

Universidad de San Carlos de Guatemala Facultad de Ingeniería Escuela de Ingeniería Química

EVALUACIÓN DEL RENDIMIENTO DE EXTRACCIÓN Y CARACTERIZACIÓN
FISICOQUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE HOJAS FRESCAS DE GUAYABA (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) VARIANDO LOS TIEMPOS DE EXTRACCIÓN POR MEDIO DEL MÉTODO DE HIDRODESTILACIÓN A NIVEL LABORATORIO

Nadia Mishel Morán Cabrera

Asesorado por el Ing. Qco. Mario José Mérida Meré e Inga. Qca. Telma Maricela Cano Morales

Guatemala, mayo de 2021

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA



FACULTAD DE INGENIERÍA

EVALUACIÓN DEL RENDIMIENTO DE EXTRACCIÓN Y CARACTERIZACIÓN
FISICOQUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE HOJAS FRESCAS DE GUAYABA (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) VARIANDO LOS TIEMPOS DE EXTRACCIÓN POR MEDIO DEL MÉTODO DE HIDRODESTILACIÓN A NIVEL LABORATORIO

TRABAJO DE GRADUACIÓN

PRESENTADO A LA JUNTA DIRECTIVA DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA
POR

NADIA MISHEL MORÁN CABRERA

ASESORADO POR EL ING. MARIO JOSÉ MÉRIDA MERÉ E INGA. QCA. TELMA MARICELA CANO MORALES

AL CONFERÍRSELE EL TÍTULO DE

INGENIERA QUÍMICA

GUATEMALA, MAYO DE 2021

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA FACULTAD DE INGENIERÍA



NÓMINA DE JUNTA DIRECTIVA

DECANA	Inga. Aurelia Anabela Cordova Estrada
--------	---------------------------------------

VOCAL I Ing. José Francisco Gómez Rivera

VOCAL II Ing. Mario Renato Escobedo Martínez

VOCAL III Ing. José Milton De León Bran

VOCAL IV Br. Christian Moisés de la Cruz Leal

VOCAL V Br. Kevin Vladimir Armando Cruz Lorente

SECRETARIO Ing. Hugo Humberto Rivera Pérez

TRIBUNAL QUE PRACTICÓ EL EXAMEN GENERAL PRIVADO

DECANA Inga. Aurelia Anabela Cordova Estrada

EXAMINADOR Ing. Adolfo Narciso Gramajo Antonio

EXAMINADOR Ing. Edward Mario Augusto Guerrero Gutiérrez

EXAMINADOR Ing. Erwin Manuel Ortiz Castillo

SECRETARIO Ing. Hugo Humberto Rivera Pérez

HONORABLE TRIBUNAL EXAMINADOR

En cumplimiento con los preceptos que establece la ley de la Universidad de San Carlos de Guatemala, presento a su consideración mi trabajo de graduación titulado:

EVALUACIÓN DEL RENDIMIENTO DE EXTRACCIÓN Y CARACTERIZACIÓN
FISICOQUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE HOJAS FRESCAS DE GUAYABA (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) VARIANDO LOS TIEMPOS DE EXTRACCIÓN POR MEDIO DEL MÉTODO DE HIDRODESTILACIÓN A NIVEL LABORATORIO

Tema que me fuera asignado por la Dirección de la Escuela de Ingeniería Química, con fecha 21 de noviembre de 2018.

Nadia Mishel Morán Cabrera



CENTRO DE INVESTIGACIONES DE INGENIERÍA **FACULTAD DE INGENIERÍA** UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA



Guatemala, 07 de mayo de 2020

Ingeniero Williams Guillermo Álvarez Mejía Director de Escuela de Ingeniería Química Facultad de Ingeniería Universidad de San Carlos de Guatemala Presente

Estimado Ingeniero Álvarez:

Por medio de la presente HACEMOS CONSTAR que hemos revisado y dado nuestra aprobación al Informe Final y a los Artículos Científicos del trabajo de graduación titulado "EVALUACIÓN DEL RENDIMIENTO DE EXTRACCIÓN Y CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE HOJAS FRESCAS DE GUAYABA (Psidium Guajava L.) VARIANDO LOS TIEMPOS DE EXTRACCIÓN POR MEDIO DEL MÉTODO DE HIDRODESTILACIÓN A NIVEL LABORATORIO", de la estudiante de Ingeniería Química Nadia Mishel Morán Cabrera quien se identifica con CUI No. 2220 09950 2101 y registro académico número 2012-12839.

Sin otro particular nos suscribimos a usted.

Atentamente,

Ing. Qco. Mario José Mérida Mer PROFESOR INVESTIGADOR!

Escuela de Ingeniería Química/ USAC

JEFE

INGENIERO QUÍMICO Mario José Mérida Meré

Laboratorio de Investigación de Extractos Vegetales -LIEXVEolegiado No. 1411 Sección Química Industrial CII / USAC

Asesor

Inga. Qca. Telma Maricela Cano Morales Profesora Investigadora Titular IX

Sección Química Industrial

Asesora

DIRECTORA Centro de Investigaciones de Ingeniería / USAC Maricela Cano Morales

INGENIERA QUÍMICA

Colegiado No. 433



Edificio T-5, Ciudad Universitaria, Zona 12, Guatemala, Centroamérica EIQD-REG-TG-001

Guatemala, 07 de octubre de 2020. Ref. EIQ.TG-IF.035.2020.

Ingeniero Williams Guillermo Álvarez Mejía DIRECTOR Escuela de Ingeniería Química Facultad de Ingeniería

Estimado Ingeniero Álvarez:

Como consta en el registro de evaluación, correlativo **061-2018,** le informo que reunidos los Miembros de la Tema nombrada por la Escuela de Ingeniería Química, se practicó la revisión del:

INFORME FINAL

Solicitado por el estudiante universitario: Nadia Mishel Morán Cabrera. Identificado con número de camé: 2220099502101. Identificado con registro académico: 201212839. Previo a optar al título de la carrera: Ingeniería Química. En la modalidad: Informe Final, Seminario de Investigación.

Siguiendo los procedimientos de revisión interna de la Escuela de Ingeniería Química, los Miembros de la Terna han procedido a **APROBARLO** con el siguiente título:

EVALUACIÓN DEL RENDIMIENTO DE EXTRACCIÓN Y CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE HOJAS FRESCAS DE GUAYABA (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) VARIANDO LOS TIEMPOS DE EXTRACCIÓN POR MEDIO DEL MÉTODO DE HIDRODESTILACIÓN A NIVEL LABORATORIO

El Trabajo de Graduación ha sido asesorado por:

Mario José Mérida Meré, profesional de la Ingeniería Química Telma Maricela Cano Morales, profesional de la Ingeniería Química

Habiendo encontrado el referido trabajo de graduación **SATISFACTORIO**, se autoriza al estudiante, proceder con los trámites requeridos de acuerdo a las normas y procedimientos establecidos por la Facultad para su autorización e impresión.

"ID Y ENSEÑAD A TODOS"

Gerardo Ordoñez profesional de la Ingeniería Química COORDINADOR DE TERNA Tribunal de Revisión

Trabajo de Graduación

Gerardo Ordoñez Ingeniero Quimico Colegiado No. 1296

C.c.: archivo





Edificio T-5, Ciudad Universitaria, Zona 12, Guatemala, Centroamérica EIOD-REG-SG-007

Guatemala, 22 de abril de 2021. Ref. EIQ.061.2021

Aprobación del informe final del trabajo de graduación

Ingeniera
Aurelia Anabela Cordova Estrada
Decana
Facultad de Ingeniería
Universidad de San Carlos de Guatemala

Revisado el INFORME FINAL DEL TRABAJO DE GRADUACIÓN (TESIS), DENOMINADO EVALUACIÓN DEL **RENDIMIENTO** DE EXTRACCIÓN CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE HOJAS FRESCAS DE GUAYABA (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) VARIANDO LOS TIEMPOS DE EXTRACCIÓN POR **MEDIO** DEL MÉTODO HIDRODESTILACIÓN A NIVEL LABORATORIO del(la) estudiante Nadia Mishel Moran Cabrera, se conceptúa que el documento presentado, reúne todas las condiciones de calidad en materia administrativa y académica (rigor, pertinencia, secuencia y coherencia metodológica), por lo tanto, se procede a la autorización del mismo, para que el(la) estudiante pueda optar al título de Ingeniería Química.

"Id y Enseñad a Todos"

Ing. Williams & Alvarez Meila M.J. M.U.I.E DIRECTOR

Escuela de Ingeniería Química

Cc. Archivo WGAM/mpea





Formando Ingenieros Químicos en Guatemala desde 1939





DTG. 201.2021.

JHUERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMAL

DECANA FACULTAD DE INGENIERÍA

La Decana de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer la aprobación por parte del Director de la Escuela de Ingeniería Química, al Trabajo de Graduación titulado: EVALUACIÓN DEL RENDIMIENTO DE EXTRACCION Y CARACTERIZACIÓN FISICOQUIMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE HOJAS FRESCAS DE GUAYABA (Psidium Cattleianum Aftzel. Ex Sabine) VARIANDO LOS TIEMPOS DE EXTRACCIÓN POR MEDIO DEL MÉTODO DE HIDRODESTILACIÓN A NIVEL LABORATORIO, presentado por la estudiante universitaria: Nadia Mishel Morán Cabrera, y después de haber culminado las revisiones previas bajo la responsabilidad de las instancias correspondientes, autoriza la impresión del mismo.

DICUA, CARO

IMPRÍMASE:

Inga. Anabela Cordova Estrada

ESIS INTER

Decana

Guatemala, mayo de 2021.

AACE/asga

ACTO QUE DEDICO A:

Dios Por ser mi guía a lo largo de este camino y por

estar conmigo en cada momento de mi vida

proporcionándome lo que necesito en ella.

Mis padres Nora Cabrera y Otoniel Morán por brindarme la

oportunidad, ser una importante influencia en mi

carrera y apoyarme en todo momento.

Mis hermanas Lindsay, Nashirley y Jennevier Morán por estar

constantemente animándome en las buenas y

malas.

Mis amigos Por brindarme su amistad y estar en las buenas

y en las malas tanto en cursos como en los

dilemas de la vida.

AGRADECIMIENTOS A:

Universidad de San

Carlos de Guatemala

Por ser mi casa de estudios durante todo este

tiempo.

Facultad de Ingeniería

Por formarme académicamente.

Mis asesores Inga. Telma Cano e Ing. Mario Mérida. Por

brindarme su apoyo y guía en el transcurso de

mi formación profesional.

Mi revisor Ing. Gerardo Ordoñez. Por haberse tomado el

tiempo de revisar y guiarme en todo mi trabajo

de graduación.

Departamento de

Química General

Por darme la oportunidad de formar parte de un gran equipo de trabajo y ser una importante

influencia en mi carrera.

ÍNDICE GENERAL

ÍNDIC	E DE ILL	JSTRACIO	NES		V
LISTA	A DE SÍMI	BOLOS			IX
GLOS	SARIO				XI
RESU	JMEN				XIII
OBJE	TIVOS				XV
HIPÓ	TESIS				XVII
INTR	ODUCCIÓ	N			XXI
1.	MARCO	CONCEP	TUAL		1
	1.1.	Antecede	ntes		1
2.	MARCO	TEÓRICO)		5
	2.1.	Aceites e	senciales		5
		2.1.1.	Aceites ese	enciales a nivel laboratorio	6
		2.1.2.	Aceites ese	enciales a nivel industrial	6
		2.1.3.	Aplicabilida	d industrial	6
		2.1.4.	Composicio	ón química	7
		2.1.5.	Propiedade	es fisicoquímicas	8
		2.1.6.	Hidrolatos.		9
	2.2.	Extraccio	nes sólido –	líquido	10
	2.3.	Métodos	de extracció	n de los aceites esenciales	12
		2.3.1.	Destilación		12
		2.3.2.	Hidrodestil	ación	13
			2.3.2.1.	Equipo de extracción por el	método
				de hidrodestilación	13

		2.3.3.	Destilación en arrastre con vapor directo	15
		2.3.4.	Destilación mixta	15
		2.3.5.	Expresión en frío	16
		2.3.6.	Maceración	16
		2.3.7.	Extracción con solventes volátiles	16
		2.3.8.	Enfloración (enfleurage)	17
		2.3.9.	Fluidos supercríticos	17
	2.4.	Métodos o	de identificación y cuantificación	18
		2.4.1.	Densidad e índice de refracción	18
		2.4.2.	Solubilidad	18
		2.4.3.	Cromatografía de gases	18
			2.4.3.1. Aplicaciones de la cromatografía de	
			gases	19
		2.4.4.	Espectrometría de masas	20
	2.5.	Factores	que afectan el rendimiento de los aceites	
		esenciale	s	20
	2.6.	Materia pi	rima	21
	2.7.	Guayaba	(Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine)	22
		2.7.1.	Semántica	24
		2.7.2.	Origen/ extensión	24
		2.7.3.	Hábitat	25
		2.7.4.	Usos	26
		,		
3.	METOD			
	3.1.		ón	
	3.2.	Variables		
		3.2.1.	Variables dependientes	
		3.2.2.	Variables independientes	
	3.3.	Delimitaci	ón del campo de estudio	30

	3.3.1.	Obtenciór	n de las muestras 3´
	3.3.2.	Extracció	n del aceite esencial3
	3.3.3.	Análisis c	ualitativo del aceite esencial 3
3.4.	Recurso	s humanos	disponibles3
3.5.	Recurso	s materiales	s disponibles32
	3.5.1.	Equipo	
	3.5.2.	Cristalería	a 32
	3.5.3.	Materia	prima32
3.6.	Técnica	cualitativa o	cuantitativa33
	3.6.1.	Técnica d	le muestreo33
	3.6.2.	Preparaci	ón de muestras33
	3.6.3.	Preparaci	ión de la materia prima34
	3.6.4.	Proceso	de extracción de aceite esencial de
		hojas de	e guayaba utilizando el método de
		hidrodesti	ilación a nivel laboratorio34
	3.6.5.	Análisis fi	sicoquímicos35
		3.6.5.1.	Densidad35
		3.6.5.2.	Índice de refracción 35
		3.6.5.3.	Potencial de hidrogeno (pH) 36
		3.6.5.4.	Cromatografía de gases con
			acoplamiento a espectrometría de
			masas36
3.7.	Recoled	ción y orden	namiento de la información 37
3.8.	Tabulac	ión, orden	amiento y procesamiento de la
	informa	ción	42
3.9.	Análisis	estadístico.	45
	3.9.1.	Diseño ex	kperimental45
		3.9.1.1.	Cálculo de la media 45
		3912	Cálculo de la desviación estándar 49

			3.9.1.3.	Coeficiente de variación de Pearson	.46
			3.9.1.4.	Análisis de varianza	.46
			3.9.1.5.	Cálculo de Fisher	.47
	3.10.	Plan de ar	nálisis de los	resultados	.50
		3.10.1.	Métodos y	modelos de los datos según tipo de	
			variables		.50
		3.10.2.	Programas	a utilizar para análisis de datos	.51
4.	RESULT	ADOS			.53
	4.1.	Extracción	n del aceit	e esencial de hojas de guayaba	
		(Psidium	cattleianum	Afzel. Ex Sabine)en función de	
		diferentes	tiempos de	e extracción utilizando el método de	
		hidrodestil	lación a nive	l laboratorio	.53
5.	INTERPI	RETACIÓN	I DE RESUL	.TADOS	.61
CONC	CLUSION	ES			.67
RECC	OMENDA	CIONES			.69
BIBLI	OGRAFÍA	١			.71
APÉN	IDICES				.75
∧NE∨	′OS				02

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

FIGURAS

1.	Diagrama triangulo rectángulo para mezclas ternarias 11
2.	Equipo de extracción de aceites esenciales Neoclevenger 14
3.	Hojas y frutos de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) 23
4.	Rendimiento extractivo del aceite esencial a nivel laboratorio 53
5.	Densidad del aceite esencial extraído a nivel laboratorio 54
6.	Índice de refracción del aceite esencial extraído a nivel laboratorio 55
7.	pH del aceite esencial extraído a nivel laboratorio 56
8.	pH del hidrolato resultante de la extracción a nivel laboratorio 57
	TABLAS
I.	Composición química de un aceite esencial 8
II.	Determinación fisicoquímica de un aceite esencial
III.	Variables dependientes para el proceso de extracción
IV.	Variables independientes para el proceso de extracción
V.	Rendimiento extractivo del aceite esencial de hojas frescas de
	guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio 38
VI.	Densidad del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium
	cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio
VII.	Índice de refracción a 20 °C del aceite esencial de hojas de
	guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio 39
VIII.	pH del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum
	Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

IX.	pH del hidrolato obtenido de la extracción de aceite esencial de
	hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel
	laboratorio40
X.	Composición química del aceite esencial de hojas frescas de
	guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio
	del tiempo de 60min obtenida por GC-MS40
XI.	Composición química del aceite esencial de hojas frescas de
	guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio
	del tiempo de 120 min obtenida por GC-MS41
XII.	Composición química del aceite esencial de hojas frescas de
	guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio
	del tiempo de 240 min obtenida por GC-MS41
XIII.	Determinación estadística del rendimiento extractivo del aceite
	esencial de hojas frescas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel.
	Ex Sabine) a nivel laboratorio42
XIV.	Determinación estadística de la densidad del aceite esencial de
	hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel
	laboratorio43
XV.	Determinación estadística del índice de refracción a 20 °C del
	aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex
	Sabine) a nivel laboratorio43
XVI.	Determinación estadística del pH del aceite esencial de hojas de
	guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio 44
XVII.	Determinación estadística del pH del hidrolato obtenido de la
	extracción de aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium
	cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio44
XVIII.	Análisis de varianza de un factor para el rendimiento del aceite
	esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex
	Sabine) a nivel laboratorio48

XIX.	Análisis de varianza de un factor para la densidad del aceite	
	esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex	
	Sabine) a nivel laboratorio	48
XX.	Análisis de varianza de un factor para el índice de refracción del	
	aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex	
	Sabine) a nivel laboratorio	49
XXI.	Análisis de varianza de un factor para el pH del aceite esencial de	
	hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel	
	laboratorio	49
XXII.	Análisis de varianza de un factor para el pH del hidrolato de hojas	
	de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a escala	
	laboratorio	50
XXIII.	Modelo matemático y coeficiente de correlación del rendimiento	
	extractivo del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium	
	cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio	54
XXIV.	Modelo matemático y coeficiente de correlación de la densidad del	
	aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex	
	Sabine) a nivel laboratorio	54
XXV.	Modelo matemático y coeficiente de correlación del índice de	
	refracción del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium	
	cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio	55
XXVI.	Modelo matemático y coeficiente de correlación del pH del aceite	
	esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex	
	Sabine) a nivel laboratorio	56
XXVII.	Modelo matemático y coeficiente de correlación del rendimiento	
	extractivo del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium	
	cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio	57

XXVIII.	Componentes mayoritarios del aceite esencial de hojas frescas de	
	guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio	
	del tiempo de 60min obtenida por GC-MS	58
XXIX.	Componentes mayoritarios del aceite esencial de hojas frescas de	
	guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio	
	del tiempo de 120 min obtenida por GC-MS	59
XXX.	Componentes mayoritarios del aceite esencial de hojas frescas de	
	guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio	
	del tiempo de 240 min obtenida por GC-MS	60

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Significado	
ρ	Densidad (g/mL)	
σ	Desviación estándar	
°C	Grado Celsius	
g	Gramos	
kg	Kilogramo	
mL	Mililitros	
min	Minutos	
%	Porcentaje	
рН	Potencial de hidrógeno	
t	Tiempo	

GLOSARIO

Aceite esencial

Lípidos no relacionados con ácidos grasos. Compuestos terpenoides derivados por condensación del isopreno.

ANOVA

Modelo estadístico utilizado para analizar las diferencias entre los medios del grupo en una muestra.

Cromatografía

Es un método físico de separación para la caracterización de mezclas. Es un conjunto de técnicas basadas en el principio de retención selectiva, cuyo objetivo es separar los distintos componentes de una mezcla, permitiendo identificar y determinar las cantidades de dichos componentes.

Cromatograma

Conjunto de picos y línea base registrados en función del tiempo, la cual registran todos los componentes detectados en el detector de masas del cromatógrafo.

Extracción

Método empleado tanto comercialmente como en el laboratorio para separar una sustancia de una mezcla o disolución.

Hidrodestilación

Método de extracción de aceite esencial, el cual consiste en poner en contacto directo el material vegetal con agua hirviendo y por medio del vapor se arrastra el aceite a un condensador para así obtener dicho producto.

Índice de refracción

Relación entre la velocidad de la luz en el vacío y la velocidad de la luz en la sustancia o el medio transparente. Número, mayor que la unidad y sin unidades, es una constante característica de cada medio y representa el número de veces que es mayor la velocidad de la luz en el vacío que en ese medio.

Neoclevenger

Equipo adecuado para la extracción de aceite esencial de materias vegetales a escala laboratorio.

RESUMEN

El presente proyecto de investigación, tiene por objetivo la evaluación del rendimiento de extracción y caracterización fisicoquímica del aceite esencial de las hojas de Guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*), variando los tiempos de extracción para obtener el rendimiento óptimo del mismo.

Las hojas de guayaba son del municipio de San Luis Jilotepeque del departamento de Jalapa. Se trabajó con diferentes tiempos de extracción y para obtener confiabilidad estadística se realizaron 3 repeticiones por cada tratamiento. De esta manera se obtuvo el rendimiento y caracterización fisicoquímica del aceite esencial.

La extracción del aceite esencial se realizó a nivel laboratorio por el método de hidrodestilación; en donde la materia prima tiene contacto directo con el vapor para obtener el máximo porcentaje de rendimiento extractivo de las hojas de Guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*).

Posteriormente se evaluó la calidad del aceite esencial extraído a través de la caracterización fisicoquímica donde se realizó una determinación de propiedades como lo son la densidad, pH y el índice de refracción a temperatura ambiente. Luego se realizó el análisis por cromatografía de gases con acoplamiento a espectrofotometría de masas (GC/MS); la cual determinó la composición química del aceite esencial.

Se determinó que el mayor porcentaje en el rendimiento de extracción del aceite esencial es de 0,1317±0,0223 % a un tiempo de extracción de 240 minutos. La densidad promedio del aceite obtenido es de 0,9255±0,0251 g/mL con un índice de refracción 1,5091±0,0015 y un pH de 4,70±0,57 además de su porcentaje de área obtenido en la cromatografía de gases con acoplamiento de masas y como compuesto químico mayoritario β-cariofileno es de 40,26 %.

Utilizando técnicas estadísticas para el estudio de variables y mediante un diseño se realizó el análisis de varianza comparando las medias y probando las hipótesis planteadas para esta investigación y así determinar si existe influencia estadística en las interacciones y dependencias en las variables estudiadas.

El porcentaje de rendimiento del aceite esencial junto con sus propiedades fisicoquímicas obtenidas que son la densidad, índice de refracción, pH y su composición química si depende del tiempo de extracción establecido dando como resultado que a mayor tiempo mejor propiedades y componentes químicos se obtienen.

OBJETIVOS

General

Evaluar el rendimiento extractivo y la caracterización fisicoquímica del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*) variando los tiempos de extracción por medio del método de hidrodestilación a nivel laboratorio.

Específicos

- Determinar el rendimiento de extracción del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) en función de 3 tiempos de extracción (60, 120 y 240 min) utilizando el aparato neoclevenger para realizar la hidrodestilación a nivel laboratorio.
- 2. Determinar el rendimiento extractivo óptimo del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*) en función de la composición química obtenida por GC-MS utilizando el aparato neoclevenger para realizar la hidrodestilación a nivel laboratorio.
- 3. Caracterizar las propiedades fisicoquímicas, densidad e índice de refracción del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*) en función de 3 tiempos de extracción (60, 120 y 240 min) a nivel laboratorio.

- Determinar el pH del hidrolato obtenido de 3 tiempos de extracción (60, 120 y 240 min) utilizando el aparato neoclevenger para realizar la hidrodestilación a nivel laboratorio.
- 5. Determinar los componentes mayoritarios de la composición química del aceite esencial de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*) de los 3 tiempos de extracción (60, 120 y 240 min) por medio de cromatografía de gases con acoplamiento de espectrometría de masas GC-MS.

