

Profil d'huiles essentielles d'*Origanum vulgare* subsp. *vulgare* population native de Rtanj via des outils de chimiométrie

Milica Acimovic¹, Lato Pezo², Stefan Ivanovic³, Katarina Simic³, Jovana Ljujic⁴

1- Institut des grandes cultures et des cultures maraîchères Novi Sad- Institut national de la République de Serbie, Maksima Gorkog 30, 21000 Novi Sad, Serbie

2- Université de Belgrade, Institut de chimie générale et physique, Studentski trg 12, 11000 Belgrade, Serbie

3- Université de Belgrade, Institut de chimie, technologie et métallurgie – Institut national de la République de Serbie, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbie

4- Université de Belgrade, Faculté de chimie, Département de chimie organique, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbie

RÉSUMÉ

Le but de cette étude était de prédire les indices de rétention des composés chimiques trouvés dans des parties aériennes d'*Origanum vulgare* subsp. *vulgare* huile essentielle de obtenue par hydrodistillation et analysée par GC-MS. Un nombre total de 28 composés ont été détectés dans l'huile essentielle. Les composés avec la concentration relative la plus élevée sont les suivants : le germacrène D (21,5%), le 1,8-cinéole (14,2%), le sabinène (14,0%) et le *trans*-caryophyllène (13,4%). Le temps de la rétention a été prédit en utilisant la relation quantitative structure-rétention, en utilisant sept descripteurs moléculaires choisis par l'analyse factorielle et l'algorithme génétique. Les descripteurs choisis ne sont pas corrélés les uns aux autres et ils ont été utilisés pour développer un modèle de réseau neuronal artificiel. Un nombre total de 28 indices de rétention obtenus expérimentalement ($\log RI$) ont été utilisés pour mettre en place un modèle quantitatif prédictif de relation structure – rétention. Le coefficient de détermination pour le cycle de formation était de 0,998, ce qui indique que ce modèle pourrait être utilisé pour prédire les indices de rétention pour *O. vulgare* subsp. *vulgare* composés d'huiles essentielles.

Mots-clés : *origan*, *huile essentielle*, *hydrodistillation*, *GC-MS*, *QSSR*, *ANN*