0.01
43	22.85	(E)-2,6-Dimethylocta-3,7-diene-2,6-diol	2.44E+09	0.13
44	23.13	Acetic acid, octyl ester	4.61E+08	0.03
45	23.7	Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimethyl-, acetate, (1S-endo)-	1.44E+09	0.08
46	24.33	2,6-Octadien-1-ol, 3,7-dimethyl-, (Z)-	5.41E+09	0.29
47	25.88	Linalyl acetate	5.26E+11	28.63
48	26.25	1-Cyclohexene-1-carboxaldehyde, 4-(1-methylethyl)	2.35E+08	0.01
49	26.63	Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimethyl-, acetate, (1S-endo)-	3.56E+09	0.19
50	27.16	4-Hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl)-, acetate	1.47E+11	8
51	27.73	4,7,7-Trimethylbicyclo[4.1.0]hept-3-en-2-one	1.76E+08	0.01
52	28.54	Hexyl (E)-2-methylbut-2-enoate	1.49E+09	0.08
53	28.93	2,6-Dimethylocta-3,7-diene-2,6-diol	1.49E+09	0.08
54	29.13	Benzyl Butyrate	1.09E+08	0.01
55	29.29	4-ethenyl-4-methyl-1-propan-2-yl-3-prop-1-en-2-ylcyclohexene	1.74E+08	0.01
56	29.44	3-Nonanol, 1,2:6,7-diepoxy-3,7-dimethyl-, acetate	2.73E+09	0.15
57	29.78	2,6-Dimethylocta-3,7-diene-2,6-diol	3.16E+08	0.02
58	30.01	2,6-Octadien-1-ol, 3,7-dimethyl-, 1-acetate, (2Z)-	6.55E+09	0.36
59	30.39	.alfa.-Copaene	5.75E+08	0.03
60	30.89	2,6-Octadien-1-ol, 3,7-dimethyl-, (E)-	1.22E+10	0.66
61	30.99	Hexanoic acid, hexyl ester	1.71E+09	0.09
62	31.07	Episesquithujene	9.02E+08	0.05

续表 1 薰衣草精油的 GC-MS 分析结果

#	RT/min	组分名称	峰面积	含量/%
63	32.35	Caryophyllene	5.81E+10	3.16
64	32.65	beta-Copaene	2.53E+08	0.01
65	32.77	Coumarin	4.00E+08	0.02
66	32.95	trans-.alpha.-Bergamotene	2.54E+09	0.14
67	33.33	Isocaryophyllene	1.33E+09	0.07
68	33.62	Humulene	1.60E+09	0.09
69	33.96	(E)-.beta.-Farnesene	3.30E+10	1.8
70	34.08	Heptadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-	2.05E+08	0.01
71	34.81	Germacrene D	1.26E+10	0.69
72	34.95	(E)-.beta.-Farnesene	5.78E+08	0.03
73	35.4	Bicyclogermacrene	4.89E+08	0.03
74	35.52	3,7-Octadiene-2,6-diol, 2,6-dimethyl-	5.05E+08	0.03
75	35.92	.alpha.-Farnesene	7.30E+08	0.04
76	36.1	γ -Cadinene	1.50E+09	0.08
77	36.31	Teresantalol	9.10E+08	0.05
78	38.77	Caryophyllene oxide	5.71E+09	0.31
79	40.96	.tau.-Cadinol	6.32E+08	0.03

由表 1，通过气质联用法共鉴定出 79 种主要的化合物，其中含量较高的有 Linalool（芳樟醇，32.17%）、Linalyl acetate（乙酸芳樟酯，28.63%）、4-Hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl)-, acetate（乙酸薰衣草酯，8%）、trans-.beta.-Ocimene（(E)- β -罗勒烯，4.63%）等。其中芳樟醇和乙酸芳樟酯两种化合物（图 2）的含量最多，说明是薰衣草精油的主要化合物，这与目前关于薰衣草精油的文献报道相一致。

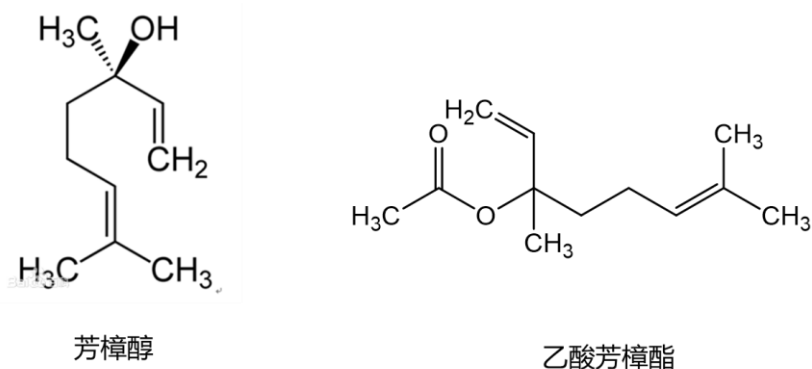


图 2 芳樟醇和乙酸芳樟酯的结构式