HIPÓTESIS

Hipótesis de trabajo

Es factible obtener y evaluar el porcentaje de rendimiento y las propiedades fisicoquímicas del aceite esencial de las hojas frescas de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*). Realizando una comparación si existe una diferencia significativa de las variables.

Hipótesis estadística

Hipótesis nula:

Ho1: No existe una variación significativa en el rendimiento de extracción del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*) en función de 3 tiempos de extracción (60, 120 y 240 min) utilizando el aparato neoclevenger para realizar la hidrodestilación a nivel laboratorio.

Ho2: No existe una variación significativa en el rendimiento extractivo óptimo del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*) en función de la composición química obtenida por GC-MS utilizando el aparato neoclevenger para realizar la hidrodestilación a nivel laboratorio.

Ho3: No existe una variación significativa en las propiedades fisicoquímicas, densidad e índice de refracción del aceite esencial de

hojas frescas de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*) en función de 3 tiempos de extracción (60, 120 y 240 min) a nivel laboratorio. Ho4: No existe una variación significativa en el pH del hidrolato obtenido de los 3 tiempos de extracción (60, 120 y 240 min) utilizando el aparato neoclevenger para realizar la hidrodestilación a nivel laboratorio.

Ho5: No existe una variación significativa en la composición química del aceite esencial de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*) de 3 tiempos de extracción (60, 120 y 240 min) por medio de cromatografía de gases con acoplamiento de espectrometría de masas GC-MS.

Hipótesis alternativa:

Hi1: Existe una variación significativa en el rendimiento de extracción del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*) en función de 3 tiempos de extracción (60, 120 y 240 min) utilizando el aparato neoclevenger para realizar la hidrodestilación a nivel laboratorio.

Hi2: Existe una variación significativa en el rendimiento extractivo óptimo del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*) en función de la composición química obtenida por GC-MS utilizando el aparato neoclevenger para realizar la hidrodestilación a nivel laboratorio.

Hi3: Existe una variación significativa en las propiedades fisicoquímicas, densidad e índice de refracción del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*) en función de 3 tiempos de extracción (60, 120 y 240 min) a nivel laboratorio.

Hi4: Existe una variación significativa en el pH del hidrolato obtenido de los 3 tiempos de extracción (60, 120 y 240 min) utilizando el aparato neoclevenger para realizar la hidrodestilación a nivel laboratorio.

Hi5: Existe una variación significativa en la composición química del aceite esencial de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*) de 3 tiempos de extracción (60, 120 y 240 min) por medio de cromatografía de gases con acoplamiento de espectrometría de masas GC-MS.

INTRODUCCIÓN

En la actualidad Guatemala es un país que tiene gran variedad de topografía especialmente ecológica, con ello hacen variar enormemente las condiciones del clima. Además de eso goza de tierra fértil en todo el país, de esta manera se vuelve un país rico en recursos naturales. A su vez estos recursos naturales del país no han sido totalmente estudiados como comentan Campbell y Kellogg y por ende no se ha logrado un uso correcto y completo de ellos, algunos usos son en el área alimenticia y medicinal.

Los aceites esenciales son sustancias aromáticas de naturaleza oleosa encontradas prácticamente en todas las plantas; son muy numerosos y están ampliamente distribuidos en distintas partes del mismo: en las raíces, tallos, hojas, flores y frutos. Cada aceite esencial contiene las propiedades específicas de la planta de la que se obtiene, cuyos componentes químicos sirven para distintas finalidades. Este aceite esencial presenta un aroma herbal y almendrado, lo cual lo hace bastante exótico. Como comentan Campbell y Kellogg en Sur América, se realizan infusiones de las hojas para tomar en caso de diarrea al igual que la fruta y a nivel energético ayuda a reducir la ansiedad y la tensión nerviosa.

Ariana comenta que entre las propiedades fisicoquímicas que los aceites esenciales presentan están las siguientes características: líquidos a temperatura ambiente, contienen una baja solubilidad en agua, y una alta solubilidad en alcohol, aceites fijos y grasas, son volátiles y contienen un alto índice de refracción.

El aceite esencial en este caso se obtiene de las hojas de guayaba, su nombre científico es *Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*. El fruto Tiene una corteza delgada y delicada, color verde pálido a rojo en la etapa madura, pulpa blanca cremosa, con muchas semillas pequeñas duras y un fuerte aroma característico.

Los árboles silvestres de la guayaba están en varias regiones del país y pocos saben de los beneficios de ella como lo es su alto contenido de vitamina c, lo que lo convierte en un antigripal natural, otra característica de la guayaba es que sus hojas y corteza son astringentes intestinales, ya que son ricas en taninos, también son un buen reconstituyente que cura la anemia y debilidades nerviosas. Este fruto es cultivado comercialmente en varios países como lo es España, Colombia, Cuba entre otros. Además de que el extracto de aceite esencial del mismo es muy comercializado en estos países.

1. MARCO CONCEPTUAL

1.1. Antecedentes

En la actualidad Guatemala cuenta con escasos estudios respecto al aceite esencial de la guayaba, por otra parte, sí existen estudios referentes a ella en varios países y eso es debido a la utilización del aceite esencial en aplicaciones como el área medicinal, y debido a la cantidad de cultivos respecto a la guayaba, en Cuba es donde se han realizado una gran variedad de estos estudios.

En la revista Cubana de Plantas Medicinales, el estudio trata de la evaluación de la actividad bactericida de aceites esenciales de hojas de Guayabo, Pitongo y Arazá, los cuales son arboles fructíferos que son utilizados para tratamientos contra la diarrea. Se realizó a base de los aceites esenciales los cuales se evaluaron para ver la actividad ante la Escherichia Coli, Salmonella Typhimurium, entre otros. El resultado fue los aceites presentaron actividad bactericida frente a los microorganismos testados y los constituyentes en ellos encontrados son compatibles con los encontrados en otros trabajos. El estudio fue realizado en la Universidad Federal de Pelotas (UFpel), en Brasil como comentan Souza, Dame, Hornke y Ziemann.

A través de la revista de la Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Fisicas y Naturales realizaron un estudio del rendimiento y capacidad antioxidante de extractos de *Rosmarinus Officinalis, Salvia Officinalis y Psidium Guajava* obtenidos con CO2 supercrítico. Los extractos fueron obtenidos de las hojas y tallos. El resultado fue del extracto de romero mostró los mejores

resultados de actividad antioxidante, al inhibir el 88% de la peroxidación lipídica de los ácidos grasos presentes en una base cosmética analizada; El estudio fue realizado en la Universidad Industrial de Santander en Bucaramanga, Colombia por Rodríguez, Vásquez y Martínez.

Otro estudio respecto a la guayaba (*Psidium Guajava L.*), es la de una investigación de hojas el cual trata de la evaluación del estado del arte en la utilidad de los extractos de las hojas de esta especie. El resultado fue Las hojas de esta planta contienen taninos, fenoles, flavonoides, triterpenos y esteroides, así como de saponinas y compuestos aminados. También Se ha reportado un aceite esencial y otras sustancias volátiles. El estudio se encuentra en la revista Cubana de Farmacia y fue realizado en el Departamento de Farmacia de la Universidad de Oriente en Cuba escrita por Rodríguez, Lafourcade y Pérez.

Por otra parte, se realizó un estudio de plantas medicinales de interés estomatológico entre los cuales se realizaron estudios respecto a la guayaba (*Psidium Guajava L.*), donde se evaluaron diferentes plantas para ver si tienen una aplicación terapéutica importante en la estomatología. Se concluyó que Las plantas medicinales mantienen su vigencia en la terapéutica estomatológica, su empleo constituye un método eficaz, económico e inocuo que generalmente puede producir analgesia. El estudio fue realizado en la Universidad de Ciencias Médicas de Cuba por Corrales, Reyes y González.

En Guatemala por parte de la Universidad de San Carlos de Guatemala realizó un estudio referente a la evaluación del rendimiento extractivo del aceite esencial de ciprés ($Cupressus\ Lusitánica\ Mill.$), obtenido de hojas, ramas y frutos mediante el método de hidrodestilación a nivel laboratorio, el estudio consistía en obtener el tiempo óptimo de extracción de las diferentes materias primas del ciprés, determinar el contenido de α - pineno y realizar una

caracterización fisicoquímica de cada extracto obtenido. En la caracterización fisicoquímica del aceite esencial se realizó la Cromatografía de gases con acoplamiento a espectrometría de masas (GC-MS), y medición de Índice de refracción. El mayor valor de rendimiento extractivo del aceite esencial de ciprés (*Cupressus lusitánica Mill*), fue de 0,32±0,03 por ciento obtenido de frutos, correspondiente al tiempo de extracción mayor. Todo el proceso de extracción del aceite fue realizado por Saravia, en el Laboratorio de Investigación de Extractos Vegetales.

Otro estudio referente a aceites esenciales realizado en el Laboratorio de Investigación de Extractos Vegetales de la Universidad de San Carlos de Guatemala, consiste en la evaluación del rendimiento extractivo y la caracterización fisicoquímica del aceite esencial de Cardamomo (Elettaria cardamomum L. Matton) de primera, segunda y tercera calidad por medio del método de hidrodestilación a nivel laboratorio. Para ello se empleó materia prima vegetal de cardamomo (Elettaria cardamomum L. Matton), pergamino deshidratada molida a la cual se le evaluó el porcentaje de humedad con base seca y se realizó un análisis granulométrico del tamiz, con base a tres calidades y en función de tres tiempos extractivos. Se determinó que no existe diferencia significativa en el rendimiento extractivo másico del aceite esencial de cardamomo con base a tres calidades y en función del tiempo de extracción a escala laboratorio comenta Espina.

Por parte de la Universidad de San Carlos de Guatemala se realizó un estudio referente a la evaluación del rendimiento extractivo, rendimiento volumétrico y contenido de α-pineno del aceite esencial de las hojas de ciprés (*Cupressus lusitánica Mill*), en base a tres niveles altitudinales por medio del método de hidrodestilación a nivel laboratorio. Se evaluó la calidad del aceite esencial extraído a través de la caracterización fisicoquímica y el análisis por

cromatografía de gases con acoplamiento a espectrofotometría de masas (GC-MS, según siglas en inglés); la cual reflejó un panorama de la composición química del aceite esencial y permitió cuantificar los componentes activos y metabolitos secundarios que le dan las características principales al aceite esencial. Se determinó que si existe diferencia significativa en el porcentaje de rendimiento extractivo en función de los niveles altitudinales y los tiempos de extracción evaluados según Monterroso.

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Aceites esenciales

Los aceites esenciales son líquidos odoríferos de naturaleza oleosa encontradas prácticamente en todos los vegetales; son muy numerosos y están ampliamente distribuidos en distintas partes del mismo vegetal: en las raíces, tallos, hojas, flores y frutos. Briga explica que estos aceites esenciales son componentes heterogéneos de terpenos, sesquiterpenos, ácidos, ésteres, fenoles, lactonas; todos ellos fácilmente separables ya sean por métodos químicos o físicos, como la destilación, refrigeración, centrifugación, entre otros.

El aceite esencial dentro de la planta se encuentra confinado en un tejido al cual se le denomina micela. De lo contrario, podría tener influencia en la transpiración de la planta, e inhibir la formación de clorofila; esto es perjudicial o beneficioso, dependiendo del tipo de planta, si es clorofila o no. De lo contrario, se puede concluir que los aceites esenciales generados por la planta, son de diferentes utilidades, según su género, especie o variedad.

Los aceites esenciales de las plantas son las sustancias responsables del olor formado en la planta, tomando materiales exteriores, absorbiéndolos y transformándolos en fragmentos del sistema de la planta como parte de la estructura celular, con una consistencia rígida. Briga dice que aún no se conoce la utilidad que obtiene la planta de estos compuestos, pero se le atribuyen algunos de los siguientes beneficios: para regular su temperatura, liberándolos como vapores, como atractivo para los insectos colaboradores de

la polinización, o como repelente para que los insectos dañinos no se aproximen.

2.1.1. Aceites esenciales a nivel laboratorio

Permite conseguir el aceite esencial para realizar investigaciones, poner a punto la técnica (evaluar factibilidades), y producir pequeños niveles. Altamente seleccionado por universidades y laboratorios de plantas pilotos. Diseño compacto y apto para mesada de laboratorios, además de que la eficiencia en la extracción es mejor debido a la cantidad de materia prima que se utiliza indica Figmay.

2.1.2. Aceites esenciales a nivel industrial

Estos aceites comenta Figmay que son orientados a procesos de obtención a gran escala, altamente elegidos por empresas industriales debido a su diseño funcional para realizar rápidos lotes de producción.

2.1.3. Aplicabilidad industrial

El uso de los aceites esenciales de condimentos y especias tanto en la industria de alimentos como en la industria farmacéutica es cada vez más generalizado, debido en parte a la uniformidad del aroma y a la minimización de las posibilidades de contaminación microbiana, cuando se compara con el uso directo de tales especias y condimentos explica Acevedo.

El valor económico de los aceites esenciales y su aplicabilidad industrial están directamente relacionados con su composición química y con la actividad biológica. El creciente interés por el uso de extractos naturales antioxidantes

que puedan sustituir los aditivos sintéticos en los alimentos, resulta una alternativa prometedora para la prevención y tratamiento de enfermedades producidas por compuestos sintéticos. De hecho, muchos autores han reportado propiedades antimicrobianas, antifúngicas, antioxidantes y antiradicalarias de diferentes especias y aceites esenciales y en algunos casos, una aplicación directamente relacionada con los alimentos. La extracción de estos indica Acevedo que puede ser realizada por métodos convencionales como la destilación con arrastre de vapor.

2.1.4. Composición química

La composición química son las sustancias que se encuentran presentes en una determinada muestra y en las cantidades en las cuales se encuentran dispuestas. Los aceites esenciales son lípidos no relacionados con ácidos grasos. Son compuestos terpenoides derivados por condensación del isopreno, lípidos isoprenoides. La mayoría de los aceites esenciales son hidrocarburos y poseen funciones oxidadas aclara Ege.

Existe por lo tanto una gran variedad de compuestos los cuales se pueden clasificar en la forma siguiente: compuestos de la serie terpénica; compuestos acíclicos sin ramas laterales; derivados del benceno; y otros compuestos de diversa estructura química en lo que respecta a Ege.

Los compuestos de la serie terpénica son compuestos naturales que contienen dobles enlaces, los terpenos pueden dividirse en unidades de isopreno de cinco carbonos, los terpenos se clasifican de acuerdo al número de subunidades de isopreno que contienen.

Tabla I. Composición química de un aceite esencial

Compuesto	t _R (min)	Abundancia relativa (%)
o-Cimeno	18,05	0,31
D-Limoneno	18,24	7,18
3,7-Dimetil- 6-octenal	22,48	0,42
Mentona	22,95	0,65
Acetato de lavandulol	30,80	0,51
Copaeno	31,21	0,84
ß-Cariofileno	32,63	35,91
α-Bergamoteno	32,74	1,83
Decahidro-1,1,7-trimetil-4-metileno-1H Cicloprop[e]azuleno	33,12	0,38
α-Cariofileno	33,59	5,82
α –Curcumeno	33,97	3,85
ß –Farneseno	34,16	0,39
N.I. (C ₁₅ H ₂₆ O)	35,02	0,79
N.I. (C ₁₅ H ₂₄ O)	36,16	1,17
Óxido de cariofileno	37,09	36,49
N.I. (C ₁₅ H ₂₄ O)	37,83	2,86
N.I. (C ₁₅ H ₂₄ O)	39,45	0,60

Fuente: RUIZ, Candy. Composición química de aceites esenciales de 10 plantas aromáticas peruanas. p.146.

2.1.5. Propiedades fisicoquímicas

Los aceites esenciales son altamente volátiles y líquidos a temperatura ambiente indica Ruíz, son incoloros o ligeramente amarillos cuando son recientemente destilados. Generalmente la densidad es inferior a la del agua (a excepción del clavo de olor), poseen un índice de refracción elevado y son poco solubles en agua.

Tabla II. Determinación fisicoquímica de un aceite esencial

Determinaciones físico-químicas	Valor medio
Rendimiento medio anual	2,57 mL/kg peso oreado
	4,03 mL/kg peso seco
Tiempo óptimo de destilación	5 horas
Indice de refracción	1,4800±0,0001
Densidad relativa	0,884
Rotación específica	+12, 4°±0,1°
•	(0.2; ciclohexano)
Características organolépticas	Descripciones
Aroma	Nota inicial: especiosa, picante,
	algo cítrica
	Nota media: menos picante y
	fresca
	Nota de fondo: frutal, dulce
	Nota secundaria: resinosa
	(luego de 8 horas)
	Fuerza: moderada
	Persistencia: cinco - seis días.
Color	Levemente amarillo
Apariencia	Uniforme, translúcido

Fuente: MORALES, Soledad. *Etnobotánica, anatomía y caracterización fisicoquímica del aceite* esencial de Baccharis obovata. p. 8.

2.1.6. Hidrolatos

También denominado agua floral, hidrosol, un destilado herbal, o agua esencial, es un producto acuoso de la destilación. Es una suspensión coloidal (hidrosol), de aceites esenciales, así como de componentes hidrosolubles obtenidos por la hidrodestilación de vapor o destilación de hierbas o plantas. Los destilados herbales tienen usos como saborizantes, medicinas y cosméticos (en el cuidado de la piel), explica Ruiz.

2.2. Extracciones sólido – líquido

Radica en la disolución de un componente que forma parte de un sólido, empleando un disolvente adecuado en el que es insoluble el resto del sólido, que se denominara inerte. Tojo comenta que para llevar a cabo el proceso es necesario tener contacto con el disolvente con el sólido a tratar, para disolver el componente soluble, o soluto. También es necesario la separación de la disolución y el resto del sólido.

La disolución se separa en extracto que es la parte superior mientras que lo sobrante se le llama lodos. Se puede hacer una extracción consistente en añadir este disolvente a la mezcla contenida en un vaso de precipitados, un matraz o una cápsula de porcelana, en frío o en caliente, agitar o triturar con ayuda de una varilla de vidrio y separar por filtración la disolución que contiene el producto extraído y la fracción insoluble que contiene las impurezas. Si, al contrario, lo que se pretende es disolver las impurezas de la mezcla sólida, dejando el producto deseado como fracción insoluble, el proceso, en lugar de extracción, se denomina lavado.

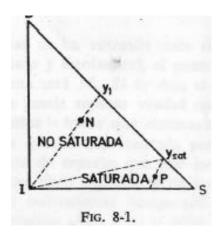
Para la metodología de cálculo de las extracciones solido líquido se resuelven por aplicación de balance de materia y energía juntamente con el concepto de etapa teórica. Normalmente se omiten las ecuaciones de balance de energía, dada la poca importancia de los cambios energéticos en los procesos industriales de extracción.

Debido a eso los cálculos se basan en la aplicación reiterada de balances de materia y en el concepto de etapa teórica, también puede acudirse a procedimientos algébricos como gráficos. Cuando el número de etapas es pequeño, como suele ocurrir en este tipo de extracción, los métodos gráficos

permiten una gran simplificación de los cálculos y una visión más general del problema en el transcurso del proceso expresa Tojo.

Entre los diagramas más importantes empleados en esta operación se encuentra el triángulo rectángulo, y representa el vértice del ángulo recto como el componente inerte I, en el de la derecha el componente a extraer o soluto S. En el superior el disolvente D. En consecuencia, en el lado IS estarán localizadas las mezclas binarias de soluto solido inerte, en el lado ID se encuentran las distintas proporciones de inerte y disolvente que como son totalmente inmiscibles estarán separadas en dos fases; en la hipotenusa DS estarán localizadas las mezclas de soluto y disolvente que si son miscibles en todas las proporciones y que corresponderán a sistemas de una sola fase liquida. Los puntos del interior del triángulo representaran mezclas ternarias.

Figura 1. Diagrama triangulo rectángulo para mezclas ternarias



Fuente: TOJO, Gabriel. Extracción sólido – líquido; problemas de ingeniería. Capitulo 8. p. 209.

En la extracción sólido - líquido, en la que el soluto se encuentre originalmente en fase sólida, la cantidad de soluto que puede disolverse estará limitada por la saturación de la disolución, que será en función de la

temperatura y la presión. Prescindiendo del efecto de la presión, que es solo apreciable a temperaturas elevadas, el diagrama se puede dividir en dos zonas las cuales son una de saturación y otra de sobresaturación. En la primera los sólidos sostenidos en el sistema serán la suma de la sustancia inerte y la parte no disuelta del solido a extraer; evidentemente en la segunda el sólido presente es solo el material inerte según Tojo.

2.3. Métodos de extracción de los aceites esenciales

Existen varios métodos de extracción para obtener los aceites esenciales de las plantas, los cuales se encuentran en las células grasas, las vías o los pelos oleaginosos, que se encuentran a su vez en las hojas, semillas, tallos, flores y frutos de las mismas. Entre los métodos de extracción se encuentran los siguientes:

2.3.1. Destilación

En la industria el método más utilizado para la obtención de los aceites volátiles, tanto a nivel industrial como de laboratorio, es la destilación. Se define como la separación de los componentes de una mezcla de dos o más líquidos en virtud de sus presiones de vapor. La destilación consiste en extraer los aceites esenciales mediante vapor de agua, que pasa a través del material vegetal arrastrando las partículas de aceite vegetal precisa Granados.

La destilación por arrastre con vapor tiene una duración entre tres o más horas, según el material que se esté tratando obteniéndose muy poca cantidad de esencia. Esto se debe a que el contenido de aceite en la planta es bajo y por ello es necesario destilar abundante cantidad de materia prima para obtener un volumen que justifique el gasto que se produce. Los rendimientos suelen ser

menores al 1 %, es decir que por cien kilogramos de hierba fresca se obtiene menos de un kilogramo de aceite esencial.

Del vapor condensado se debe separar la fase de agua por medio de diferencia de densidad por el método de decantación. El método de extracción por destilación posee tres modalidades: a) hidrodestilación; b) destilación en corriente de vapor de agua y c) mixta.

2.3.2. Hidrodestilación

La materia prima está sumergida en el agua dentro de un recipiente o alambique que se calienta directamente hasta ebullición. Se suministra calor, para generar vapor, que se encuentra en contacto directo con el material vegetal, conduciéndolo después al condensador. En este método el tamaño de partícula puede ser de un tamiz muy pequeño aumentado así el área de contacto y favoreciendo la extracción sin que exista el riesgo de que el vapor lo arrastre, debido a que el vapor se genera dentro del mismo recipiente y su presión de vapor es menor que el vapor que se extrae de una caldera y esto es compensado por el tamaño de partícula indica Monterroso.

2.3.2.1. Equipo de extracción por el método de hidrodestilación

A escala laboratorio, el equipo comúnmente conocido es el denominado Neoclevenger, este es usado en una infinidad de laboratorios y considerado en varios estándares internacionales como el más adecuado para la determinación del contenido total del aceite esencial de una planta aromática. Entre las ventajas del equipo a escala laboratorio se puede mencionar su simplicidad y flexibilidad para trabajar con aceites de diferente densidad y naturaleza. Entre sus desventajas cabe recalcar que el tiempo de extracción es muy largo comparado con el usado industrialmente, porque se busca agotar todo el aceite contenido en la planta aclara Monterroso.

Figura 2. Equipo de extracción de aceites esenciales Neoclevenger



Fuente: Pyramid Industries. *Aparato extractor de aceites*. http://pyramidlaboratoryglassware. com/product/clevengar-apparatus/. Consulta: octubre de 2018.

El Neoclevenger explica Monterroso que está compuesto por una unión esmerilada, lugar donde se acopla el balón de extracción, luego tiene un cuello donde corresponde al retorno de agua condensada, producto de la evaporación y acondicionamiento térmico por parte del agua que contiene el balón; Además tiene una pequeña contracción del área seccional del flujo de vapor, el cual provoca una caída de presión que se ve reflejado en el aumento de velocidad, evitando que el vapor se condense antes de llegar al condensador y por ultimo tiene una sección donde dirige el vapor generado en el balón de extracción hacía el condensador.

2.3.3. Destilación en arrastre con vapor directo

Este método consiste en poner en contacto el material con vapor seco generado en una caldera para posteriormente condensarlo. Este método tiene la ventaja de que el vapor que se pone en contacto con el material vegetal se encuentra a mayor presión lo que logra favorecer la extracción rompiendo más fácilmente las micelas donde se encuentra el aceite esencial. Cuando se realiza este tipo de extracción Castañeda comenta que se debe tener cuidado de que el tamaño de partícula no sea muy pequeño, ya que puede ser arrastrado por el vapor contaminando el producto condensado.

2.3.4. Destilación mixta

El vapor se produce en el mismo recipiente en el que se encuentra el material vegetal, sostenida sobre el nivel del agua por una rejilla metálica. La parte baja del destilador es llenada con agua a un nivel por debajo de la rejilla calentando el agua por alguno de los métodos mencionados anteriormente.

Se debe tener en cuenta que al utilizar este método el vapor debe estar siempre saturado y nunca sobrecalentado manteniendo el material lejos del contacto con el agua. Luego de realizada la destilación mixta los productos volátiles son arrastrados por el vapor de agua hacia un refrigerante donde se condensan. Las esencias se separan del agua de destilación una vez frías. Este método es muy sencillo y económico, sin embargo, no se puede utilizar cuando los constituyentes de la esencia son alterados por el calor expresa Castañeda.

2.3.5. Expresión en frío

Algunas esencias como las de los frutos cítricos (naranja, limón), no pueden destilarse porque se descomponen, se extraen en frío por expresión de las cáscaras (pericarpios); para ello industrialmente se procede a la escarificación mecánica haciendo pequeñas incisiones en el material vegetal haciendo rodar los frutos sobre bandejas revestidas de púas que penetran en la epidermis y rompen las glándulas oleíferas. Comercialmente este método es muy costoso indica Castañeda, de bajo rendimiento y a veces se combina con otros métodos para obtener un buen rendimiento.

2.3.6. Maceración

La maceración aclara Castañeda que fue un proceso importante antes de la introducción de los métodos modernos de extracción con disolventes, la diferencia es que el material permanece varios días sumergido; en este sistema se usa aceite, grasa fundida y aún etanol.

2.3.7. Extracción con solventes volátiles

La principal ventaja de este método consiste en que es un proceso muy suave, se usa en aquellos casos en que el contenido en esencia es bajo o cuando sus constituyentes son muy delicados. Los disolventes utilizados generalmente son: éter etílico, éter de petróleo, hexano y benceno. Una vez extraída la esencia se elimina el solvente a presión reducida. El residuo obtenido se denomina "concreto de esencia" y por lo general es de consistencia semisólida debido a otras sustancias acompañantes (ceras y otros). Se purifica por tratamiento con alcohol absoluto y constituye la "esencia absoluta", según Castañeda.

2.3.8. Enfloración (enfleurage)

En la actualidad esta técnica sólo se aplica en casos muy especiales para órganos frágiles (flores de jazmín, clavel, nardo o jacinto), y consiste en ponerlos en contacto a temperatura ambiente con materia grasa, la que se satura con la esencia. La esencia es retirada posteriormente del material graso por tratamiento con etanol absoluto indica Monterroso, y evapora el disolvente a presión reducida.

2.3.9. Fluidos supercríticos

Este método es de desarrollo actual, la materia vegetal es cortada en trozos pequeños o molido, se empaca en un cámara de acero inoxidable y se hace circular a través de esta un líquido supercrítico, los aceites esenciales son así solubilizados, arrastrados y el líquido supercrítico que actúa como disolvente extractor, se elimina por descompresión progresiva hasta alcanzar la presión y temperatura ambiente y finalmente se obtiene el aceite esencial indica Castañeda.

La extracción con fluidos supercríticos puede ser realizada mediante dos modos de operación. El primero es por extracción selectiva en donde se envuelve la capacidad de solvatación del fluido utilizado en la extracción por medio de la manipulación de las condiciones de temperatura y presión o modificando la naturaleza química del solvente con la adición de un cosolvente. El segundo es por separación selectiva, la cual se obtiene por medio de la despresurización, un calentamiento o enfriamiento gradual del sustrato, permitiendo con esto un fraccionamiento controlado de los productos por extraer.

2.4. Métodos de identificación y cuantificación

Existen varias formas de identificar los compuestos por los que están formados los aceites esenciales, entre las cuales se encuentran:

2.4.1. Densidad e índice de refracción

Para Saravia determinando la densidad e índice de refracción del aceite esencial se pueden hacer deducciones sobre los componentes presentes. Por lo que densidades menores de 0,9 e índices de refracción menores de 1,47 sugieren un alto porcentaje de hidrocarburos terpénicos o compuestos alifáticos. Si la densidad es mayor es posible la presencia de compuestos oxigenados alifáticos.

2.4.2. Solubilidad

La solubilidad a 20 ° C de un aceite esencial en soluciones de etanolagua puede ser indicador de compuestos oxigenados. La solubilidad en volúmenes iguales de disulfuro de carbono puede indicar agua debido a la opalescencia. En soluciones de hidróxido de potasio la solubilidad aumenta con el contenido de fenoles comenta Saravia.

2.4.3. Cromatografía de gases

Los aceites esenciales tienen una inmensa gama de compuestos que los forman, por lo tanto, es indispensable determinar la composición de los mismos y la proporción en que estos compuestos se encuentran en los aceites. Para ello se necesita aislar y purificar los compuestos mediante la cromatografía. Saravia explica que existen varios tipos de fases estacionarias disponibles para

la cromatografía de gases, la fase estacionaria retiene mejor los solutos de su misma clase. Los siguientes son ejemplos de los solutos que son retenidos frecuentemente por las fases líquidas, compuestos como los hidrocarburos saturados, los hidrocarburos aromáticos, los cuales son compuestos de baja polaridad; los éteres, cetonas y aldehídos los cuales son de polaridad intermedia, como los alcoholes, por ejemplo; los que son compuestos polares; y los hay también muy polares, como los ácidos polipróticos.

Las fases estacionarias más usadas en la cromatografía de gases son: elastómeros de silicona y Apiezon L como fases no polares y carbowax 400 y poliéster de adipato de dietilenglicol. Los cromatógrafos de acoplados a espectrómetros de masa han permitido hacer una identificación y cuantificación de los picos casi completa.

2.4.3.1. Aplicaciones de la cromatografía de gases

Entre las aplicaciones explica Saravia que se encuentran las medioambientales donde hacen análisis de pesticidas y herbicidas, análisis de hidrocarburos, semivolátiles y volátiles, análisis del aire, entre otros. Para los alimentos y aromas se analizan las fragancias y aromas, aceites, bebidas, ácidos orgánicos, azúcares, ésteres metílicos, triglicéridos, alcoholes, entre otros. Para la química industrial analizan los alcoholes, ácidos orgánicos, aminas, aldehídos y cetonas, ésteres y glicoles, hidrocarburos, disolventes, anilinas, gases inorgánicos. Para las derivadas del petróleo se analiza gas natural, gases permanentes, gas derefinería, gasolinas, gasóleos, parafinas.

2.4.4. Espectrometría de masas

Es una técnica analítica que permite estudiar compuestos de naturaleza diversa: orgánica, inorgánica o biológica (incluyendo biopolímeros y macro moléculas naturales o artificiales), y obtener información cualitativa o cuantitativa. Mediante el análisis por Espectrometría de masas es posible obtener información de la masa molecular del compuesto analizado, e información estructural del mismo, o simplemente detectar su presencia y/o cuantificar su concentración.

Para ello es necesario ionizar las moléculas, utilizando si fuera preciso una separación cromatográfica (UPLC, GC) previa, y obtener los iones formados en fase gaseosa. Este proceso tiene lugar en la fuente de ionización. Los iones generados son acelerados hacia un analizador y separados en función de su relación masa/carga (m/z) mediante la aplicación de campos eléctricos, magnéticos ó simplemente determinando el tiempo de llegada a un detector. Los iones que llegan al detector producen una señal eléctrica que es procesada, ampliada y enviada a un ordenador. El registro obtenido se denomina Espectro de masas y representa las abundancias iónicas obtenidas en función de la relación masa/carga de los iones detectados indica Saravia.

2.5. Factores que afectan el rendimiento de los aceites esenciales

De acuerdo con Vásquez, entre los factores que intervienen directamente en el rendimiento de la producción de aceites esenciales crudos se pueden mencionar los siguientes:

 Tipo de materia prima: se refiere a las características genéticas de la planta, ya que existe diferencia aún dentro de las diferentes familias; además la materia prima también está influida por el lugar y la época de producción, por la maduración o edad de la planta, de las hojas y por la limpieza en el corte, enfermedades de la planta, etc. Según Vásquez.

- Tiempo de secado: dependiendo de este tiempo de secado, la planta tendrá más o menos cantidad de agua por lo que el rendimiento se ve influido. Según Vásquez.
- Tamaño de partícula: el área de transferencia y la cantidad de compartimientos abiertos depende de ese factor, así como el flujo de vapor en los métodos de arrastre con vapor. Según Vásquez.
- Tiempo de extracción: se refiere al tiempo del proceso de extracción, en el cual el aceite de la planta es extraído gradualmente. Según Vásquez.
- Características del equipo de extracción: Se ve afectado por el material del equipo de extracción, así como el tamaño del mismo. Según Vásquez.

2.6. Materia prima

Los aceites esenciales se encuentran muy difundidos en el reino vegetal y en la mayoría de especies vegetales conocidas en distintas composiciones, siendo posible su extracción de diversas partes de la estructura vegetal:

- Flores (lavanda, jazmín)
- Hojas (albahaca, ciprés, eucalipto)
- Frutos (anís, ciprés)
- Madera (cedro, cidro)

- Raíz (gengibre)
- Cáscara de los frutos (limón, naranja)

Además, en las diferentes partes de la misma planta proporcionan aceite esencial distinto en composición y propiedades. Las cantidades y composiciones de los aceites varían de una especie vegetal a otra, dentro de los mismos géneros de planta, y aun dentro de las mismas especies dependiendo de la región de cultivo, el clima, temperatura, altitud, la madurez de la planta y otros según Campbell y Kellogg.

2.7. Guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine)

Las guayabas son un género de unas 100 especies de árboles tropicales y árboles pequeños en la familia Myrtaceae, nativas del Caribe, América Central, América del Norte y América del Sur. Las hojas son contrarias, simples, elípticas a ovaladas, de cinco a diez centímetros de largo. Las flores son blancas, con cinco pétalos y numerosos estambres.

Tiene una corteza delgada y delicada, color verde pálido a rojo en la etapa madura en algunas especies, de verde a amarillo, rosa a rojo en otras, pulpa blanca cremosa o anaranjada con muchas semillitas duras y un fuerte aroma característico. Es rica en vitaminas C, A, B, además tiene beneficios nutritivos ya que su pulpa es considerada ácida. Se cultivan en muchos países de la zona intertropical subtropical por sus frutos comestibles, varias especies se cultivan comercialmente comenta Ariana.

Figura 3. Hojas y frutos de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*)



Fuente: Kuka Jardinería. *Guayaba roja*. https://www.jardineriakuka.com/frutales-tropicales/9793-guayaba-roja.html. Consulta: octubre de 2018.

La fruta se come toda, como una manzana, o rebanada y servida con azúcar y crema como postre. En Asia, la guayaba cruda se sumerge en sal o polvo de ciruela pasa. La guayaba hervida también es usada extensivamente para hacer dulces, jaleas, mermeladas (goiabada) y jugos.

Es una de las frutas con mayores niveles de vitamina C, por gramo contiene unas cuatro veces más que la naranja, lo que la convierte en un antigripal natural. Las hojas y la corteza son astringentes intestinales, especialmente en las diarreas de los niños, pues son ricas en tanino, el cocimiento es empleado para lavar úlceras. La corteza y la raíz del guayabo son un buen reconstituyente que cura la anemia y debilidades nerviosas, tomando el cocimiento con frecuencia. Su contenido natural de producto fresco son

273 unidades en 100 g. Las plantas son sensibles a las heladas. En algunas regiones tropicales, incluyendo Hawai, algunas especies se han convertido en arbustos invasivos. También es de interés para los cultivadores domésticos en áreas de clima templado, como una de las pocas frutas tropicales que se pueden desarrollar hasta que den fruta en macetas dentro de la casa, da a conocer Ariana.

2.7.1. Semántica

- Guaiava pyriformis Gaertn.
- Guajava pyrifera (L.) Kuntze.
- Myrtus guajava (L.) Kuntze
- Myrtus guajava var. pyrifera (L.) Kuntze
- Psidium guajava var. cujavillum (Burman)
- Psidium guajava var. pyrifera (L.) Kuntze
- Psidium guava Griseb.
- Psidium guayava Raddi
- Psidium igatemyensis Barb. Rodr.
- Psidium pomiferum L.
- Psidium pumilum var. guadalupense DC.
- Psidium pumilum Vahl.
- Psidium pyriferum L.
- Psidium sapidissimum Jacq.

2.7.2. Origen/ extensión

Su origen es incierto, pero se le ubica en Mesoamérica. Amador explica que fue propagada por los españoles y portugueses a todos los trópicos del mundo donde se ha naturalizado con ayuda de los pájaros. Actualmente se extiende desde México y Centroamérica, hasta Sudamérica, en específico Brasil y Perú, en Las Antillas y el sur de Florida.

Su área ecológica se encuentra en la franja paralela al ecuador, con límites que no van más allá de los 30º de cada hemisferio. Siglos atrás fue llevada a Africa, Asia y la India y actualmente se le encuentra en más de 50 países con clima tropical. En Hawai, la guayaba crece en franjas desérticas con precipitaciones menores a 250 mm.

2.7.3. Hábitat

Común a la orilla de los caminos y cerca de casas dónde constituye a veces una verdadera plaga. En Guatemala prospera en diferentes condiciones climáticas: habita en climas cálido, semicálido, semiseco, seco y templado. Las plantaciones comerciales se encuentran en climas tropicales secos, con temperaturas promedio de 18 °C, precipitación anual de 600 mm y altitud entre 150 a 600 m.

La temperatura adecuada para su desarrollo está entre los 15 y 30 °C, aunque puede tolerar hasta 45 °C. Los requerimientos pluviales se encuentran entre 1 000 y 2 000 mm. Se han encontrado plantas donde las precipitaciones alcanzan 5 000 mm anuales. La especie aclara Amador tolera diversas condiciones de suelo, pero se produce mejor en suelos bien drenados, con abundante materia orgánica y un pH de 4,5 a 7,5. Es tolerante a suelos ácidos y alcalinos (pH de 4,5 a 9,4). Se presenta principalmente en suelos con problemas de drenaje, tanto de origen calizo como metamórfico e ígneo.

2.7.4. Usos

- Artesanal [madera]. Madera muy compacta, se utiliza en carpintería y torneado. En la India la han utilizado para gravados en madera. Se emplea para la elaboración de juguetes y jirones.
- Colorantes [hojas]. Para teñir seda (malayos) y algodón (sureste de Asia) de color negro. Combustible [madera]. Leña. Tiene un poder calórico de 18 556 kj/kg, ubicando la especie como excelente fuente energética.
- Comestible (fruta, bebidas, dulces) [fruto]. El fruto se consume fresco o en conservas (jaleas, mermeladas, miel) y jugos, en vinos y bebidas refrescantes. El principal mercado de esta fruta es vendiéndola como fruta fresca y como jalea y pasta. El fruto contiene más del doble de Vitamina C que la naranja y puede contener según la variedad entre 486 mg y 871 mg de Vitamina C por 100 g de fruto fresco. Humedad 80 %, proteína 1 %, grasa 0.5 %, carbohidratos 13 % y fibra 5.5 %. Contiene además Vitamina A, fierro, calcio y fósforo.
- Curtiente [corteza, hoja, raíz, flor]. Los taninos se usan para curtir pieles (hojas 10 % de tanino, corteza 11 a 30 %).
- Forrajero [fruto]. Planta forrajera para cría de animales dentro de un solar. El ganado consume los frutos complementando su alimentación.
- Implementos de trabajo [madera]. Implementos agrícolas, mangos para herramientas, (piezas de arado y carretas). En Malasia es una de las maderas más cotizadas para la elaboración de mangos para herramientas.

- Insecticida / tóxica [hoja]. Los extractos de las hojas se usan para controlar a los gusanos (Heliothis virescens) de las yemas del tabaco. Contiene un compuesto que inhibe a Xanthosoma campestri, patógeno bacteriano que causa necrosamiento de la raíz de la col.
- Medicinal [hoja, flor, corteza, fruto, raíz]. La planta tiene las siguientes propiedades y acciones: febrífuga, antisecretoria, antimicrobial, bactericida, cicatrizante, emenagoga, hipoglicémica, laxativa, nutritiva, espasmolítica.

Esta planta tiene un uso muy antiguo y actualmente es importante para tratar casi medio centenar de padecimientos en casi todo el país. Es utilizada con frecuencia en enfermedades gastrointestinales como diarrea, escalofríos y dolor de estómago, mediante la infusión de las hojas tres veces al día o como agua de uso; también puede tomarse con leche, bicarbonato, azúcar y hojas de hierbabuena.

En la región del sureste se emplea en cocimiento para tratar la debilidad y vómito; y en la zona de la Huasteca, la cocción de las hojas sirve para la disentería y los cólicos. En padecimientos de la piel, las hojas solas o mezcladas con otras hierbas, se ponen a hervir y después se aplican de forma local en lavados o cataplasmas. Por otro lado, se recomienda para la caries, hinchazón, bilis, escarlatina, hemorragia vaginal, heridas, fiebre y deshidratación.

Las hojas estrujadas se usan para curar heridas, úlceras y reuma y masticadas para curar las heridas en la boca. Las hojas del guayabo junto con las hojas de Loranthus beengwess, Citrus limon y Jatropha curcas han sido utilizadas en el tratamiento de diabetes melitus como un efectivo hipoglucémico.

La cocción de las hojas alivia el malestar de pecho y garganta. En Venezuela la cataplasma de hojas en el vientre se usa para combatir obstrucción del bazo y para hinchazones. Los extractos fenólicos (guaverina, ácido psidiolico, quercetina) de hojas y flores han demostrado actividad antibiótica (G-) contra Eschericia coli, Salmonella enteriditris y Shigella flexneri. Corteza: se usa para cicatrizar heridas de la piel (llagas y úlceras). El té de hojas y/o corteza se usa como un tratamiento efectivo para desordenes gastrointestinales (disentería, dispepsia, diarrea, dolores de estómago), vértigo, nausea y para regular los períodos menstruales. La raíz, corteza, hojas y frutos verdes son muy astringentes y se emplean contra disenterías atónicas y también como remedio para la sarna y la picazón. Todos estos usos los Amador los da a conocer para entender que fruta es y cómo es que tiene muchas funciones útiles.

3. METODOLOGÍA

3.1. Localización

La parte experimental de la investigación se realizó en las siguientes instalaciones:

- Laboratorio de Investigación de Extractos Vegetales LIEXVE, Sección de Química Industrial, Centro de Investigaciones de Ingeniería, Facultad de Ingeniería, Universidad de San Carlos de Guatemala.
- Laboratorio de Instrumentación Química Avanzada, Departamento de Ingeniería Bioquímica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia.
 Universidad del Valle de Guatemala.

3.2. Variables

Son características que pueden variar y cuya fluctuación puede ser medida u observada, se clasifican en variables dependientes y variables independientes.

3.2.1. Variables dependientes

A continuación, se presentan la distribución de las variables dependientes para el proceso de extracción del aceite esencial a nivel laboratorio.

Tabla III. Variables dependientes para el proceso de extracción

No.	Variable	Unidad
1	% de Rendimiento	%
2	Densidad	g/mL
3	Índice de Refracción	Adimensional
4	Composición Química	% Área

3.2.2. Variables independientes

A continuación, se presentan la distribución de las variables independientes para el proceso de extracción del aceite esencial a nivel laboratorio.

Tabla IV. Variables independientes para el proceso de extracción

No.	Variable	Unidad
1	Tiempo de extracción	min.

Fuente: elaboración propia.

3.3. Delimitación del campo de estudio

La investigación es de carácter cuantitativo y experimental. Se desarrolló la evaluación del rendimiento y caracterización fisicoquímica del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*), variando a tres tiempos de extracción, utilizando el método de hidrodestilación nivel laboratorio para determinar los componentes químicos presentes en el aceite

esencial mediante cromatografía gaseosa con acoplamiento de espectrometría de masas (GC-MS).

3.3.1. Obtención de las muestras

La materia Prima se obtuvo de una plantación de árboles frutales ubicada en el municipio de San Luis Jilotepeque del departamento de Jalapa. Se encuentra ubicada a una altura de 1 362 metros sobre el nivel del mar.

3.3.2. Extracción del aceite esencial

Las hojas frescas obtenidas como materia prima fueron trituradas hasta un tamaño apropiado para llevar a cabo el proceso de extracción. El proceso fue el de hidrodestilación a nivel laboratorio y fue elaborado en el Laboratorio de Investigación de Extractos Vegetales de la universidad de San Carlos de Guatemala.

3.3.3. Análisis cualitativo del aceite esencial

La cromatografía gaseosa con acoplamiento a espectrometría de masas se realizó en el Laboratorio de Instrumentación Química Avanzada, Departamento de Ingeniería Bioquímica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia. Universidad del Valle de Guatemala.

3.4. Recursos humanos disponibles

Investigador: Br. Nadia Mishel Morán Cabrera

Asesor: Ing. Qco. Mario José Mérida Meré

Asesora: Inga. Qca. Telma Maricela Cano Morales

3.5. Recursos materiales disponibles

A continuación, se describen los materiales disponibles.

3.5.1. **Equipo**

- Cromatógrafo de gases con acoplamiento a espectrometría de masas,
 CG-EM.
- Plancha de Calentamiento marca VWR de 60 Hertz.
- Refractómetro "Fisher Scientific" de 60 Hertz.
- Balanza analítica marca VWR.
- Neoclevenger.
- Recirculador.
- Papel pH.
- Procesador de 60 Hertz.

3.5.2. Cristalería

- Balón aforado de 5 000 mL
- Frascos ámbar de 10 mL
- Beacker de 1 000 mL
- Beacker de 100 mL
- Micropipeta de 1 mL
- Beacker de 25 mL
- Picnómetro de 1 mL

3.5.3. Materia prima

Hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine)

Agua desmineralizada

3.6. Técnica cualitativa o cuantitativa

En el presente estudio de investigación se realizará una técnica cuantitativa, sobre la determinación del rendimiento extractivo, densidad, índice de refracción y pH del aceite esencial de hojas de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*).

Para la determinación cualitativa se realizó la identificación de los componentes químicos mediante cromatografía gaseosa al aceite esencial extraído.

3.6.1. Técnica de muestreo

Se obtuvo el aceite esencial a 3 tiempos de extracción para poder determinar sus propiedades fisicoquímicas como lo son la densidad, índice de refracción y pH. También se realizó un análisis cuantitativo de sus componentes a nivel laboratorio.

3.6.2. Preparación de muestras

Para el proceso extractivo utilizando el método de hidrodestilación a nivel laboratorio se realizó con la relación de materia prima/solvente de 1:4 m/v, es decir, 500 g de materia prima con 2000 mL de agua desmineralizada en un balón de 5 000 mL.

Se efectuaron tres repeticiones para cada corrida realizada. El proceso extractivo consistió en 3 repeticiones por cada tiempo de extracción dando un total de 9 tratamientos.

3.6.3. Preparación de la materia prima

Consistió en la disminución del tamaño de partícula de las hojas frescas de guayaba (*Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine*) para ello se trabajó con un procesador. El proceso era cortar una cantidad de hojas y se colocaban en el procesador, se recolectaban hasta obtener los 500 g requeridos para cada extracción.

3.6.4. Proceso de extracción de aceite esencial de hojas de guayaba utilizando el método de hidrodestilación a nivel laboratorio

- Lavar las secciones del Neoclevenger con etanol y agua.
- Colocar 500 g de la materia prima vegetal a extraer en un balón de 5 L.
- En cada extracción agregar 2 000 mL de agua destilada humedeciendo todo el material vegetal, hasta cubrirlo.
- Acoplar el balón que contiene el material vegetal con el Neoclevenger.
- Recircular el agua del condensador del Neoclevenger, manteniendo el agua de recirculación a una temperatura de 10 °C.
- Transferir el calor al balón de 5 L con la plancha de calentamiento, hasta que dé inicio la ebullición.
- Al iniciar la ebullición, tomar el tiempo de destilación en 3 tiempos diferentes (60, 120 y 240 minutos).
- Completar el tiempo de destilación, suspender el calentamiento hasta que termine de producirse el condensado.

- Establecer la masa de un frasco color ámbar.
- Transferir el aceite al frasco, teniendo cuidado de separar la fase oleosa del agua.
- Nuevamente establecer la masa del frasco, pero ahora conteniendo el aceite recuperado, y finalmente por diferencia se determina la masa del aceite obtenido en la destilación.

3.6.5. Análisis fisicoquímicos

Los análisis fisicoquímicos realizados para cada muestra de aceite esencial obtenido fueron: densidad, índice de refracción y potencial de hidrógeno.

3.6.5.1. Densidad

- Limpiar y secar cuidadosamente el picnómetro de 1 mL.
- Tarar y anotar la masa del picnómetro.
- Agregar aceite esencial hasta el borde.
- Tomar nuevamente la masa del picnómetro con el aceite esencial.
- Se calcula la densidad dividiendo el peso en gramos dentro del volumen
- del picnómetro.

3.6.5.2. Índice de refracción

- Primero se comprueba que el prisma del refractómetro este limpio aplicando unas gotas de Xileno.
- Se agregan dos gotas de aceite esencial al prisma, utilizando una micropipeta.

- Se enciende la lámpara usando el interruptor en el lado izquierdo y se ajusta para asegurar el brillo adecuado en el prisma de medición.
- Se observa por el ocular, girar la perilla de compensación de color hasta que aparezca una línea clara y definida en el campo de visión.
- Se gira la perilla de medición alineando la línea delimitadora, con las líneas de intersección (ajustar claro y oscuro al centro).
- Se mueve la palanca de la parte inferior izquierda y leer en la escala superior el índice de refracción y repetir la operación en función del número de soluciones a utilizar.
- Registrar el índice de refracción. Después leer el termómetro y registrar la temperatura.
- Se obtiene el índice de refracción a diferentes temperaturas ambiente.
- Se corrige el valor del índice de refracción a una temperatura de 20 °C
 para tener valores uniformes y poder realizar un análisis comparativo.

3.6.5.3. Potencial de hidrogeno (pH)

- Con la ayuda de una micropipeta se colocan dos gotas del aceite esencial en el papel pH.
- Se espera a que termine de realizar el viraje de colores.
- Se comparan los cuatro colores del papel pH con los indicadores.
- Se toma nota del valor del pH del aceite esencial.

3.6.5.4. Cromatografía de gases con acoplamiento a espectrometría de masas

 Las muestras de aceite esencial de hojas obtenidas mediante hidrodestilación fueron colocadas en frascos ámbar y refrigeradas para preservar la integridad del aceite esencial.

- Se inyectó dentro del cromatógrafo de gases acoplado a espectrómetro de masas, 0,5 mL de aceite esencial.
- Se comparó el peso molecular de las sustancias que se encuentra en el aceite mediante un patrón, por medio de iones.
- Se asigna un área porcentual a cada pico del cromatograma con un nivel de confianza que indica la probabilidad de presencia de un determinado componente en la muestra para un tiempo de retención respectivo.
- Se identifica y nombra cada componente del aceite esencial, según la librería contenida en el programa del cromatógrafo.

3.7. Recolección y ordenamiento de la información

La materia prima vegetal de las hojas de guayaba se utilizó para realizar la extracción del aceite esencial, la recolección de las hojas de guayaba fue en la localidad del municipio de San Luis Jilotepeque del departamento de Jalapa a una altura de 1 362 metros sobre el nivel del mar. La extracción se efectuará en 3 tiempos y realizando 3 repeticiones para cada uno.

Tabla V. Rendimiento extractivo del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Tiempo de extracción (min)	Repetición	Masa de aceite (g)	Rendimiento (%)
	1	0,2883	0,0576
60	2	0,2436	0,0489
	3	0,2664	0,0533
	1	0,3723	0,0745
120	2	0,3682	0,0736
	3	0,2577	0,0515
	1	0,7665	0,1533
240	2	0,5436	0,1087
	3	0,6648	0,1330

Tabla VI. Densidad del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Tiempo de extracción (min)	Corrida	Masa (g)	Volumen (mL)	Densidad (g/mL)
	1	0,2428	0,25	0,9712
60	2	0,2046	0,21	0,9743
	3	0,2430	0,25	0,9718
	1	0,3449	0,36	0,9581
120	2	0,3267	0,34	0,9611
	3	0,2315	0,24	0,9646
	1	0,6085	0,66	0,9221
240	2	0,3970	0,44	0,9022
	3	0,5713	0,60	0,9521

Fuente: elaboración propia.

Tabla VII. Índice de refracción a 20 °C del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Tiempo de extracción (min)	Corrida	Índice de refracción (adimensional)
	1	1,5030
60	2	1,5040
	3	1,5010
	1	1,5048
120	2	1,5045
	3	1,5062
	1	1,5078
240	2	1,5094
	3	1,5102

Tabla VIII. pH del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Tiempo de extracción (min)	Corrida	рН
60	1 2	5 5,5
	3	6
	1	5
120	2	5
	3	6
	1	5
240	2	4
	3	5

Fuente: elaboración propia.

Tabla IX. pH del hidrolato obtenido de la extracción de aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Tiempo de extracción (min)	Corrida	рН
	1	6
60	2	5
	3	6
	1	6
120	2	5
	3	6
	1	6
240	2	5,5
	3	6

Tabla X. Composición química del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio del tiempo de 60min obtenida por GC-MS

No.	Tiempo de retención (min)	Área (%)	Componente químico	Número de CAS
1	33,056	32,47	β-Cariofileno	87-44-5
2	46,065	14,26	Oxido de Cariofileno	1139-30-6
3	35,853	5,23	α-Cariofileno	6753-98-6
4	14,315	4,76	Biciclo[3.1.0]hex-2-eno	28634-89-1
5	39,797	3,57	Naftalina, 1,2,3,4,4a,5,6,8a- octahidro-4a,8-dimetil-2-(1- metiletilideno)-	6813-21-4
6	56,167	3,16	1,6-Metanonaftaleno	20085-93-2
7	54,826	2,91	1,1,2,3,3,5-hexametil-2H-indeno	91324-94-6
8	10,131	2,65	(1R)-(+)-α-Pineno	7785-70-8
9	29,512	2,03	3,7-dimetilocta-1,6-dien-3-ol	78-70-6
10	35,639	1,94	Isocariofileno	1000140-07-2

Fuente: elaboración propia.

Tabla XI. Composición química del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio del tiempo de 120 min obtenida por GC-MS

No.	Tiempo de retención (min)	Área (%)	Componente químico	Número de CAS
1	33,051	33,84	β-Cariofileno	87-44-5
2	46,861	17,02	Oxido de Cariofileno	1139-30-6
3	35,739	5,34	α-Cariofileno	6753-98-6
4	56,154	3,92	(−)-alo-Aromadendreno	25246-27-9
5	54,821	3,41	1,1,2,3,3,5-hexametil-2H-indeno	91324-94-6
6	14,247	3,05	β-pineno	127-91-3
7	39,710	2,99	Naftalina, 1,2,3,4,4a,5,6,8a- octahidro-4a,8-dimetil-2-(1- metiletilideno)-	6813-21-4
8	29,490	1,85	3,7-dimetilocta-1,6-dien-3-ol	78-70-6
9	54,107	1,42	α-Cadinol	481-34-5
10	48,562	1,40	(-)-Humulene epóxido II	19888-34-7

Tabla XII. Composición química del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio del tiempo de 240 min obtenida por GC-MS

No.	Tiempo de retención (min)	Área (%)	Componente químico	Número de CAS
1	33,051	40,26	β-Cariofileno	87-44-5
2	46,865	15,35	Oxido de Cariofileno	1139-30-6
3	35,617	5,36	α-Cariofileno	6753-98-6
4	56,117	4,12	Isocariofileno	1000140-07-2
5	54,785	3,47	(−)-alo-Aromadendreno	25246-27-9
6	39,629	2,73	Naftalina, 1,2,3,4,4a,5,6,8a- octahidro-4a,8-dimetil-2-(1- metiletilideno)-	6813-21-4
7	51,564	2,10	Naftalina, decahidro-4a-metil-1- metileno-7-(1-metiletilenil)	17066-67-0
8	37,427	1,66	α-Selineno	473-13-2
9	54,075	1,38	α-Cadinol	481-34-5
10	49,090	1,16	1,2,3,4,6,8 α -Hexahidro-1- isopropil-4,7-dimetilnaftalina	16728-99-7

3.8. Tabulación, ordenamiento y procesamiento de la información

Para analizar la información obtenida de la fase experimental, se tabuló y procesó la información requerida para caracterizar el aceite esencial. El ordenamiento de los resultados tabulados se realizó de la siguiente manera:

Tabla XIII. Determinación estadística del rendimiento extractivo del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Tiempo de Extracción (min)	Rendimiento (%)	Media (%)	Desviación estándar	Varianza	
	0,0576				
60	0,0489	0,0533	0,0044	1,93E-05	
	0,0533				
	0,0745				
120	0,0736	0,0665	0,0130	1,69E-04	
	0,0515				
	0,1533				
240	0,1087	0,1317	0,0223	4,99E-04	
	0,1330				

Tabla XIV. Determinación estadística de la densidad del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Tiempo de	Densidad	Media	Desviación	Varianza	
extracción (min)	(g/mL)	(g/mL)	estándar		
	0,9712				
60	0,9743	0,9724	0,0016	2,70E-06	
	0,9718	0,0724 0,0010 2,			
	0,9581				
120	0,9611	0,9613	0,0033	1,05E-05	
	0,9646		0,9613 0,0033		
	0,9221				
240	0,9022	0,9255	0,0251	6,31E-05	
	0,9521				

Tabla XV. Determinación estadística del índice de refracción a 20 °C del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Tiempo de extracción (min)	Índice de refracción (adimensional)	Media (adimensional)	Desviación estándar	Varianza	
60	1,5030 1,5040	1,5040	0,0012	1,49E-06	
00	1,5010	1,3040	0,0012	1,436-00	
100	1,5048				
120	1,5045	1,5052	0,0009	8,23E-07	
	1,5062 1,5078				
240	1,5076	1,5091	0,0015	2,30E-06	
210	1,5102	1,0001	0,0010	2,002-00	

Tabla XVI. Determinación estadística del pH del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Tiempo de extracción (min)	рН	Media	Desviación estándar	Varianza
60	5 5,5 6	5,5	0,50	0,30
120	5 5 6	5,3	0,57	0,33
240	5 4 5	4,7	0,57	0,25

Tabla XVII. Determinación estadística del pH del hidrolato obtenido de la extracción de aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Tiempo de extracción (min)	рН	Media	Desviación estándar	Varianza	
60	6 5	5,6 0,58		0,33	
120	6 6 5	5,6 0,58		0,33	
240	6 6 5,5	6		0,08	

3.9. Análisis estadístico

A continuación, se detalla el análisis estadístico.

3.9.1. Diseño experimental

Entre los datos a realizar de la extracción del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) serían para los 3 tiempos (60, 120 y 240 min), estas muestras se realizarán 3 repeticiones a cada una dando un total de 9 tratamientos. Los datos serán analizados e interpretados por medio de la media y la desviación estándar de los datos obtenidos.

3.9.1.1. Cálculo de la media

$$\bar{X} = \frac{\sum X}{N}$$

(Ecuación No.1)

Dónde:

 \bar{X} = Medida de los datos

 $\Sigma \overline{X}$ = Sumatoria de las muestras

N = Número de toma de muestras

3.9.1.2. Cálculo de la desviación estándar

$$S = \sqrt{\frac{\sum (X - \bar{X})^2}{N - 1}}$$

(Ecuación No.2)

Dónde:

 \overline{S} = Desviación estándar

 \bar{X} = Medida de los datos

 $\Sigma \bar{X}$ = Sumatoria de las muestras

N = Número de toma de muestras

3.9.1.3. Coeficiente de variación de Pearson

$$CV = \frac{\sigma}{\bar{x}}$$

(Ecuación No.3)

Dónde:

CV=coeficiente de variación

 σ = desviación estándar

 \bar{x} = media

3.9.1.4. Análisis de varianza

$$S_2^2 = \sum_{i} \sum_{j} \frac{(x_{ij} - \overline{x}_i)^2}{h(n-1)}$$

(Ecuación No.4)

Dónde:

 S_2^2 = media cuadrática dentro de la muestra

 x_{ij} = repetición j de la muestra i

 $\overline{x_i}$ = media de la muestra i

n =número de repeticiones

h =número de muestras

h(n-1) =grados de libertad

La variación entre muestras se define mediante la siguiente ecuación:

$$S_1^2 = \frac{n \sum_i (\bar{x}_i - \bar{x})^2}{h - 1}$$

(Ecuación No.5)

Dónde:

 S_1^2 = media cuadrática entre muestras

n =número de repeticiones

 $\overline{x_i}$ = media de la muestra i

 \bar{x} =media global

h = numero de muestras

(h-1)= grados de libertad

3.9.1.5. Cálculo de Fisher

Si la hipótesis nula es correcta la variación entre S_1^2 y S_2^2 no debe ser significativa. Esto se comprueba mediante una Prueba F de una cola.

$$F = \frac{S_1^2}{S_2^2}$$

(Ecuación No.6)

Dónde:

 S_2^2 = media cuadrática dentro de la muestra

 S_1^2 = media cuadrática entre muestras

Si la F supera a la F critica esto indica que si hay diferencia significativa entre los resultados.

Tabla XVIII. Análisis de varianza de un factor para el rendimiento del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	44 047,20	1	44 047,20	26,218	0,000450	4,964
Dentro de los grupos	16 800,01	10	1 680,01			
Total	60 847,21	11				

Fuente: elaboración propia.

Tabla XIX. Análisis de varianza de un factor para la densidad del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Origen de las	Suma de	Grados	Promedio			Valor
variaciones	cuadrados	de	de los	F	Probabilidad	crítico
variaciones	Cuaurauos	libertad	cuadrados			para F
Entre grupos	43 501,61	1	43 501,61	25,893	0,000471	4,964
Dentro de los	16 900 04	10	1 680,004			
grupos	16 800,04	10	1 660,004			
Total	60 301,65	11				

Tabla XX. Análisis de varianza de un factor para el índice de refracción del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

	Origen de	Suma de	Grados	Promedio			Valor
	las	cuadrados	de	de los	F	Probabilidad	crítico
	variaciones	cuaurauos	libertad	cuadrados			para F
E	Entre grupos	43 156,53	1	43 156,53	25,688	0,000485	4,964
	Dentro de	16 800,01	10	1 680,00			
	los grupos	10 600,01	10	1 660,00			
	Total	59 956,54	11				

Tabla XXI. Análisis de varianza de un factor para el pH del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Origen de	Suma de	Grados	Promedio			Valor
las	cuadrados	de	de los	F	Probabilidad	crítico
variaciones	Cuaurauos	libertad	cuadrados			para F
Entre grupos	40 905,06	1	40 905,06	24,343	0,000592	4,964
Dentro de	16 803	10	1 680,3			
los grupos	10 003	10	1 000,3			
Total	57 708,06	11				

Tabla XXII. Análisis de varianza de un factor para el pH del hidrolato de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a escala laboratorio

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Probabilidad	Valor crítico para F
Entre grupos	40 635,84	1	40 635,84	4,185	0,000606	4,964
Dentro de los grupos	16 801,88	10	1 680,18			
Total	57 437,72	11				

3.10. Plan de análisis de los resultados

A continuación, se describe el plan de análisis de resultados.

3.10.1. Métodos y modelos de los datos según tipo de variables

Los datos obtenidos de las muestras del extracto de aceite esencial de las hojas de guayaba serán analizados estadísticamente correlacionando las variables independientes con las variables dependientes, a través de un análisis de varianza, ANOVA.

3.10.2. Programas a utilizar para análisis de datos

- Microsoft Excel 2013: Es una hoja de cálculo para facilitar los cálculos que conlleva el estudio y los diferentes gráficos que lo integran.
- QtiPlot: Es un programa informático multiplataforma para gráficos interactivos y análisis de datos.

4. **RESULTADOS**

4.1. Extracción del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) en función de diferentes tiempos de extracción utilizando el método de hidrodestilación a nivel laboratorio

Los resultados obtenidos se muestran en un orden lógico según el planteamiento del diseño metodológico.

Figura 4. Rendimiento extractivo del aceite esencial a nivel laboratorio

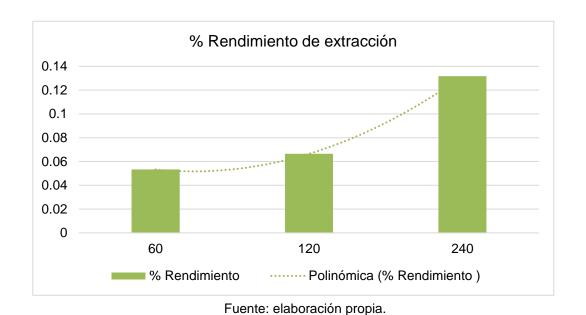
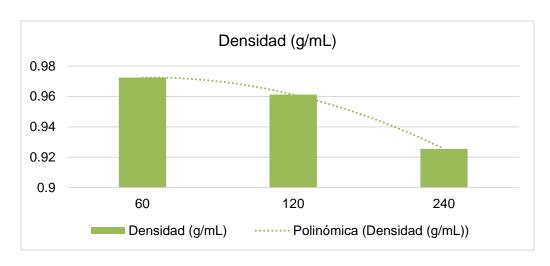


Tabla XXIII. Modelo matemático y coeficiente de correlación del rendimiento extractivo del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Color	Modelo matemático	Dominio	R ²
	%R=0,026t ² -0,0648t+0,0921	[60,240]	1

Figura 5. Densidad del aceite esencial extraído a nivel laboratorio



Fuente: elaboración propia.

Tabla XXIV. Modelo matemático y coeficiente de correlación de la densidad del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Color	Modelo matemático	Dominio	R^2
	$\rho = -0.0124t^2 + 0.026t + 0.9558$	[60,240]	1

Figura 6. **Índice de refracción del aceite esencial extraído a nivel laboratorio**

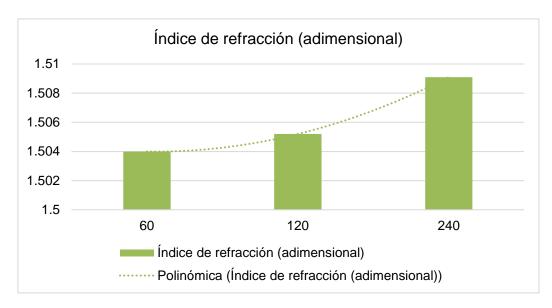


Tabla XXV. Modelo matemático y coeficiente de correlación del índice de refracción del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Color	Modelo matemático	Dominio	R ²
	IR=0,0014t ² -0,0029t+1,5055	[60, 240]	1

5.6
5.4
5.2
5
4.8
4.6
4.4
4.2
60
120
240
pH Polinómica (pH)

Figura 7. pH del aceite esencial extraído a nivel laboratorio

Tabla XXVI. Modelo matemático y coeficiente de correlación del pH del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Color	Modelo matemático	Dominio	R^2	
	$pH = -0.2t^2 + 0.4t + 5.3$	[60, 240]	1	

Figura 8. **pH del hidrolato resultante de la extracción a nivel laboratorio**

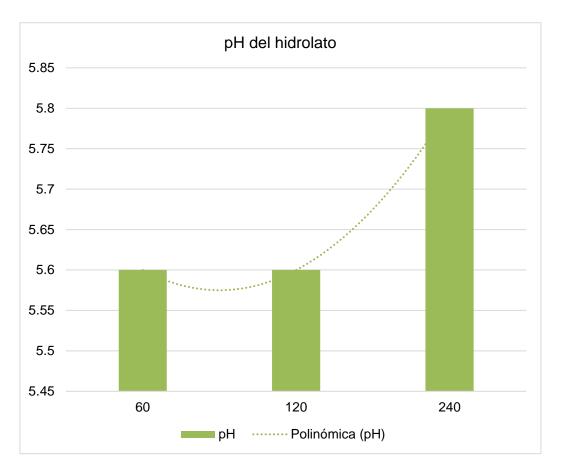


Tabla XXVII. Modelo matemático y coeficiente de correlación del rendimiento extractivo del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Color	Modelo Matemático	Dominio	R^2
	pH=0,1t ² -0,3t+5,8	[60, 240]	1

Tabla XXVIII. Componentes mayoritarios del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio del tiempo de 60min obtenida por GC-MS

No.	Número de CAS	Nombre IUPAC	Nombre Común	Estructura Molecular	Molécula	Área (%)
1	87-44-5	trans- (1R,9S)-8- Metileno- 4,11,11- trimetilbiciclo [7.2.0]undec- 4-eno	β-Cariofileno	H	C15H24	32,47
2	1139- 30-6	(-)-5- Oxatriciclo[8. 2.0.0(4,6)]do decano,4,12, 12-trimetil-9- metileno-, [1R- (1R*,4R*,6R* ,10S*)]	Óxido de Cariofileno	H. Harring	C ₁₅ H ₂₄ O	14,26
3	6753- 98-6	1,4,8- Cicloundecat rieno,2,6,6,9- Tetrametil-, (E,E,E)-	α-Cariofileno		C ₁₅ H ₂₄	5,23
4	28634- 89-1	Biciclo[3.1.0] hex-2-eno	2-Thujeno		C ₁₀ H ₁₆	4,76
5	6813- 21-4	Naftalina, 1,2,3,4,4a,5, 6,8a- octahidro- 4a,8-dimetil- 2-(1- metiletilideno)-	Eudesma- 3,7(11)-dieno	H	C ₁₅ H ₂₄	3,57

Tabla XXIX. Componentes mayoritarios del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio del tiempo de 120 min obtenida por GC-MS

No.	Número de CAS	Nombre IUPAC	Nombre Común	Estructura Molecular	Molécula	Área (%)
1	87-44-5	trans-(1R,9S)-8-Metileno- 4,11,11- trimetilbiciclo[7.2.0]undec- 4-eno	β-Cariofileno		C ₁₅ H ₂₄	33,84
2	1139-30- 6	(-)-5- Oxatriciclo[8.2.0.0(4,6)]dod ecano,4,12,12-trimetil-9- metileno-, [1R- (1R*,4R*,6R*,10S*)]	Óxido de Cariofileno		C ₁₅ H ₂₄ O	17,02
3	6753-98- 6	1,4,8- Cicloundecatrieno,2,6,6,9- Tetrametil-, (E,E,E)-	α-Cariofileno		C15H24	5,34
4	25246- 27-9	1,1,7-Trimetil-4- metilenedecahidro-1H- ciclopropa[e]azuleno	(-)-alo- Aromadendr eno	HH H H H H H H H H H H H H H H H H H H	C ₁₅ H ₂₄	3,92
5	91324- 94-6	1H-Indeno,2,3-dihidro- 1,1,2,2,3,3-hexametil	-Hexametil- 2H-indeno	***	C ₁₅ H ₂₂	3,41

Tabla XXX. Componentes mayoritarios del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio del tiempo de 240 min obtenida por GC-MS

No	Número de CAS	Nombre IUPAC	Nombre Común	Estructura Molecular	Molé- cula	Área (%)
1	87-44-5	trans-(1R,9S)-8-Metileno- 4,11,11- trimetilbiciclo[7.2.0]undec-4-eno	β-Cariofileno		C ₁₅ H ₂₄	40,26
2	1139- 30-6	(-)-5- Oxatriciclo[8.2.0.0(4,6)]dodecan o,4,12,12-trimetil-9-metileno-, [1R-(1R*,4R*,6R*,10S*)]	Óxido de Cariofileno		C ₁₅ H ₂₄ O	15,35
3	6753- 98-6	1,4,8-Cicloundecatrieno,2,6,6,9- Tetrametil-, (E,E,E)-	α-Cariofileno		C ₁₅ H ₂₄	5,36
4	100014 0-07-2	4,11,11-trimetil-8-metileno- bicyclo[7.2.0]undec-4-eno	Isocariofilen o	H	C ₁₅ H ₂₄	4,12
5	25246- 27-9	1,1,7-Trimetil-4- metilenedecahidro-1H- ciclopropa[e]azuleno	(-)-alo- Aromadendr eno		C ₁₅ H ₂₄	3,47

5. INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS

El objetivo general del estudio fue el de evaluar el rendimiento extractivo y la caracterización fisicoquímica del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) variando los tiempos de extracción a nivel laboratorio. Para ello se realizaron análisis fisicoquímicos como la densidad, índice de refracción y pH al aceite esencial obtenido de las hojas de guayaba proveniente del municipio de San Luis Jilotequepe, Jalapa. El aceite esencial obtenido al final del proceso de hidrodestilación posee una fragancia mentosa y un color verdoso.

En la tabla XXIII se observan la media, desviación estándar y varianza del rendimiento extractivo del aceite esencial de hojas de guayaba a diferentes tiempos de extracción. El primer tiempo establecido es el de 60 minutos en el cual se estableció que es el rendimiento extractivo de menor cantidad dando un valor de 0,0533±0,0044 % y a medida que este tiempo se aumentaba, su rendimiento tenía un incremento significativo.

El mayor rendimiento alcanzado fue de 0,1317±0,0223 % a los 240 minutos establecidos, el aceite esencial obtenido en las extracciones de ese tiempo es de un volumen y peso mayor a los otros tiempos. Referente a la desviación estándar y varianza obtenida de cada tiempo de extracción, se observó que los rendimientos obtenidos con la menor dispersión entre las repeticiones son en el tiempo de 60 minutos y a medida que aumentaba el tiempo, la dispersión de las repeticiones también era mayor.

En la figura 4 se puede observar la tendencia obtenida del rendimiento extractivo del aceite esencial de las hojas de guayaba, donde el tiempo de extracción es directamente proporcional al rendimiento extractivo. En los resultados de la tabla XVIII se muestra el análisis de varianza de un factor, en el cual compara si existe diferencia significativa entre las medias muestrales. Esto se logra con el fin de calcular un valor del coeficiente de Fisher y compararlo con su valor crítico, con ello se determinó que el rendimiento extractivo del aceite esencial si presenta una diferencia significativa en función de los tiempos de extracción con una confianza del 95 % a nivel laboratorio.

En la caracterización fisicoquímica del aceite esencial, se obtuvo la densidad, índice de refracción, pH y la determinación de los componentes químicos mayoritarios. Además de evaluar si existe diferencia significativa en función de los diferentes tiempos de extracción. En la tabla XXV están los resultados de la media, desviación estándar y varianza de la densidad del aceite esencial; La densidad mayor obtenida es de 0,9724±0,0016 g/mL en el tiempo de 60 minutos y el de menor densidad es el de 240 minutos con un valor de 0,9255±0,0251 g/mL. Esto es debido a que al estar más tiempo en el proceso de extracción este iba arrastrando nuevos componentes químicos a porcentajes aún mayores para el aceite esencial, provocando cambios significativos a su estructura y densidad. Referente a la desviación estándar y varianza obtenida de cada tiempo de extracción, se observó que las densidades obtenidas con la menor dispersión entre las repeticiones son en el tiempo de 60 minutos y a medida que aumentaba el tiempo, la dispersión de las repeticiones también era mayor.

En la figura 5 se puede observar la tendencia obtenida de la densidad del aceite esencial de las hojas de guayaba, donde es directamente proporcional al tiempo de extracción. Por otro lado, en los resultados de la tabla XIX se muestra

el análisis de varianza de un factor para la densidad del aceite esencial de hojas de guayaba, donde se determinó que si existe diferencia significativa en función de los tiempos de extracción con una confianza del 95 % a nivel laboratorio.

Para los resultados obtenidos del índice de refracción del aceite esencial en la tabla XXVII se observa que en el tiempo de los 240 minutos presenta un índice de refracción de 1,5091±0,0015 que es un valor alto a comparación de los otros tiempos. Esto se debe a que el aceite presenta mayor turbidez y opacidad debido a los compuestos no químicos que posiblemente fueron arrastradas en el proceso extractivo y como consecuencia, el tiempo en el que es refractada la luz a través del aceite esencial, es mayor.

Por otra parte, los índices de refracción evaluados del aceite esencial son relativamente altos comparados a un estudio realizado para la evaluación de la actividad antihelmíntica in vitro de aceites esenciales de tres plantas presentes en la estación biológica Kutukú: Erungium foetidum L. (culantrillo), Psidium Guajaba L. (Guayaba), Ocotea quixos (Lam), Kosterm (Ishpingo). Por lo general están en el rango de 1,489±0,001 según Arias y Flores. La variación de los resultados obtenidos, se debe a que se ha demostrado que las características bioquímicas y físicas de las plantas varían como resultados de cambios fenológicos y en respuesta a diferentes tipos de estrés ambiental, como la temperatura, valores de humedad extremos, disponibilidad de nutrientes, agua, latitud, contaminación o interacciones con otros organismos.

En la figura 6 se puede observar la tendencia obtenida del índice de refracción del aceite esencial de las hojas de guayaba, donde es directamente proporcional al tiempo de extracción. Por otro lado, en los resultados de la tabla XX se muestra el análisis de varianza de un factor para el índice de refracción del aceite esencial de hojas de guayaba, donde se determinó que si

existe diferencia significativa en función de los tiempos de extracción con una confianza del 95 % a nivel laboratorio.

Para los resultados de la tabla XXIX referente al pH obtenido del aceite esencial se encuentran la media, desviación estándar y varianza a los diferentes tiempos de extracción. A medida que el tiempo aumentaba el pH obtenido de disminuía de 5,50±0,50 a 4,70±0,57 provocando una tendencia inversamente proporcional en la figura 7. El pH ácido obtenido en el aceite esencial es debido a que en su estructura tiene componentes químicos como los son los ácidos carboxílicos, metabolitos ácidos, ácidos orgánicos entre otros y que al estar en contacto en todo el proceso de extracción ellos pueden haberse disociado y provocar la acidez en el aceite esencial. Para los resultados de la desviación estándar y varianza obtenida de cada tiempo de extracción, se observó que los pH obtenidos con la menor dispersión entre las repeticiones son en el tiempo de 60 minutos y a medida que aumentaba el tiempo, la dispersión de las repeticiones incremento.

En los resultados de la tabla XXI se muestra el análisis de varianza de un factor para el pH del aceite esencial de hojas de guayaba, donde se determinó que si existe diferencia significativa en función de los tiempos de extracción con una confianza del 95 % a nivel laboratorio.

En la extracción del aceite esencial se obtuvo un subproducto llamado hidrolato, es el agua resultante que estuvo en contacto directo con los componentes volátiles de la hoja de guayaba. En este estudio se evaluó el pH del hidrolato debido a que si presentaba ciertas características como la fragancia mentosa del aceite esencial que por lo general se adquiere al estar presente en todo el proceso de extracción.

En la tabla XXVII están los resultados de la media, desviación estándar y varianza del hidrolato obtenido referente a su pH. Para este caso el pH del agua desmineralizada durante el proceso de extracción fue de 7,60±0,20 y el pH del hidrolato obtenido fue de 5,60±0,57 a 5,80±0,28 lo que indica que si se mostró un cambio al estar en contacto directo con los componentes volátiles de la hoja de guayaba. Un estudio realizado en la Universidad de los Llanos, Vereda Barcelona en la Escuela de Ingeniería en Ciencias Agrícolas es referente a la evaluación del hidrolato del mastrato (Hyptis atrorubens) donde demostró que si hay componentes químicos del aceite esencial en el hidrolato cambiando su pH pero su componentes químicos tenían menor porcentaje. Para los resultados de la desviación estándar y varianza obtenida de cada tiempo de extracción, se observó que los pH obtenidos con la menor dispersión entre las repeticiones son en el tiempo de los 240 minutos.

En los resultados de la tabla XXII se muestra el análisis de varianza de un factor para el pH del hidrolato de hojas de guayaba, donde se determinó que no existe diferencia significativa en función de los tiempos de extracción con una confianza del 95 % a nivel laboratorio. Los aceites esenciales de la hoja de guayaba al someterse a la cromatografía gaseosa con acoplamiento a espectrometría de masas (GC/MS), se le detectó una gran cantidad de compuestos químicos y se seleccionaron solo sus componentes mayoritarios de cada tiempo de extracción.

Los componentes mayoritarios que se encuentran en la tabla XXXIII fueron obtenidos en el tiempo de extracción de 60 min por un análisis químico de cromatografía gaseosa con acoplamiento a espectrometría de masas (GC/MS). El componente mayoritario para el aceite esencial fue el β-cariofileno con un porcentaje de 32,47 % en un tiempo de retención de 33,056 min. Este compuesto en su estructura posee un ciclobutano, además es de la familia de

los terpenos. El óxido de cariofileno es el segundo componente mayoritario con un porcentaje de 14,26 % en un tiempo de retención de 46,06 min. El α -cariofileno tuvo un porcentaje de 5,23 % en un tiempo de retención de 35,85 min. Todos estos compuestos son de la familia de los carifilenos.

Los componentes mayoritarios que se encuentran en la tabla XXXIV fueron obtenidos en el tiempo de extracción de 120 min por un análisis químico de cromatografía gaseosa con acoplamiento a espectrometría de masas (GC/MS). El componente mayoritario para el aceite esencial fue el β -cariofileno con un porcentaje de 33,84 % en un tiempo de retención de 33,051 min. Al igual que en el tiempo de extracción de 60 min también aparece el óxido de cariofileno como el segundo componente mayoritario con un porcentaje de 17,02 % en un tiempo de retención de 46,86 min. El α -cariofileno tuvo un porcentaje de 5,34 % en un tiempo de retención de 35,73 min. Son pocos los cambios de los resultados obtenidos con el tiempo de extracción anterior, pero si tienen un aumento en sus valores.

Para el tiempo de extracción de los 240 minutos se pueden observar que los componentes mayoritarios que se encuentran en la tabla XXXV del aceite esencial tienen valores mayores como el β-cariofileno con un porcentaje de 40,26 % en un tiempo de retención de 33,051 min. También aparece el óxido de cariofileno como el segundo componente mayoritario con un porcentaje de 15,35 % en un tiempo de retención de 46,86 min. El α-cariofileno tuvo un porcentaje de 5,36 % en un tiempo de retención de 35,61 min. Con los valores de cada componente se observa que si tienen un aumento en sus valores. La combinación cariofilenos de los mencionados tienen propiedades antinflamatorias, analgésicos, alivian el estrés y además son el responsable de dar un sabor fuerte al aceite esencial.

CONCLUSIONES

- 1. El rendimiento extractivo óptimo para el aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine), fue en el tiempo de los 240 minutos debido a la obtención de un rendimiento con un valor de 0,1317±0,0223 % y sus componentes como el β-cariofileno con 40,26 % el óxido de cariofileno con 15,35 % y el α-cariofileno con 5,36 % en porcentajes de área obtenidos de la cromatografía de gases con acoplamiento de espectrometría de masas GC-MS. Estos tienen propiedades antinflamatorias, analgésicos, alivian el estrés y además son el responsable de dar un sabor fuerte al aceite esencial.
- 2. La densidad del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine), fue disminuyendo de 0,9724±0,0016 g/mL en el tiempo de 60 minutos a un valor de 0,9255±0,0251 g/mL en los 240 minutos. Esto es debido a que al estar más tiempo en el proceso de extracción este iba arrastrando nuevos componentes químicos a porcentajes aún mayores para el aceite esencial, provocando cambios significativos a su estructura y densidad.
- 3. El índice de refracción del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine), en el tiempo de los 240 minutos presenta un resultado de 1,5091±0,0015 y es un valor alto a comparación de los otros tiempos evaluados en el proceso de hidrodestilación a nivel laboratorio.

- 4. El rango obtenido del pH fue de 5,50±0,50 en el tiempo de 60 minutos a uno de 4,70±0,57 a los 240 minutos el valor tiende a ser de carácter ácido y es debido a que en su estructura tiene componentes químicos como los son los ácidos carboxílicos, metabolitos ácidos, ácidos orgánicos entre otros y que al estar en contacto en todo el proceso de extracción ellos pueden haberse disociado y provocar la acidez en el aceite esencial.
- 5. No existe una variación significativa en el pH del hidrolato obtenido de los 3 tiempos de extracción (60, 120 y 240 min) utilizando el aparato neoclevenger para realizar la hidrodestilación a nivel laboratorio. Pero referente al agua desmineralizada utilizada en el proceso se presenta un cambio al estar en contacto directo con los componentes volátiles de la hoja de guayaba.

RECOMENDACIONES

- Realizar un estudio para la determinación del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine), en función de diferentes tiempos de extracción a nivel planta piloto.
- Analizar la determinación del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine), en función de diferentes procedencias a nivel laboratorio.
- Determinar la evaluación y extracción del aceite esencial de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine), en función del tallo para distintas procedencias a nivel laboratorio.
- Realizar un estudio para la aplicación del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine), en la elaboración de ungüentos antinflamatorios.
- Determinar la evaluación y extracción del aceite esencial de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine), en función de los pétalos de la flor para distintos tiempos de extracción a nivel laboratorio.
- 6. Implementar un estudio para la evaluación y extracción del aceite esencial de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine), en función de las hojas para distintos tiempos de extracción y procedencias a nivel laboratorio y nivel industrial.

BIBLIOGRAFÍA

- ARIANA. Cultivo de guayaba, siembra, fertilización, recolección y fruta.
 [en línea]. https://encolombia.com/economia/agroindustria/cultivo/cultivodeguayaba/. [Consulta: 6 de octubre de 2018].
- ARIAS, Tatiana; FLORES, Andrea. Evaluación de la actividad antihelmíntica in vitro de aceites esenciales de tres plantas presentes en la estación biológica Kutukú: Erungium foetidum L. (culantrillo), Psidium Guajaba L. (Guayaba), Ocotea quixos (Lam), Kosterm (Ishpingo). Perú: Universidad Politécnica Salesiana, 2019. 115 p.
- CORRALES, Enrique., REYES, José; PIÑA, Rafael. Plantas medicinales de interés estomatológico. Revista Científica del Órgano Científico Estudiantil de Ciencias Médicas de Cuba, 2014. 98 p.
- 4. EGE, Seyhan. *Química orgánica: estructura y reactividad.* Reverte, 1998. 728 p. ISBN 9788429170641.
- 5. ESPINA, Stephanny Michelle. Evaluación del rendimiento extractivo y caracterización fisicoquímica del aceite esencial de cardamomo (Elettaria Cardamomum I. Matton) de primera, segunda y tercera calidad mediante el método de hidrodestilación a escala

- *laboratorio*. Trabajo de Graduación de Ing. Química. Facultad de Ingeniería, Universidad de San Carlos de Guatemala, 2014. 257 p.
- Figmay. Extractor a escala laboratorio y a nivel industrial. [en línea].
 https://figmay.com/extractor-de-aceites-esenciales/. [Consulta: 6 de octubre de 2018].
- GRANADOS, Clemente. YÁÑEZ, Xiomara; ACEVEDO, Diofanor; Evaluación de la Actividad antioxidante del aceite esencial foliar de Myrcianthes leucoxyla de Norte de Santander (Colombia). Artículo Científico, 2013. 6 p.
- Kuka Jardinería. Hojas y frutos de la guayaba (Psidium Guajaba L.). [en línea]. https://www.jardineriakuka.com/frutales-tropicales/9793-guayaba-roja.html. [Consulta: 6 de octubre de 2018].
- LLORENS MOLINA, Juan Antonio. Factores de variabilidad en la composición química de los aceites esenciales. [en línea]. http://hdl.handle.net/10251/65394. [Consulta: 6 de febrero de 2020].
- 10. MONTERROSO ALONZO, Wagner Beethoven. Evaluación del rendimiento extractivo, rendimiento volumétrico y contenido de pineno del aceite esencial de las hojas de ciprés (Cupressus Lusitánica Mill) en base a tres niveles altitudinales obtenido mediante el método de hidrodestilación a escala laboratorio. Trabajo de graduación de Ing. Química. Facultad de Ingeniería, Universidad de San Carlos de Guatemala, 2013. 202 p.

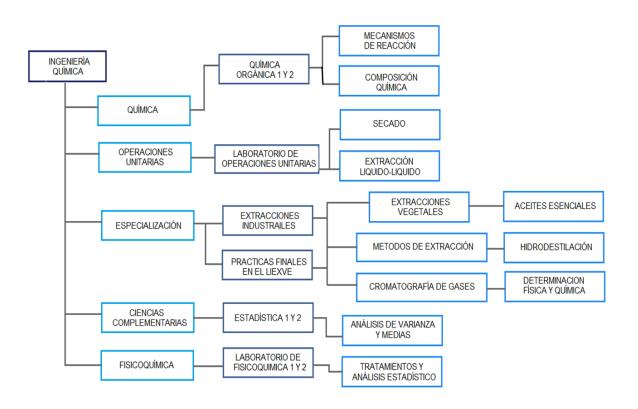
- 11. MUÑOZ, María del Carmen. Extracción y caracterización del aceite esencial de orégano a escala laboratorio. Trabajo de graduación de la Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas de México D.F., 1999. 69 p.
- 12. Pyramid Industries. Equipo de extracción Neoclevenger. [en línea]. http://pyramidlaboratoryglassware.com/product/clevengar-apparatus/. [Consulta: 6 de octubre de 2018].
- 13. REYES BARRERA, Ruth Emilsa. Extracción de aceite esencial de la semilla de Ambrette (Hibiscus Abelmoschus, Linn) por medio de éter etílico, variando el tiempo de agitación y la cantidad de semilla molida a un volumen constante de 100 ml. Trabajo de graduación de Ing. Química. Facultad de Ingeniería, Universidad de San Carlos de Guatemala, 1996. 106 p.
- 14. RODRÍGUEZ, Edwin., ÁRIAS, Anderson., VÄSQUEZ, Eva; MARTÍNEZ, Jairo. Rendimiento y capacidad antioxidante de extractos de Rosmarinus Officinalis, Salvia Officinalis y Psidium Guajaba obtenidos con CO2 supercrítico. Artículo Científico de la Universidad Industrial de Santander Colombia: 2012. 11 p.
- 15. RODRÍGUEZ, Rafael., LAFOURCADE, Ariadna; Pérez, Liana. *Evaluación de hojas de Psidium Guajaba L.* Artículo Científico del Departamento de Farmacia de la Universidad de Oriente, Cuba, 2013. 7 p.
- 16. SARAVIA, Edwin José. Evaluación del rendimiento extractivo, contenido de α-pineno y tiempo óptimo de extracción del aceite esencial de

ciprés (Cupressus Lusitánica Mill.) obtenido de hojas, ramillas y frutos mediante el método de hidrodestilación a nivel laboratorio. Trabajo de graduación de Ing. Química. Facultad de Ingeniería, Universidad de San Carlos de Guatemala, 2013. 314 p.

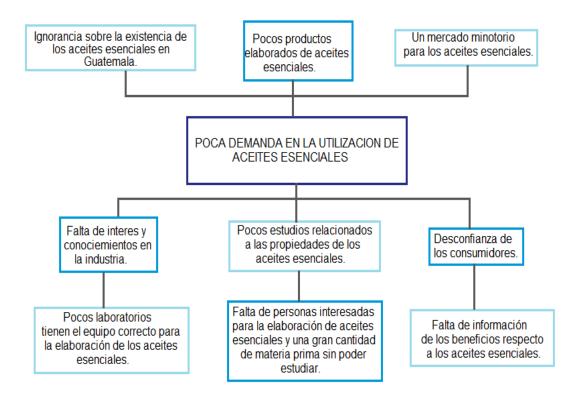
- 17. Scielo. Perú composición química de aceites esenciales de 10 plantas aromáticas peruanas con tiempo de extracción y abundancia relativa. [en línea]. http://www.scielo.org.pe/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1810-634X2015000200002. [Consulta: 6 de octubre de 2018].
- 19. VÁSQUEZ, Oscar., ALVA, Alenguer; MARREROS, Juan. Extracción y caracterización del aceite esencial de jengibre (Zingiber Officinale). Revista Amazónica de Investigación Alimentaria de la Facultad de Ingeniera en Industrias Alimentarias, Perú, 2001. 5 p.

APÉNDICES

Apéndice 1. Requisitos académicos



Apéndice 2. Árbol de problemas



Apéndice 3. Hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) proveniente de San Luis Jilotepeque, Jalapa



Apéndice 4. Proceso de preparación de la materia prima a escala laboratorio para la obtención de aceite esencial





Continuación del apéndice 4.



Fuente: elaboración propia.

Apéndice 5. Extracción de aceite esencial de hojas de guayaba

(Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) con el método de

Hidrodestilación a escala laboratorio

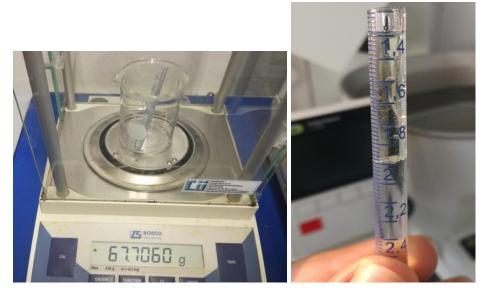


Apéndice 6. Aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) extraído a escala laboratorio



Fuente: elaboración propia.

Apéndice 7. Medición de masa y volumen del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) extraído a escala laboratorio



Apéndice 8. Medición de PH del aceite esencial de hojas de Guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) extraído a escala laboratorio





Apéndice 9. Rendimiento extractivo del aceite esencial de hojas frescas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Tiempo de Extracción (min)	Rendimiento (%)	±σ	Varianza
60	0,0533	0,0044	1,93E-05
120	0,0665	0,0130	1,69E-04
240	0,1317	0,0223	4,99E-04

Apéndice 10. Densidad del aceite esencial de hojas de guayaba

(Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel

laboratorio

Tiempo de extracción (min)	Densidad (g/mL)	±σ	Varianza
60	0.9724	0.0016	2.70E-06
120	0.9613	0.0033	1.05E-05
240	0.9255	0.0251	6.31E-05

Apéndice 11. **Índice de refracción del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio**

Tiempo de extracción (min)	Índice de refracción (adimensional)	±σ	Varianza
60	1,5040	0,0012	1,49E-06
120	1,5052	0,0009	8,23E-07
240	1,5091	0,0015	2,30E-06

Apéndice 12. pH del aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

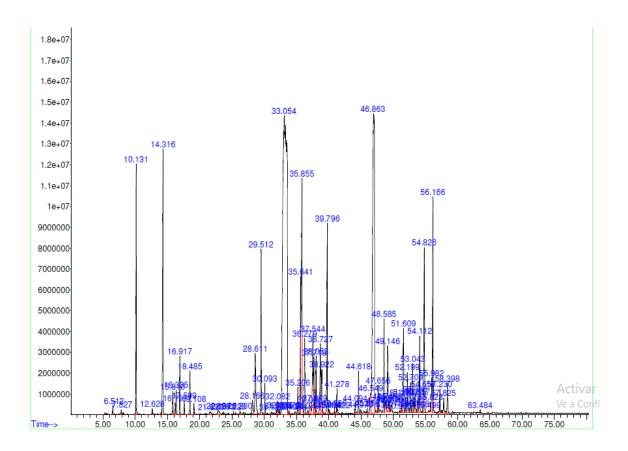
Tiempo de extracción (min)	рН	±σ	Varianza
60	5,50	0,50	0,30
120	5,30	0,58	0,33
240	4,70	0,57	0,25

Apéndice 13. pH del hidrolato obtenido de la extracción de aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) a nivel laboratorio

Tiempo de extracción (min)	рН	±σ	Varianza
60	5,60	0,58	0,33
120	5,60	0,58	0,33
240	5,80	0,29	0,08

ANEXOS

Anexo 1. Cromatografía de gases con acoplamiento a espectrometría de masas GC-MS para el aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) extraído a escala laboratorio con duración de 60 minutos



```
LIQA
                                                      Library Search Report
  Data Path : C:\msdchem\1\DATA\Cursos\AIA\AIA2020\
Data File : 200212-000003.D
  Title
              :
: 12 Feb 2020 13:12
  Acq On
  Operator : AdeM
  Sample : Aceite esencial hoja guayaba
Misc : R3 lhr
ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1
  Search Libraries: C:\Database\NISTO5a.L
                                                                  Minimum Quality: 0
  Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: ChemStation Integrator - autointA.e
       6.510 0.07 C:\Database\NIST05a.L
                                                                    212 000067-64-1 91
211 000067-64-1 91
                    Acetone
                    Acetone
                    Acetone
                                                                    210 000067-64-1 90
      7.829 0.07 C:\Database\NIST05a.L
                    Ethyl alcohol
Ethyl alcohol
                                                                   93 000064-17-5 90
94 000064-17-5 86
95 000064-17-5 64
                    Ethyl alcohol
  3 10.131 2.65 C:\Database\NIST05a.L
                                                                15186 007785-70-8 96
                    1R-.alpha.-Pinene
1R-.alpha.-Pinene
                                                                 15188 007785-70-8 95
15178 000080-56-8 95
                     .alpha.-Pinene
  4 12.628 0.07 C:\Database\NIST05a.L
                                                                 15188 007785-70-8 94
15175 000127-91-3 94
                     1R-.alpha.-Pinene
                    .beta.-Pinene
                     .beta.-Pinene
                                                                 15171 000127-91-3 94
  5 14.315 4.76 C:\Database\NIST05a.L
                     .beta.-Pinene
                                                                 15176 000127-91-3 91
15177 000123-35-3 91
                    .beta.-Myrcane 15177 000123-35-3 91
Bicyclo[3.1.0]hex-2-ene, 4-methyl- 15374 028634-89-1 86
                     1- (1-methylethyl) -
  6 15.807 0.27 C:\Database\NIST05a.L
Cyclobexene, 1-methyl-4-(1-methyle 15365 005989-54-8 96
                    thenyl)-, (S)-
D-Limonene
                                                                 15162 005989-27-5 93
15154 000138-86-3 91
                     Limonene
  7 16.189 0.13 C:\Database\NIST05a.L
2-Ethyl-3-vinyloxirane
                                                                  3134 034485-78-4 72
3066 000505-57-7 62
                    2-Bexenal
                    1-Propyne, 3-(2-bromoethoxy)-
                                                                 30986 018668-74-1 50
  8 16.335 0.29 C:\Database\NIST05a.L
                                                                 25507 000470-82-6 97
25509 000470-82-6 96
                    Eucalvotol
                    Eucalyptol
                                                                 25508 000470-82-6 95
                    Eucalyptol
  9 16.917 0.63 C:\Database\NIST05a.L
                    1, 3, 6-Octatriene, 3, 7-dimethyl-, ( 15285 003779-61-1 97
                    Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6,6-tr 15376 002437-95-8 94
                     imethyl-, (.+/-.)-
1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-, ( 15282 003779-61-1 90
 10 17.600 0.16 C:\Database\NIST05a.L
                    1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-, ( 15284 003338-55-4 98
                    Z)-
1,3,7-Octatriene, 3,7-dimethyl-
2-Carono 15157 013466-78-9 93
11 18.487 0.48 C:\Database\NIST05a.L
ACEITES ESE... WAX SCAN 2.M Thu Feb 13 13:30:15 2020
```

₽k∉	RT	Area% Library/ID	Ref	CAS# Qua	1
		Benzene, 1-methyl-4-(1-methyle	thy1 14423	000099-87-6 97	
		Benzene, 1-methyl-3-(1-methyle	thy1 14424	000535-77-3 96	
		Benzene, 1-methy1-2-(1-methyle)-	thy1 14419	000527-84-4 95	
12	19.110	0.14 C:\Database\NIST05a.L	bwlo 15330	000586-62-9 97	
		Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-met thylidene)-	-		
		(+)-4-Carene Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-met thylidene)-		029050-33-7 97 000586-62-9 97	
13	21.639	0.10 C:\Database\NIST05a.L			
		2H-Pyran-2-one, tetrahydro-5,6 ethyl-, trans-	-dim 11949	024405-16-1 78	
		1-Haxanol 1-Haxanol		000111-27-3 74	
1.4	22.894		4212		
14	22.094	3-Hexen-1-01		000544-12-7 95	
		3-Hexen-1-ol 3-Hexen-1-ol, (Z)-		000544-12-7 95 000928-96-1 92	
15	23.672				
	23.072	2-Penten-1-ol, 4-methyl-		005362-55-0 53	
		Dihydromyrcene Bicyclo[7.1.0]decane		002436-90-0 50 000286-76-0 37	
16	25.228	0.04 C:\Database\NIST05a.L			
		Benzene, 1-methyl-4-(1-methyle	then 13649	001195-32-0 98	
		o-Isopropenyltoluene		007399-49-7 97	
		Benzene, 1-methy1-4-(1-methyle y1)-	Cnen 13650	001195-32-0 94	
17	26.228	0.06 C:\Database\NIST05a.L Butanoic acid, 3-hexenyl ester	, (E 36169	053398-84-8 91	
)- Butanoic acid, 3-hexenyl ester		016491-36-4 91	
)-			
		Butanoic acid, 3-hexenyl ester)-	, (Z 36180	016491-36-4 83	
18	28.166	0.38 C:\Database\NIST05a.L	FA7741		
		Ylangene Ylangene		014912-44-8 99 014912-44-8 70	
		Copaene	59779	003856-25-5 58	
19	28.612	1.63 C:\Database\NIST05a.L Copaene	50700	003856-25-5 97	
		.alphaCubebene	59823	017699-14-8 97	
		.alphaCubebene	59824	017699-14-8 96	
20	29.512	2.03 C:\Database\NISTO5a.L 1,6-Octadien-3-o1, 3,7-dimethy	1- 25643	000078-70-6 64	
ACEI	TES ESE	WAX SCAN 2.M Thu Feb 13 13:30:15	2020		

Pa

%#	RT	Areas	Library/ID	Ref#	CAS# ()ual
			1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-,	107591	007149-26-0	58
			1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-, acetate	54271	000115-95-7	58
21	30.095		C:\Database\NIST05a.L 1,6-Octadien-3-o1, 3,7-dimethy1-, 2-aminobenzoate	107591	007149-26-0	91
			1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-,	54267	000115-95-7	86
			1, 3, 7-Octatriene, 3, 7-dimethyl-	15240	000502-99-8	83
22	31.123		C:\Database\NIST05a.L Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct ahydro-4a,8-dimethy1-2-(1-methy1et heny1)-, [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8 a.beta.)]-	60054	000473-13-2	78
			1,4-Methano-1H-indene, octahydro-4 -methyl-8-methylene-7-(1-methyleth y1)-, [1S-(1.alpha.,3a.beta.,4.alp ha.,7.alpha.,7a.beta.)]-		003650-28-0	68
			IB-Cvclobrob/elazulene. decahvdro- 1, 1, 7-trimethyl-4-methylene-, [laR -(la.alpha., 4a.beta., 7.alpha., 7a.b eta., 7b.alpha.)]-		025246-27-9	50
23	31.910		C:\Database\NIST05a.L 1,6,10-Dodecatriene, 7,11-dimethy1 -3-methylene-	59887	077129-48-7	50
			1-Pentene, 5-bromo- trans-1,4-Bexadiene		001119-51-3 007319-00-8	
24	32.082		C:\Database\NIST05a.L 3-Cyclohexen-1-o1, 4-methy1-1-(1-m athylethy1)-	25751	000562-74-3	89
			3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-m ethylethyl)-	25750	000562-74-3	76
			3-Cyclohexen-1-o1, 4-methy1-1-(1-m ethylethy1)-	25745	000562-74-3	64
25	32.378		C:\Database\NIST05a.L trans-ZalphaBisabolene epoxide Acetic acid, 10,11-dihydroxy-3,7,1			
			1-trimethyl-dodeca-2,6-dienyl este 3-Undecen-1-yne, (E)-	22957	074744-33-5	16
26	33.056		C:\Database\NISTO5a.L Caryophyllene Caryophyllene		000087-44-5 000087-44-5	
			Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11 -trimethy1-8-methylene-	59912	013877-93-5	91
27	33.670		C:\Database\NIST05a.L 1B-Cycloprop[e]azulene, decahydro- 1,1,7-trimethy1-4-methylene-	59928	072747-25-2	96
			1H-Cycloprop[e]azulene, decahydro- 1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1aR	60076	025246-27-9	93
CEI	TES ESE.	WAX	SCAN 2.M Thu Feb 13 13:30:15 2020			

後數	RT	Areas	Library/ID	Ref#	CAS#	Qua1
		6	-(la.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.b eta7b.alpha.)1- Seychellene	59790	020085-93-	2 90
28	33.906	1 1 6	C:\Database\NIST05a.L Naphthalene, 1,2,3,5,6,7,8,8a-octa hydro-1,8a-dimethy1-7-(1-methyleth eny1)-, [1R-(1.alpha.,7.beta.,8a.a lpha.)]-	60047	004630-07-	3 89
			Aromadendrene 1B-Cycloprop[e]azulene, decahydro- 1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1aR -(1a.alpha.,4a.alpha.,7.alpha.,7a. beta.,7b.alpha.)]-		109119-91- 000489-39-	
29	34.843		C:\Database\NIST05a.L 1B-Cycloprop[e]azulene, decahydro- 1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1aR -(1a.alpha.,4a.alpha.,7.alpha.,7a. beta.,7b.alpha.)1-	60078	000489-39-	4 95
				60076	025246-27-	9 93
			Aromadendrene	59796	109119-91-	7 89
30	35.207	1	C:\Database\NIST05a.L Furan, 2,3-dihydro-3-methy1- 2-Pentene, 3-methy1-, (Z)- 2,6-Octadienal, 3,7-dimethy1-	1483	001708-27- 000922-62- 005392-40-	3 53
31	35.639		C:\Database\NIST05a.L Isocaryophillene cisalphaBisabolene .alphaCaryophyllene	59850	1000140-07 029837-07- 006753-98-	8 64
32	35.853		C:\Database\NIST05a.L		006753-98-	c 00
			.alphaCaryophyllene 1.4.7Cvcloundecatriene, 1,5,9,9- betramethyl-, Z.Z.Z-		1000062-61	
			.alphaCaryophyllene	59849	006753-98-	6 96
33	36.281	1	C:\Database\NIST05a.L Naphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-bexahyd ro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-	59954	000483-75-	0 99
		1	Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct ahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-m athylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha., 8a.alpha.)-	60065	030021-74-	0 99
		1	Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct ahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-m athylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha., 8a.alpha.)-	60068	030021-74-	0 98
34	36.740		C:\Database\NIST05a.L 1,6,10-Dodecatriene, 7,11-dimethy1 -3-methylene-, (Z)-	59896	028973-97-	9 83
CEL	TES ESE.	WAX	SCAN 2.M Thu Feb 13 13:30:15 2020			

体制	RT	Areas	Library/ID		Ref#	CAS#	Qua1
		-3 1,	6,10-Dodecatriene, 7 -methylene (Z)- 6,10-Dodecatriene, 7 -methylene-	_		028973-97- 077129-48-	
35	37.081	Eu ci 18	:\Database\NIST05a.L desma-4(14), 11-diene salphaBisabolene -Cycloprop[e]azulene 1,7-trimethyl-4-meth		59850	1000152-04 029837-07- 072747-25-	8 76
36	37.545	Se 1E 1, -(:\Database\NIST05a.L ychellene -Cycloprop[e]azulene 1,7-trimethyl-4-meth la.alpha.,4a.beta.,7 a.,7b.alpha.)]-	ylene-, [laR	60076	020085-93- 025246-27-	9 93
		Eu	desma-4(14), 11-diene		59851	1000152-04	-3 91
37	37.718	2-	:\Database\NIST05a.L Isopropenyl-4a, 8-dim 4a, 5, 6, 7-octahydrona	ethy1-1,2,3,	59939	1000192-43	-5 78
		Na ah he	phthalene, 1, 2, 3, 4, 4; lydro-4a, 8-dimethyl-2; nyl)-, [2R-(2.alpha.) beta.) -	a, 5, 6, 8a-oct -(1-methylet	60054	000473-13-	2 76
		2-	Isopropenyl-4a,8-dim 4a,5,6,8a-octahydron		59944	1000193-57	-0 64
38	37.877	1,	:\Database\NIST05a.L 6,10-Dodecatriene, 7 -methylene-, (E)-	,11-dimethyl	59894	018794-84-	8 89
		1,	6, 10-Dodecatriene, 7	,11-dimethyl	59887	077129-48-	7 68
		1,	6,10-Dodecatriene, 7 -methylene-, (E)-	,11-dimethy1	59899	018794-84-	8 62
39	38.055		:\Database\NIST05a.L				
		Cy (1	etaGuaiene clohexene, 6-ethenyl methylethyl)-3-(1-m e)-, (S)-			000088-84- 005951-67-	
		Na hy en	phthalene, 1,2,3,5,6 dro-1,8a-dimethyl-7- yl)-, [1R-(1.alpha.,	(1-methyleth	60046	004630-07-	3 89
40	38.728	Na o-	:\Database\NIST05a.L phthalene, 1,2,3,5,6 4,7-dimethyl-1-(1-me 15-cis)-	,8a-hexahydr	59978	000483-76-	1 95
		Na o-	phthalene, 1,2,3,5,6, 4,7-dimethyl-1-(1-me 1S-cis)-	•	59980	000483-76-	1 95
		Na o-	phthalene, 1,2,3,5,6 4,7-dimethyl-1-(1-me 15-cis)-		59979	000483-76-	1 93
CEI	TES ESE.	WAX S	CAN 2.M Thu Feb 13 1	3:30:15 2020			

後數	RT	Areas	Library/ID	Ref#	CAS#	Qua1
41	38.924	Na ro Na ah et 8a Na ah et	:\Database\NISTO5a.L phthalene, 1, 2, 4a, 5, 6, 8a-hexahyd -4, 7-dimethyl-1-(1-methylethyl)- phthalene, 1, 2, 3, 4, 4a, 5, 6, 8a-oct lydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-m hylethyl)-, (1.alpha., 4a.alpha., alpha.)- phthalene, 1, 2, 3, 4, 4a, 5, 6, 8a-oct lydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-m hylethyl)-, (1.alpha., 4a.alpha., lydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-m lydro-1-methyl-4-methylene-1-(1-m lydro-1-methyl-1-4-methylene-1-(1-m lydro-1-methyl-1-4-m	60070	000483-75-0 030021-74-0 030021-74-0	97
42	39.797	Na ah hy Na	:\Database\NIST05a.L uphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct uydro-4a,8-dimethyl-2-(1-methylet ulidene)-, (4aR-trans)- uphthalene, decahydro-4a-methyl-1		006813-21-4 000515-17-3	
		Na ah	methylene-7-(1-methylethylidene)- (4aR-trans)- uphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct uvdro-4a.8-dimethyl-2-(1-methylet vlidene)-, (4aR-trans)-	60005	006813-21-4	95
43	39.993	Na ro .a Na ro	C:\Database\NIST05a.L uphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahyd 0-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)- (1.alpha.,4a.alpha.,8a.alpha.)- ulphaMuurolene uphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahyd 0-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)- 1R-(1.alpha.,4a.alpha.,8a.alpha.	59829	031983-22-9 010208-80-7 017627-24-6	91
44	40.111	4- Sc	:\Database\NIST05a.L Methyl-1,5-Beptadiene qualene 4-Hexadiene, 3,3,5-trimethyl-	173555	000998-94-7 007683-64-9 074753-00-7	59
45	40.884	He -t He -t 2-	<pre>C:\Database\NIST05a.L inzenemethano1, .alpha.,.alpha.,4 rimethy1- nzenemethano1, .alpha.,.alpha.,4 rimethy1- Bexano1, 3,3,5-trimethy1-2-(3-me nylpheny1)-</pre>	22878	001197-01-9 001197-01-9 274266-33-0	50
46	41.280	Na 6- -0 Na 6.	:\Database\NIST05a.L phthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-1, dimethy1-4-(1-methylethy1)-, (1S cis)- phthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-1, 8-trimethy1- dan, 1,1,6,7-tetramethy1-	39069	000483-77-2 030316-36-0 016204-58-3	86
47	41.421	0.05 0	:\Database\NIST05a.L ammaElemene		030824-67-0	
CET	TES ESE.	WAX S	CAN 2.M Thu Feb 13 13:30:15 2020			

Pk#	RT	Areas	Library/ID	Ref#	CAS# Qual	
			gammaElemene gammaElemene		030824-67-0 74 339154-91-5 74	
48	44.095	N H	C:\Database\NIST05a.L alphaCalacorene aphthalene, 1,2-dihydro-1,1,6-tri ethyl- uinoline, 4,8-dimethyl-	37894	1000293-02-3 95 030364-38-6 72 013362-80-6 49	
49	44.618	t c t	C:\Database\NIST05a.L (yclohexene, 3-methyl-6-(1-methyle henyl)-, (3R-trans)- (yclohexene, 3-methyl-6-(1-methyle henyl)-, (3R-trans)- (yclohexene, 5-methyl-3-(1-methyle	15389	005113-87-1 64	
		t	heny1)-, trans-(-)-	15382	056816-08-1 60	
50	44.969	2 T	C:\Database\NIST05a.L -Butenal, 2-ethenyl- ricyclo[4.3.1.0(2,5)]decane ongipinene epoxide	15223	020521-42-0 38 042210-02-6 38 142792-93-6 38	
51	45.956	1 1 h	C:\Database\NIST05a.L H-Cycloprop[e]azulene, decahydro- ,1,4,7-tetramethyl-, [laR-(la.alp a.,4.beta.,4a.beta.,7.beta.,7a.be a.,7b.alpha.) -	61573	028580-43-0 86	
		1 1 B	H-3a,7-Methanoazulene, octahydro- ,4,9,9-tetramethyl- dcyclo[5.1.0]octane, 8-(1-methyle hylidene)-		019078-35-4 70 054166-47-1 60	
52	46.547	0	C:\Database\NIST05a.L aryophyllene oxide aryophyllene oxide -Tetradecen-5-yne, (E)-	71353	001139-30-6 91 001139-30-6 59 074744-44-8 49	
53	46.865	0	C:\Database\NIST05a.L arvoohvllene oxide arvoohvllene oxide yclohexene, 3-methyl-6-(1-methyle henyl)-, (3R-trans)-	71350	001139-30-6 91 001139-30-6 91 005113-87-1 50	
54	47.534	1	C:\Database\NIST05a.L ,3-Bis-(2-cyclopropy1,2-methylcyc opropy1)-but-2-en-1-one B-3a.7-Methanoazulene. octahydro-		1000222-08-6 86 019078-35-4 80	
		1	, 4, 9, 9-tetramethyl- ongipinene epoxide		142792-93-6 53	
55	47.657	1 1 N	C:\Database\NIST05a.L ,6,10-Dodecatrien-3-o1, 3,7,11-tr methy1- erolidol 2 ,6,10-Dodecatrien-3-o1, 3,7,11-tr methy1-, [S-(Z)]-	72901	007212-44-4 91 1000285-43-6 91 000142-50-7 91	

ACEITES ESE... WAX SCAN 2.M Thu Feb 13 13:30:15 2020

k#	RT	Areas	Library/ID	Ref#	CAS#	Qua1
56	47.752	1.	C:\Database\NIST05a.L 3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-, (15283	003338-55-4	91
		Z	3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-, ()- 3,7-Octatriene, 3,7-dimethyl-		0003338-55-4	
57	48.585	1.20 (1:	C:\Database\NIST05a.L 2-Oxabicyclo[9.1.0]dodeca-3,7-die a, 1,5,5,8-tetramethyl-, [1R-(1R* 3E,7E,11R*)]-	71453	019888-34-7	7 74
		2-	-Menth-8-ene -Cyclohexen-1-one, 4-(1-methyleth 1)-		015193-25-6 000500-02-7	
58	48.749	4-	C:\Database\NIST05a.L -Hydroxypyridine 1-oxide thylphosphonic acid, dipropyl est		006890-62-6 006163-76-4	
		3,	4-Dimethyl-3-pyrrolin-2-one	5960	004030-22-2	30
59	49.144	B	C:\Database\NIST05a.L icyclo[4.4.0]dec-1-ene, 2-isoprop	59918	150320-52-8	84
		N:	1-5-methyl-9-methylene- aphthalene, 1,2,3,4,4a,7-hexahydr -1.6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-	59947	016728-99-7	7 64
		N:	aphthalene, 1,2,3,4,4a,7-hexahydr -1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-	59946	016728-99-7	/ 55
60	49.304	1,	<pre>C:\Database\NIST05a.L B-Cycloprop[e]azulene, decahydro- .1,7-trimethyl-4-methylene-, [laR (la.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.b ta.,7b.alpha.)1-</pre>	60075	025246-27-9	90
		11	H-Cycloprop[e]azulene, decahydro-	59928	072747-25-2	68
		-1	aphthalene, decahydro-4a-methyl-1 methylene-7-(1-methylethenyl)-, [aR-(4a.alpha.,7.alpha.,8a.beta.)]	60021	017066-67-0) 68
61	49.404	0: 1: 2- 0:	C:\Database\NIST05a.L yclopropanecarboxylic acid, 2,2-d methyl-3-(2-methyl-1-propenyl)-, -methyl-4-oxo-3-(2-pentenyl)-2-cy lopenten-1-yl ester, [1R-[1.alpha [S*(Z)],3.beta.]]-	142588	004466-14-2	? 72
		1	4,4-Trimethy1-3-(3-oxo-but-1-eny)-bicyclo[4.1.0]heptan-2-one	71245	1000190-30-	8 64
			-Cyclopentene, 4-(hydroxymethyl)- 1,2,3-tetramethyl-	25806	1000162-89-	-5 64
62	49.677	La Na	C:\Database\NIST05a.L edo1 aphthalene, 2,3,4,4a,5,6-hexahydr -1.4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-		000577-27-5 000473-14-3	
		N	aphthalene, decahydro-4a-methyl-1 methylene-7-(1-methylethenyl)-, [60021	017066-67-0	83
CEI	TES ESE	WAX	SCAN 2.M Thu Feb 13 13:30:15 2020			

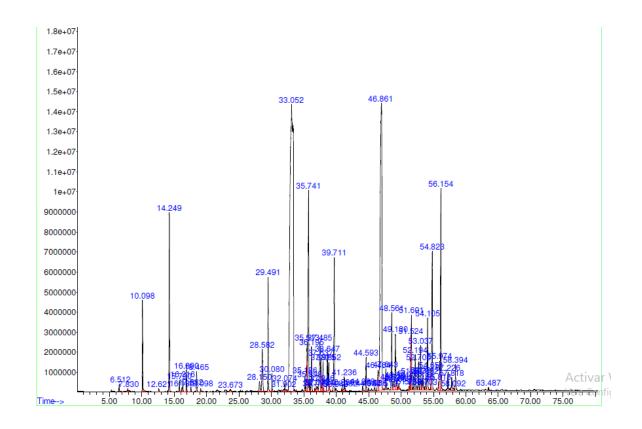
₽k#	RT	Areas	Library/ID	Ref#	CAS#	Qua1
		4aR- (4a	.alpha.,7.alpha.,8a.beta.)]			
63	50.964	Non-7-y 2-Propa nyloxy)	abase\NIST05a.L namide no1, 1-[1-methy1-2-(2-prope athoxy]- ldoxime, 3-methy1-, syn-	39521	1000187-49- 055956-25-7 005780-40-5	38
64	51.241	Naphtha ahydro- henyl)- a.beta.			000473-13-2	
		<pre>1, 4-Methanoazulene, decahydro-4, 8, 8-trimethyl-9-methylene-, [1S-(1.a 1pha., 3a. beta., 4.alpha., 8a. beta.)] Ledo1</pre>			000475-20-7	
65	51.373	0.21 C:\Data Bicyclo thvlide:	abase\NIST05a.L [6.1.0]nonane, 9-(1-methyle	32218	056666-90-1	53
		Carvoph Naphtha ahydro-	v11ene oxide lene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct 4a,8-dimethy1-2-(1-methy1et , [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8		001139-30-6 000473-13-2	
66	51.610	1H-Cycl 3, 5, 6, 7 etrameti ha., 7a.:	abase\NIST05a.L opropa[a]naphthalene, la,2, ,7a,7b-octahydro-1,1,7,7a-t hy1-, [laR-(la.alpha.,7.alp alpha.,7b.alpha.)]-	60096	017334-55-3	96
		ahydro- ethyleti 8a.alph Cyclohe:	xene, 6-ethenyl-6-methyl-1- ylethyl)-3-(1-methylethylid		030021-74-0 005951-67-7	
67	51.905		abase\NIST05a.L , 1,2-dimethoxy-4-(1-propen	41491	000093-16-3	95
		Benzene	, 1,2-dimethoxy-4-(2-propen	41487	000093-15-2	93
		y1)- Benzene y1)-	, 1,2-dimethoxy-4-(1-propen	41485	000093-16-3	91
68	52.196	Bicyclo yl-5-me .tauC Naphtha	lene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydr imethyl-1-(1-methylethyl)-,	72906	150320-52-8 005937-11-1 000483-76-1	87
69	52,406		abase\NISTO5a.L			
			.M Thu Feb 13 13:30:15 2020			

Pk#	RT	Areas	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
		1	soaromadendrene epoxide .5-Hexadiene, 2,5-dimethy1-3-meth lene-		1000159-36- 059131-13-	
			ganmaElemene	59808	339154-91-	5 51
70	52.710	4	C:\Database\NIST05a.L alphaCadinol -(Bromomethy1)cyclohexene yclohexene, 3-(bromomethy1)-	39204	000481-34- 034960-41- 034825-93-	3 35
71	53.043	0	C:\Database\NIST05a.L opaene opaene opaene	59778	003856-25- 003856-25- 003856-25-	95
72	53.202	P	C:\Database\NIST05a.L entanoic acid, 5-cyclopropylidene , ethyl ester	34697	1000159-44	-3 43
		В	-Methoxycarbonylpyrazole icyclo[3.1.0]hexan-3-ol, 4-methyl 1-(1-methylethyl)-		015366-34- 000513-23-	
73	53.384	1 8	C:\Database\NIST05a.L ,4-Methanoazulene, decahydro-4,8, -trimethyl-9-methylene-, [1S-(1.a pha.,3a.beta.,4.alpha.,8a.beta.)]	60020	000475-20-	7 60
		1	eychellene H-Cycloprop[e]azulene, decahydro- ,1,7-trimethyl-4-methylene-		020085-93- 072747-25-	
74	53.707	A	C:\Database\NIST05a.L zulene, 1,2,3,3a,4,5,6,7-octahydr -1,4-dimethy1-7-(1-methyletheny1) , [1R-(1.alpha.,3a.beta.,4.alpha. 7.beta.)]-	60066	022567-17-	5 93
		1 1 -	H-Cycloprop[e]azulene, decahydro- ,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1aR (1a.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.b ta7b.alpha.)1-		025246-27-	
			aryophyllene oxide	71353	001139-30-0	5 55
75	53.857	2 5 a	C:\Database\NIST05a.L -Naphthalenemethanol, 1,2,3,4,4a, ,6,8a-octahydroalpha.,.alpha.,4 ,8-tetramethyl-, [2R-(2.alpha.,4a alpha.,8a.beta.) -	73025	000473-16-	5 98
		2 2 7	-Naphthalenemethanol, decahydro lpha.,.alpha.,4a-trimethy1-8-meth lene-, [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8a	73009	000473-15-	4 58
		2 a	beta.)]Naphthalenemethanol, decahydro lpha.,.alpha.,4a-trimethy1-8-meth lene-, [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8a beta.)]-	73010	000473-15	4 58
76	54.111		C:\Database\NIST05a.L alphaCadinol	72908	000481-34-	5 99
ACEI	TES ESE	WAX	SCAN 2.M Thu Feb 13 13:30:15 2020			

Pk#	RT	Areas	Library/ID	Ref#	CAS# Qual
		hydro	-Azulenone, 4,5,6,7,8,8a-hexa -8a-methyl (S)- dene, 1-ethylideneoctahydro-, S-		055103-73-6 41 056324-70-0 38
77	54.657	1H-3a 1, 4, 9	atabase\NIST05a.L ,7-Methanoazulene, octahydro- ,9-tetramethy1- R)-p-Mentha-2,8-diene, 1-hydr		019078-35-4 27 1000292-74-0 25
			omadendrene epoxide	71364	1000159-36-6 25
78	54.826	Pyraz	atabase\NIST05a.L ol-(4H)-one, 1-(4-ethylphenyl ethyl-	58349	107430-31-9 64
		Benze	, 2, 3, 3-He xamethylindane ne, 1-methoxy-2-(1-methyl-2-m enecyclopentyl)-		091324-94-6 52 039877-94-6 47
79	55.499	Napht ahvdr henyl	atabase\NIST05a.L halene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct o-4a.8-dimethv1-2-(1-methv1et)-, [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8	60054	000473-13-2 91
		trans	a.)]- ZalphaBisabolene epoxide ellene		1000131-71-1 83 020085-93-2 83
80	55.822	1, 4, 9 Cyclo Spiro	atabase\NIST05a.L -Decatriene, (Z)- octene, 4-etheny1- \[5.5]undec-2-ene, 3,7,7-trime 11-methylene-, (-)-	15209	1000155-93-2 49 001124-45-4 46 018431-82-8 42
81	55.981	2-Mat	atabase\NIST05a.L hyl-trans-3a,4,7,7a-tetrahydr	15310	1000145-84-2 49
		oinda 1, 5, 5 exene	-Trimethy1-6-methylene-cycloh	15292	000514-95-4 49
			-Octatriene, 2,6-dimethyl-	15244	000673-84-7 46
82	56.167	1H-Ċy 1, 1, 7 -(1a.	atabase\NIST05a.L cloprop[e]azulene, decahydro- -trimethyl-4-methylene-, [laR alpha., 4a. beta., 7.alpha., 7a.b 7b.alpha.)]-		025246-27-9 90
		Seych	ellene enzenediamine, N,N-dimethyl-		020085-93-2 42 000099-98-9 38
83	57.232	1H-Cy 1, 1, 7 -(1a.	atabase\NIST05a.L cloprop[e]azulene, decahydro- -trimethyl-4-methylene-, [laR alpha., 4a.beta., 7.alpha., 7a.b 7b.alpha.)]-		025246-27-9 52
)-1-Buteny1]-4-vinylcyclopent	21927	052886-04-1 50
			,7-Methanoazulene, octahydro- ,9-tetramethy1-	61560	025491-20-7 49
ACEI	TES ESE.	WAX SCAN	2.M Thu Feb 13 13:30:15 2020		

Fuente: Universidad del Valle de Guatemala. Departamento de Ingeniería Bioquímica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia.

Anexo 2. Cromatografía de gases con acoplamiento a espectrometría de masas GC-MS para el aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) extraído a escala laboratorio con duración de 120 min



```
Data Path : C:\msdchem\1\DATA\Cursos\AIA\AIA2020\
Data File : 200212-000004.D
 Title
Acg On
             :
: 12 Feb 2020 14:39
 Operator : AdeM
 Sample : Aceite esencial hoja guayaba
Misc : R3 2hr
ALS Vial : 3 Sample Multiplier: 1
 Search Libraries: C:\Database\NISTO5a.L
                                                                     Minimum Quality: 0
 Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: ChemStation Integrator - autointA.e
      RT Areas
                               Library/ID
                                                                     Ref# CAS# Oual
     6.510 0.08 C:\Database\NIST05a.L
                     Acetone
Acetone
                                                                      212 000067-64-1 91
211 000067-64-1 91
                                                                      210 000067-64-1 90
                     Acetone
     7.829 0.06 C:\Database\NIST05a.L
                     Ethyl alcohol
Ethyl alcohol
                                                                       93 000064-17-5 90
94 000064-17-5 80
                     Ethyl alcohol
                                                                        95 000064-17-5 47
 3 10.099 1.26 C:\Database\NIST05a.L
                     1R-.alpha.-Pinene
                                                                   15188 007785-70-8 97
                     .alpha.-Pinene 15178 000080-56-8 95
Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6,6-tr 15376 002437-95-8 95
                     imathy1-, (.+/-.)-
 4 12.619 0.05 C:\Database\NIST05a.L
                     Bicyclo[3.1.1]heptana, 6,6-dimethy 15390 018172-67-3 95 1-2-methylene-, (15)-1R-,alpha -Dipore
                     1R-.alpha.-Pinene
 5 14.247 3.05 C:\Database\NISTO5a.L
                     .beta.-Pinene
.beta.-Myrcene
                                                                   15174 000127-91-3 91
15180 000123-35-3 59
                     .beta.-Myrcene
                                                                    15179 000123-35-3 52
 6 15.789 0.18 C:\Database\NIST05a.L
                     Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methyle 15365 005989-54-8 96 thenyl)-, (S)-
D-Limonene 15162 005989-27-5 93
                     Limonene
                                                                    15154 000138-86-3 91
 7 16.185 0.06 C:\Database\NIST05a.L
                     Bicyclo[3.1.0]hex-2-ene, 4-methyl- 15374 028634-89-1 70
                     1- (1-methylethyl) -
2-Ethyl-3-vinyloxirane
                                                                   3134 034485-78-4 70
                                                                  15188 007785-70-8 64
                     1R-.alpha.-Pinene
 8 16.317 0.22 C:\Database\NIST05a.L
                                                                   25509 000470-82-6 97
25507 000470-82-6 97
                     Eucalyptol
Eucalyptol
                                                                    25508 000470-82-6 93
                     Eucalyptol
 9 16.890 0.34 C:\Database\NISTO5a.L
1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-, ( 15285 003779-61-1 97
                     Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6,6-tr 15376 002437-95-8 93
                     imethyl-, (.+/-.)-
                     4-Carene
                                                                    15150 1000150-36-1 90
10 17.581 0.08 C:\Database\NIST05a.L
                     8 C:\Database\Nisiosa.L

1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-, ( 15284 003338-55-4 98

Z)-

1,3,7-Octatriene, 3,7-dimethyl-

1,3,7-Octatriene, 3,7-dimethyl-

15243 000502-99-8 93

1,3,7-Octatriene, 3,7-dimethyl-

15240 000502-99-8 93
CEITES ESE...WAX SCAN 2.M Thu Feb 13 13:32:38 2020
```

₽k#	RT	Areas	Library/	ID	Ref#	CAS#	Qua1
11	18.464	Benze	Database\NISTOS	sa.L 4-(1-methylethyl	14423	000099-87-6	5 97
			ne, 1-methy1-	2-(1-methylethyl	14419	000527-84-4	96
) – Benze) –	ne, 1-methy1-	3-(1-methylethyl	14424	000535-77-3	96
12	19.096	Cycle	Database\NISTOS Dhexene, 1-meth	Sa.L nyl-4-(1-methyle	15338	000586-62-9	97
		Cycle	• • • • • • • • • • • • • • • • • • •	ny1-4-(1-methyle	15339	000586-62-9	97
		(+)	(-Carene		15169	029050-33-7	7 96
13	23.672	1-Ha: 1, 7-0	Oatabase\NISTO: cene, 4-methyl- Octadiene otene, 2,3-dime	-	5747	003769-23-1 003710-30-3 003404-72-6	5 52
14	28.148	Yland Copas Naphi	ne thalene, 1,2,3,	sa. L 4, 4a, 7-hexahydr 1-methylethyl)-	59779	014912-44-8 003856-25-5 016728-99-7	5 58
15	28.580	Copes	naCubebene	5a. L	59823	003856-25-5 017699-14-6 003856-25-5	97
16	29.490	1, 6-(1, 6-(1, 6-(octadien-3-01,	sa.L 3,7-dimethyl- 3,7-dimethyl- 3,7-dimethyl-,	25636	000078-70-6	5 80
17	30.081	1.6-0 2-am	Inobenzoate Octadien-3-ol,	Sa.L 3,7-dimethyl-, 3,7-dimethyl-,		007149-26-0 000115-95-1	
			Myrcene		15179	000123-35-3	3 76
18	31.900	1, 6,	Database\NISTO: 10-Dodecatriene 2thylene-, (Z)-	, 7,11-dimethyl	59895	028973-97-9	41
		Bicy	:1o[7.2.0]under nethy1-8-methy:	-4-ene, 4,11,11 lene-,[1R-(1R*,4	59971	000118-65-0	41
			phyllene		59800	000087-44-5	5 38
19	32.073	3-Cy	Database\NISTO: :lohexen-1-ol, !ethv1)-	sa.L 4-methyl-1-(1-m	25750	000562-74-3	9.3
		3-Cy		4-methy1-1-(1-m	25745	000562-74-3	3 70
ACEI	TES ESE	WAX SCA	2.M Thu Feb 1	13 13:32:38 2020			

Pk#	RT	Areas	Library/ID	Ref∉	CAS# Qual
			xxen-1-o1, 4-methy1-1-(1-m (1)-, (R)-	25784	020126-76-5 58
20	33.051	33.84 C:\Datab Caryophyl Caryophyl Bicyclo[7 -trimethy	llene	59802	000087-44-5 99 000087-44-5 95 013877-93-5 93
21	35.184	Pentane,	base\NIST05a.L benyl-5-methylhex-4-enal 3-methylene- 3-dihydro-3-methyl-	1463	075697-98-2 50 000760-21-4 50 001708-27-6 50
22	35.512	ahydro-7- ethylethy 8a.alpha. Seychelle 1B-Benzoo .9.9a-oct	ne, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct methyl-4-methylene-1-(1-m yl)-, (1.alpha.,4a.alpha.,	59790 59998	030021-74-0 89 020085-93-2 78 003853-83-6 74
23	35.739	tetrameth .alphaC	base\NIST05a.L ycloundecatriene, 1,5,9,9- hyl-, Z,Z,Z- Caryophyllene Caryophyllene	59848	1000062-61-9 98 006753-98-6 97 006753-98-6 96
24	35.899	1-3-methy Bicyclo[2 imethy1-	2.2.1]heptane, 2,2-dimethy ylene-, (1S)- 2.2.1]hept-2-ene, 1,7,7-tr	15321	005794-04-7 91 000464-17-5 90 000099-86-5 90
25	36.194	ro-4,7-di Naphthale ahydro-7- ethylethy 8a.alpha. Naphthale ahydro-7-	ne, 1, 2, 4a, 5, 6, 8a-hexahyd imethyl-1-(1-methylethyl)- ne, 1, 2, 3, 4, 4a, 5, 6, 8a-oct methyl-4-methylene-1-(1-m yl)-, (1.alpha., 4a.alpha.,)- sne, 1, 2, 3, 4, 4a, 5, 6, 8a-oct methyl-4-methylene-1-(1-m yl)-, (1.alpha., 4a.alpha.,	60068	000483-75-0 99 030021-74-0 99 030021-74-0 99
		-3-methyl 2,6-Octad acetate, 1,6,10-Do -3-methyl	odecatriene, 7,11-dimethyl lene-, (Z)- iien-1-ol, 3,7-dimethyl-,	54279 59897	000141-12-8 72
Sec. III.	THE HOR.	man anam E.F		r	

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS# Qual
27	37.004	Nap hyd eny alp Eud Nap ahy her	\Database\NISTO5a.L hthalene, 1,2,3,5,6,7,8,8a-octa iro-1,8a-dimethy1-7-(1-methy1eth 1)-, [15-(1.alpha.,7.alpha.,8a. ha.)]- kesma-4(14),11-diene hthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct. idro-4a,8-dimethy1-2-(1-methy1et iy1)-, [2B-(2.alpha.,4a.alpha.,8 eta.)]-	59851	010219-75-7 95 1000152-04-3 90 000473-13-2 90
28	37.140	Nap ro- Nap ahy eth 8a. Nap ahy	\Database\NISTO5a.L hthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahyd 4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)- hthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct vdro-7-methyl-4-methylene-1-(1-m hylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha., alpha.)- hthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct vdro-7-methyl-4-methylene-1-(1-m	60068	000483-75-0 98 030021-74-0 97 030021-74-0 95
29	37.486	8a. 1.42 C: Euc Nar hyc	wiethv1)-, (1.alpha., 4a.alpha., alpha.)- \Database\NISTO5a.L esma-4(14), 11-diene ohthalene, 1,2,3,5,6,7,8,8a-octa fro-1,8a-dimethy1-7-(1-methyleth r1)-, [15-(1.alpha.,7.alpha.,8a. oha.)]- rchellene	60051	1000152-04-3 96 010219-75-7 95 020085-93-2 95
30	37.636	0.69 C: Nap -me 4af Nap ahy her a.1	\Database\NISTO5a.L hthalene, decahydro-4a-methy1-1 thylene-7-(1-methyletheny1)-, [(4a.alpha., 7.alpha., 8a.beta.)] hthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct. dro-4a,8-dimethy1-2-(1-methylet. w1)-, [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8 eta.)]- (sopropeny1-4a,8-dimethy1-1,2,3, la,5,6,7-octahydronaphthalene	60015	017066-67-0 86 000473-13-2 86 1000192-43-5 70
31	37.845	2,6 ime N-0 2-1	\Database\NISTO5a.L i,10-Dodecatrien-1-o1, 3,7,11-tr ithyl-, (Z,E)- Cyano-3-methylbut-2-enamine sutenedioic acid (Z)-, monododec ester	5586	146072-39-1 50
		1, 2 -1, [1 .al Cyc (1-	\Database\NISTO5a.L 2,4-Metheno-1H-indene, octahydro 7a-dimethyl-5-(1-methylethyl)-, S-(1.alpha.,2.alpha.,3a.beta.,4 pha.,5.alpha.,7a.beta.,8S*)]- clohexene, 6-ethenyl-6-methyl-1- methylethyl)-3-(1-methylethylid CAN 2.M Thu Feb 13 13:32:38 2020		022469-52-9 90 005951-67-7 89
ALC: NO.	IND NOS	WHA DA	AN 2.M INU PRD 13 15.32:38 2020		

₽k≢	RT	Areas	Library	//ID	Ref∉	CAS#	Qua1
		Nac hyd eny	ro-1,8a-dimet	3.5.6.7.8.8a-oc 191-7-(1-methyle 1pha.,7.beta.,8a	th	004630-07-3	89
33	38.646	Nap 0-4	, 7-dimethyl-1	05a.L 3,5,6,8a-hexahy (1-methylethyl)		000483-76-1	95
		Nap 0-4 (1	, 7-dimethyl-1- S-cis)-	3,5,6,8a-hexahy (1-methylethyl)	-,	000483-76-1	95
		0-4		3, 5, 6, 8a-hexahy (1-methylethyl)		000483-76-1	93
34	38.851		\Database\NIS				
		TO-	4,7-dimethyl-	4a,5,6,8a-hexah L-(1-methylethyl)_	000483-75-0	
		ahv eth	dro-7-methv1-	3, 4, 4a, 5, 6, 8a-o 4-methvlene-1-(1 alpha., 4a.alpha	—III	030021-74-0	96
		Nap ahy eth	hthalene, 1,2, dro-7-methy1-	3, 4, 4a, 5, 6, 8a-0 4-methylene-1-(1 alpha., 4a. beta.	-m	039029-41-9	93
35	39.710		\Database\NIS				
		ahy		3, 4, 4a, 5, 6, 8a-o thyl-2-(1-methyl -trans)-		006813-21-4	97
		Nap ahy	hthalene, 1,2, dro-4a,8-dime	3, 4, 4a, 5, 6, 8a-o thyl-2-(1-methyl		006813-21-4	94
		Nap -me		-trans)- ahydro-4a-methyl methylethylidene		000515-17-3	91
36	39.951	Nap		4a, 5, 6, 8a-bexah		031983-22-9	91
		, (Nap	1.alpha., 4a.a hthalene, 1,2,	l-(l-methylethyl lpha.,8a.alpha.) 4a,5,6,8a-hexah	_ yd 60030	024406-05-1	90
		ro- [1S-(1.alpha.,	l-(1-methylethyl 4a.beta.,8a.alph) – a.		
		Nap	hthalene, 1,2, 4,7-dimethyl- R-(1.alpha.,4	4a,5,6,8a-hexah 1-(1-methylethyl 1.alpha.,8a.alph	<u> </u>	017627-24-6	90
37	40.879		\Database\NIS			881187 81 1	0.0
		-tr	imethy1-	.alpha.,.alpha.	•		
			•	.alpha.,.alpha.	-	001197-01-9	59
ACEI	TES ESE.	WAX SC	AN 2.M Thu Fel	0 13 13:32:38 20	20		

Pk#	RT	Areas	Library	y/ID	Ref#	CAS#	Qua1
		Ber	rimethyl- nzenemethanol, rimethyl-	.alpha.,.alpha.,4	22881	001197-01-9	56
38	41.234	Na; 6-6		r05a.L ,3,4-tetrahydro-1, methylethyl)-, (1S	58550	000483-77-2	97
		Nag		3, 4-tetrahydro-1,	39069	030316-36-0	83
			phthalene, 1,2, 6-trimethyl-	3, 4-tetrahydro-1,	39071	000475-03-6	72
39	41.384	. q;	:\Database\NIS ammaElemene ammaElemene ammaElemene	F05a. L	59817	030824-67-0 030824-67-0 339154-91-5	87
40	44.068	.a. Nag mod	:\Database\NIS: lphaCalacore; phthalene, 1,2- thvl- inoline, 4,8-d:	ne -dihydro-1,1,6-tri	37894	1000293-02- 030364-38-6 013362-80-6	59
41	44 501		:\Database\NIS	_	21910	013362-60-6	49
4.1	44.551	Cyn	clohexene, 3-m enyl)-, (3R-tr:	athy1-6-(1-methyle	15389	005113-87-1	. 78
		Cyr	clohexene, 3-m enyl)-, (3R-tr:	ethyl-6-(1-methyle	15383	005113-87-1	64
		3-1	Undecen-5-yne,	(Z)-	22958	074744-27-7	7 58
42	44.955			T05a.L lo[4.3.0]-3-nonen-	17014	080376-59-6	5 50
		Caryophyllene oxide Spiro[4.5]decane		ide		001139-30-6 000176-63-6	
43	45.937	1H- 1, 1 ha.	 4.7-tetramet 	rosa.L zulene. decahvdro- nyl-, [laR-(la.alp eta.,7.beta.,7a.be	61573	028580-43-0	90
		18-		zulene, octahydro-	61559	019078-35-4	76
		B10	cyclo[6.1.0]no ylidene)-	nane, 9-(1-methyle	32218	056666-90-1	. 64
44	46.465		:\Database\NIS		71353	001139-30-6	s on
		Cyc	clohexene, 5-m enyl)-, trans-	thyl-3-(1-methyle			
			ryophyllene ox		71352	001139-30-6	5 53
45	46.861	Car	:\Database\NIS: ryophyllene ox: ryophyllene ox: clohexene, 3-m	ide	71353	001139-30-6 001139-30-6 005113-87-1	91
ACEI	TES ESE	WAX S	CAN 2.M Thu Fel	5 13 13:32:38 2020			

Pk#	RT	Areas	Library/ID	Refe	CAS#	Qua1
		thenyl)	-, (3R-trans)-			
46	47.511	1,3-Bis lopropy Cyclohe	abase\NIST05a.L =-(2-cyclopropy1,2-methylcyc 1)-but-2-en-1-one xane, 1-methyl-2,4-bis(1-me		1000222-08- 062337-95-	
		.beta.) 18-3a,7	enyl)-, (1.alpha.,2.beta.,4 - 	61559	019078-35	4 58
47	47.643	1, 6, 10- imethyl	abase\NIST05a.L Dodecatrien-3-01, 3,7,11-tr , [S-(Z)]-			
			Dodecatrien-3-01, 3,7,11-tr	72952	000142-50-	7 91
		Nerolid	72902	1000285-43-	-5 91	
48	48.562	12-0xat ne, 1,5	abase\NIST05a.L nicyclo[9.1.0]dodeca-3,7-die 5,5,8-tetramethyl-, [1R-(1R* 11R*)]-	71453	019888-34-	7 74
	o-Manth			015193-25-0 000500-02-		
49	48.735	4-Hydro .qamma.	abase\NIST05a.L oxypyridine 1-oxide -Elemene osphonic acid, dipropyl est	59808	006890-62-0 339154-91-1 006163-76-0	5 35
50	49.131	1.33 C:\Database\NIST05a.L Naphthalene, 1,2,3,4,4a,7-hexahydr o-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)- Naphthalene, 1,2,3,4,4a,7-hexahydr o-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)- Ylangene	dene, 1,2,3,4,4a,7-hexahydr dimethyl-4-(1-methylethyl)-		016728-99-	
			59781	014912-44-	8 49	
51	49.294	-	abase\NISTO5a.L			
		Azulene o-1,4-d	, 1,2,3,3a,4,5,6,7-octahydr iimethyl-7-(1-methylethenyl) (1.alpha.,3a.beta.,4.alpha.	60066	022567-17-	5 95
		Naphtha hydro-1	dene, 1,2,3,5,6,7,8,8a-octa ,8a-dimethyl-7-(1-methyleth [1R-(1.alpha.,7.beta.,8a.a	60047	004630-07-	3 68
		Naphtha	lene, 2,3,4,4a,5,6-hexahydr dimethyl-7-(1-methylethyl)-		000473-14-	3 64
52	49.390	Cyclopr imethyl 2-methy clopent	abase\NIST05a.L opanecarboxylic acid, 2,2-d 3-(2-methyl-1-propenyl)-, /1-4-oxo-3-(2-pentenyl)-2-cy .en-1-yl ester, [1B-[1.alpha],3.beta.]]-	142588	004466-14-	2 80
ACEI	TES ESE	WAX SCAN 2	.M Thu Feb 13 13:32:38 2020			

Pk#	RT	Areas	Library/ID	Ref#	CAS#	Qua1
		1. 1 4-F	yclopentene, 4-(hydroxymethyl)- .2.3-tetramethyl- 'luorobenzoic acid, 2-methyloct- n-4-yl ester			
53	49.667	Nap -me	\Database\NISTO5a.L hthalene, decahydro-4a-methyl-1 thylene-7-(1-methylethenyl)-, [60021	017066-67-0	83
		Nap o-1	-(4a.alpha.,7.alpha.,8a.beta.)] hthalene, 2,3,4,4a,5,6-hexahydr ,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)- ;idiflorol		000473-14-3 1000122-17-	
				72904	1000122-17-	-3 62
54	51.232	Nap ahy hen	\Database\NIST05a.L hthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct dro-4a,8-dimethyl-2-(1-methylet yyl)-, [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8 eta.)!-	60054	000473-13-2	2 86
		1, 4 8-t	-Methanoazulene, decahydro-4,8, rimethyl-9-methylene-, [1S-(1.a a3a.beta4.alpha8a.beta.)]	60020	000475-20-	7 50
	0-1	llene. 1.2.3.3a.4.5.6.7-octahvdr ,4-dimethyl-7-(1-methylethenyl) [1R-(1.alpha.,3a.beta.,4.alpha. beta.)]-	60066	022567-17-5	5 47	
55	51.364	Cyc 4-1	\Database\NISTO5a.L clohexane, 1-ethenyl-1-methyl-2, dis(1-methylethenyl)-, [1S-(1.al l.,2.beta.,4.beta.)]-	60003	000515-13-9	96
		B1c thy	yclo[6.1.0]nonane, 9-(1-methyle lidene)- lohexane, 1-ethenyl-1-methyl-2,		056666-90-3	
		4-b	dis(1-methylethenyl)-, [15-(1.al .,2.beta.,4.beta.)]-	00001	000313-13-	. 45
56	51.523		\Database\NISTO5a.L			
		Nac o-4	yophyllene oxide hthalene. 1.2.3.5.6.8a-hexahvdr ,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-,		001139-30-6 000483-76-3	
		Nap -me	S-cis)- hthalene, decahydre-4a-methyl-1 thylene-7-(1-methylethylidene)- 4aR-trans)-	59991	000515-17-3	3 38
57	51.600	1H- 3, 5 etr	\Database\NISTO5a.L Cyclopropa[a]naphthalene, la,2, ,6,7,7a,7b-octahydro-1,1,7,7a-t amethyl-, [laR-(la.alpha.,7.alp	60096	017334-55-3	3 95
		Cyc (1- ene	, 7a.alpha., 7b.alpha.)]- clohexene, 6-ethenyl-6-methyl-1- methylethyl)-3-(1-methylethylid)-, (S)-		005951-67-7	
		(+)	-Epi-bicyclosesquiphellandrene	59869	054324-03-1	7 86
58	51.896		\Database\NIST05a.L zene, 1,2-dimethoxy-4-(1-propen	41491	000093-16-3	3 95
ACEI	TES ESE	WAX SC	AN 2.M Thu Feb 13 13:32:38 2020			

Pk#	RT	Areas	Library/ID	Refe	CAS#	Qua1
		y1)-	1,2-dimethoxy-4-(2-propen 1,2-dimethoxy-4-(1-propen		000093-15-	
59	52.196	Bicyclo yl-5-met .tauCa Naphthal	ene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydr methyl-1-(1-methylethyl)-,	72906	150320-52- 005937-11- 000483-76-	1 86
60	52.456	Agarospi Naphthal hydro-1, enyl)-, alpha.)] Azulene, o-1.4-di	ene, 1,2,3,5,6,7,8,8a-octa 8a-dimethy1-7-(1-methyleth [15-(1.alpha.,7.alpha.,8a. - 1,2,3,3a,4,5,6,7-octahydr methy1-7-(1-methylethenyl) 1.alpha.,3a.beta.,4.alpha.	60053	001460-73- 010219-75- 022567-17-	7 64
61	52.706	0.57 C:\Data .alpha Acetic a pt-1-ylm	base\NISTO5a.L	44252	000481-34-1 1000187-21- 032616-84-1	9 37
62	53.038	0.86 C:\Data Copaene Copaene Copaene	base\NISTO5a.L	59779	003856-25- 003856-25- 003856-25-	5 95
63	53.197	2-Fluore Cvclohes 1-mathyl	bbase\NIST05a.L bbenzyl alcohol sene. 1-methv1-4-(5-methyl- ene-4-hexenyl)-, (S)- vliene oxide	59931	000446-51- 000495-61-	4 30
64	53.384	1, 4-Meth 8-trimet 1pha.,3a 1H-Cycle 1, 1, 7-tr 1H-Cycle 1, 1, 7-tr -(1a.als	base\NIST05a.L sanoazulene, decahydro-4,8, hyl-9-methylene-, [1S-(1.a l.beta.,4.alpha.,8a.beta.)] prop[e]azulene, decahydro- imethyl-4-methylene-, prop[e]azulene, decahydro- imethyl-4-methylene-, [1aR oha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.b alpha.)1-	59928	000475-20- 072747-25- 025246-27-	2 51
		0.07 C:\Data Azulene, o-1, 4-di -, [1R-(hase\NISTO5a.L 1,2,3,3a,4,5,6,7-octahydr methyl-7-(1-methylethenyl) (1.alpha.,3a.beta.,4.alpha. M Thu Feb 13 13:32:38 2020	60066	022567-17-	5 83
ACK	IES ESE	WAX SUAN 2.	m ind FGD 13 13:32:38 2020			

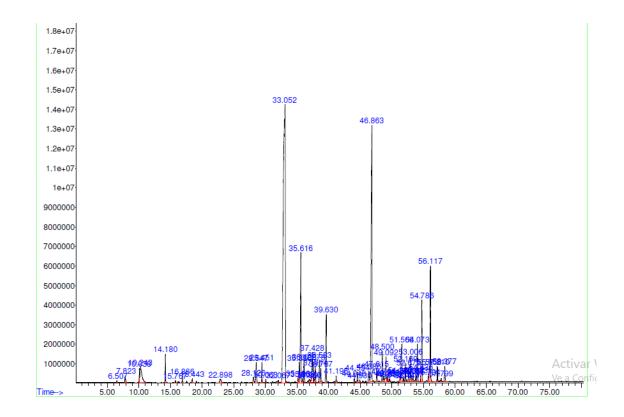
₽k#	RT	Areas	Library/ID	Ref#	CAS#	Qua1
			,7.beta.)]- 18-Cvcloprop/elazulene. decahvdro- 1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [laR -(la.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.b eta.,7b.alpha.)]-	60075	025246-27-9	64
		1	Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct ahydro-4a,8-dimethyl-2-(1-methylet henyl)-, [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8 a.beta.)]-	60054	000473-13-2	2 55
66	53.852	!	C:\Database\NIST05a.L 2-Naphthalenemethanol, 1,2,3,4,4a, 5,6,8a-octahydroalpha.,.alpha.,4 a,8-tetramethyl-, [2R-(2.alpha.,4a .alpha.,8a.beta.)]-	73025	000473-16-5	5 99
			2-Naphthalenemethanol, decahydro alpha.,.alpha.,4a-trimethyl-8-meth ylene-, [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8a .beta.)]-	73010	000473-15-4	4 70
			2-Naphthalenemethanol, decahydro alpha.,.alpha.,4a-trimethyl-8-meth vlene [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8a .beta.)]-	73009	000473-15-4	62
67	54.107		C:\Database\NIST05a.L	70000	000401 74 1	
			.alphaCadinol 2(1H)-Azulenone, 4,5,6,7,8,8a-hexa		000481-34-9 055103-73-6	
			hydro-8a-methyl-, (S)- 1H-Indene, 1-ethylideneoctahydro-, trans-	23000	056324-70-0	38
68	54.653		C:\Database\NISTO5a.L 1B-3a,7-Methanoazulene, octahydro- 1,4,9,9-tetramethyl-	61559	019078-35-4	4 38
			1,4,5,5-bitamethyl- Z-3-Hexadecen-7-yne Cyclohexanol, 2-methyl-5-(1-methyl ethenyl)-, (1.alpha.,2.alpha.,5.be ta.)-		1000130-91- 018675-33-7	
69	54.821		C:\Database\NIST05a.L			
			1, 1, 2, 2, 3, 3-Hexamethylindane 1-Acetyl-2, 7-naphthalenediol Pyrazol-(4H)-one, 1-(4-ethylphenyl)-3-methyl-	58282	091324-94-6 086358-83-0 107430-31-9	43
70	55.817		C:\Database\NIST05a.L 1,4,9-Decatriene, (Z)-		1000155-93-	
			Cyclooctene, 4-ethenyl- 7-Oxabicyclo[4.1.0]heptane, 1-meth yl-4-(1-methylethenyl)-		001124-45-4 001195-92-2	
71	55.976		C:\Database\NIST05a.L 2-Methy1-trans-3a,4,7,7a-tetrahydr oindane	15310	1000145-84-	-2 60
			oindane 2,4,6-Octatriene, 3,4-dimethyl- 2,4,6-Octatriene, 2,6-dimethyl-, (E,Z)-		057396-75-5 007216-56-0	
ACEI	TES ESE	WAX	SCAN 2.M Thu Feb 13 13:32:38 2020			

₽k∉	RT	Areas	Library/ID	Ref#	CAS#	Qua1
72	56.154		C:\Database\NIST05a.L IH-Cycloprop[e]azulene, decahydro- 1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [laR -(la.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.b sta.,7b.alpha.)]-	60076	025246-27-9	90
			l-Naphthalenol, decahydro-1,4a-dim athyl-7-(1-methylethylidene)-, [lR -(1.alpha.,4a.beta.,8a.alpha.)]- Seychellene		020085-93-2	
73	57.227		C:\Database\NISTO5a.L 1B-Cycloprop[e]azulene, decahydro- 1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [laR -(la.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.b ata.,7b.alpha.)]-	60075	025246-27-9	52
			1B-3a,7-Methanoazulene, octahydro- 1,4,9,9-tetramethyl- 3-[(Z)-1-Butenyl]-4-vinylcyclopent		025491-20-7 052886-04-1	
74	57.818	1	C:\Database\NISTO5a.L 5-Hepten-2-one, 6-methyl- Limonene oxide, cis- 2-Oxabicyclo[2.2.2]octan-6-o1, 1,3 3-trimethyl-, acetate	24056	000110-93-0 004680-24-4 057709-95-2	37
75	58.091	1	C:\Database\NIST05a.L Senzaldehyde, 3,4-dimethoxy- Senzaldehyde, 3,4-dimethoxy- Senzaldehyde, 3,4-dimethoxy-	33981	000120-14-9 000120-14-9 000120-14-9	86
76	58.392		C:\Database\NISTO5a.L 1(2H)-Naphthalenone, 3,4,4a,5,8,8a -hexahydro-8a-methyl-, trans- Bicyclo[6.1.0]nonane, 9-(1-methyle thylidene)-		021841-29-2 056666-90-1	
			n-Mentha-4,8-diene, (15,35)-(+)-	15246	005208-51-5	5 53
77	63.486	1	C:\Database\NIST05a.L Limonene oxide, cis- trans-ZalphaBisabolene epoxide 1-Cyclohexene-1-butanol, 2,6,6-tri methyl-	71388	004680-24-4 1000131-71- 054344-91-1	1 25

ACEITES ESE... WAX SCAN 2.M Thu Feb 13 13:32:38 2020

Fuente: Universidad del Valle de Guatemala. Departamento de Ingeniería Bioquímica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia.

Anexo 3. Cromatografía de gases con acoplamiento a espectrometría de masas GC-MS para el aceite esencial de hojas de guayaba (Psidium cattleianum Afzel. Ex Sabine) extraído a escala laboratorio con duración de 240 min



```
Data Path : C:\msdchem\1\DATA\Cursos\AIA\AIA2020\
Data File : 200212-000005.D
  Title
Acg On
             : 12 Feb 2020 16:06
  Operator : AdeM
  Sample : Aceite esencial hoja guayaba
Misc : R2 4hr
ALS Vial : 4 Sample Multiplier: 1
  Search Libraries: C:\Database\NISTO5a.L
                                                                Minimum Quality: 0
  Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: ChemStation Integrator - autointA.e
                         Library/ID
       RT Areas
                                                                Ref# CAS# Qual
Pk#
     6.505 0.04 C:\Database\NIST05a.L
                                                                 212 000067-64-1 90
209 000067-64-1 86
                    Acetone
                    Acetone
                    Acetone
                                                                 208 000067-64-1 86
      7.824 0.28 C:\Database\NIST05a.L
                    Ethyl alcohol
Ethyl alcohol
                                                                  94 000064-17-5 91
95 000064-17-5 90
                    Ethyl alcohol
                                                                  93 000064-17-5 62
  3 10.040 0.37 C:\Database\NIST05a.L
                    15188 007785-70-8 97
Bicyclo[3.1.1]hapt-2-ene, 2,6,6-tr 15376 002437-95-8 96
inethyl-, (.+/-.)-
                    .alpha.-Pinene
                                                              15178 000080-56-8 96
  4 10.244 2.08 C:\Database\NIST05a.L
                                                                   6 007664-41-7 2
                    Ammonia
                                                                   7 007732-18-5 1
                    Water
  5 14.179 0.80 C:\Database\NIST05a.L
                    Dyridine, 2-propyl-
Pyridine, 2-propyl-
                                                              15176 000127-91-3 93
9271 000622-39-9 59
9270 000622-39-9 59
  6 15.766 0.08 C:\Database\NIST05a.L
Cyclobexene, 1-methyl-4-(1-methyle 15365 005989-54-8 96
thenyl)-, (S)-
                                                               15162 005989-27-5 93
                    D_Limonene
                                                               15154 000138-86-3 93
                    Limonene
  7 16.867 0.20 C:\Database\NIST05a.L
                    1, 3, 6-Octatriene, 3,7-dimethyl-, ( 15285 003779-61-1 96
                    Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6,6-tr 15376 002437-95-8 91
                    imethyl-, (.+/-.)-
4-Carene
                                                               15150 1000150-36-1 90
  8 18.441 0.12 C:\Database\NIST05a.L
Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl 14423 000099-87-6 97
                    Benzene, 1-methyl-3-(1-methylethyl 14424 000535-77-3 96
                    Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl 14419 000527-84-4 93
  9 22.899 0.35 C:\Database\NIST05a.L
                    3-Hexen-1-o1, (Z)-
3-Hexen-1-o1
                                                                3732 000928-96-1 96
                                                                3707 000544-12-7 95
                    3-Hexen-1-01
                                                                3700 000544-12-7 93
 10 28.125 0.31 C:\Database\NIST05a.L
                                                               59781 014912-44-8 98
59782 014912-44-8 89
59779 003856-25-5 58
                    Ylangene
                    Copaene
 11 28.548 1.05 C:\Database\NIST05a.L
ACEITES ESE... WAX SCAN 2.M Thu Feb 13 13:35:32 2020
```

9823 (9779 (003856-25-5 017699-14-8 003856-25-5	97
no en		
5636 0	000078-70-6	53
7591 (007149-26-0	91
5750 (000562-74-3	90
9802 0	000087-44-5	95
4143 0	035408-14-1	50
0053 (010219-75-7	83
9848 0	006753-98-6	97
33EU (000404-17-3	344
	5636 5283 7591 5283 5240 5750 5745 5745 5751 9797 9802 9917 1418 4143 1463 9918 9984 0053	5240 000502-99-8 5636 000078-70-6 5283 003338-55-4 7591 007149-26-0 5283 003338-55-4 5240 000502-99-8 5750 000562-74-3 5745 000562-74-3 5745 000562-74-3 5751 000562-74-3 9797 000087-44-5 9802 000087-44-5 9917 242794-76-9 1418 001708-27-6 4143 035408-14-1 1463 000760-21-4 9918 150320-52-8 9984 005951-67-7 0053 010219-75-7 9849 006753-98-6 9846 006753-98-6 9846 006753-98-6 5322 000554-61-0 5320 000464-17-5

7k#	RT	Areas	Library/ID	Ref#	CAS#	Qua1
			cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methyle chylidene)-	15339	000586-62-9	89
20	36.122	3	C:\Database\NIST05a.L Kaphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-bexahyd co-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-	59954	000483-75-0	99
		6	<pre>Waphthalene, 1, 2, 3, 4, 4a, 5, 6, 8a-oct ahydro-7-methy1-4-methylene-1-(1-m athylethy1)-, (1.alpha., 4a.alpha., 8a.alpha.)-</pre>	60065	030021-74-0	98
		3 a	Aphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct ahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-m athylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha., 8a.alpha.)-	60068	030021-74-0	98
21	36.959	0	C:\Database\NIST05a.L Azulene, 1,2,3,3a,4,5,6,7-octahydr b-1,4-dimethyl-7-(1-methylethenyl) -, [IR-(1.alpha.,3a.beta.,4.alpha. .7.beta.)]-	60066	022567-17-5	95
		1	IH-Cycloprop[e]azulene, decahydro- I.1.7-trimethvl-4-methvlene IaR - (a.alpha., 4a.beta., 7.alpha., 7a.b sta., 7b.alpha.)	60075	025246-27-9	94
			Seychellene	59790	020085-93-2	90
22	37.090	3 a	C:\Database\NIST05a.L {aphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct. ahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-m athylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha., 8a.alpha.)-	60068	030021-74-0	98
		3	(aphthalene, 1, 2, 4a, 5, 6, 8a-hexahyd	59954	000483-75-0	96
		3	<pre>daphthalene, 1, 2, 3, 4, 4a, 5, 6, 8a-oct ahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-m athylethyl)-, (1.alpha., 4a.alpha., 8a.alpha.)-</pre>	60070	030021-74-0	91
23	37.427	3 3	C:\Database\NIST05a.L {aphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct. ahydro-4a,8-dimethyl-2-(1-methylet. benyl)-, [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8a.beta.)]-	60054	000473-13-2	99
		3 1	Rudesma-4(14), 11-diene Kaphthalene, 1,2,3,5,6,7,8,8a-octa hydro-1,8a-dimethyl-7-(1-methyleth enyl)-, [15-(1.alpha.,7.alpha.,8a. alpha.)]-		1000152-04- 010219-75-7	
24	37.577	3	C:\Database\NIST05a.L Kaphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct shydro-4a,8-dimethyl-2-(1-methylet seny1)-, [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8 a.beta.)]-	60054	000473-13-2	90
		3	(aphthalene, decahydro-4a-methyl-1 -methylene-7-(1-methylethenyl)-, [laB-(4a.alpha.,7.alpha.,8a.beta.)]	60015	017066-67-0	76
ACEI	TES ESE.	WAX	SCAN 2.M Thu Feb 13 13:35:32 2020			

Pk#	RT	Areas	Library/ID	Refe	CAS#	Qua1			
		ahvo he ny	nthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-o iro-4a.8-dimethv1-2-(1-methv1 /1)-, [2R-(2.alpha.,4a.alpha. rta.)]-	et.	000473-13-	2 55			
25	37.914	Cycl (1-n	Database\NIST05a.L Lohaxene, 6-etheny1-6-methy1- methylethy1)-3-(1-methylethy1 -, (S)-		005951-67-	7 89			
		Naph hydr enyl	hthalene, 1,2,3,5,6,7,8,8a-oc co-1,8a-dimethyl-7-(1-methyle l)-, [1R-(1.alpha.,7.beta.,8a	th	004630-07-	3 89			
			iaPanasinsene	59841	1000159-39	-0 86			
26	38.582	Naph o- 4,	Database\NIST05a.L hthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahy 7-dimethyl-1-(1-methylethyl) 5-cis)-		000483-76-	1 95			
		Naph o-4,	5-C1s)- hthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahy 7-dimethyl-1-(1-methylethyl) 5-C1s)-		000483-76-	1 94			
		Naph o-4,	This is a second of the second		000483-76-	1 93			
27	38.787	Naph	Database\NIST05a.L hthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexah 4.7-dimethv1-1-(1-methv1ethv1		000483-75-	0 98			
		Naph ahyd ethy	nthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-o iro-7-methyl-4-methylene-1-(1 /lethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha	ct. 60068 -m	030021-74-	0 93			
		Naph ahyd ethy	alpha.)- nthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-o iro-7-methyl-4-methylene-1-(1 ylethyl)-, (1.alpha.,4a.beta. lpha.)-	—m	039029-41-	9 93			
28	39.629	Naph ahyd	Database\NIST05a.L hthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-o iro-4a,8-dimethyl-2-(1-methyl		006813-21-	4 97			
		Naph ahyd	idene)-, (4aH-trans)- hthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-o iro-4a,8-dimethyl-2-(1-methyl		006813-21-	4 93			
		1H-0 1, 1, -(1a	idene)-, (4aR-trans)- Cycloprop[e]azulene, decahydr 7-trimethyl-4-methylene-, [1 a.alpha.,4a.alpha.,7.alpha.,7 a.,7b.alpha.)]-	aR	000489-39-	4 91			
29	41.193	Naph 6-di	Database\NISTO5a.L hthalene, 1,2,3,4-tetrahydro- methyl-4-(1-methylethyl)-, (000483-77-	2 97			
			nthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	1, 39072	000475-03-	6 86			
			-trimethy1- hthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	1, 39071	000475-03-	6 86			
ACEI	ACEITES ESEWAX SCAN 2.M Thu Feb 13 13:35:32 2020								

Pk#	RT	Areas	Library/ID	Ref∉	CAS#	Qua1
		1, 6	-trimethyl-			
30	44.045	.al Nap met	\Database\NIST05a.L phaCalacorene hthalene, 1,2-dihydro-1,1,6-tr hyl- noline, 3-ethyl-	1 37894	1000293-02 030364-38- 001873-54-	6 64
31	44.555	Cyc the Cyc the	\Database\NISTO5a.L lohexene, 3-methyl-6-(1-methyl nyl)-, (3R-trans)- lohexene, 5-methyl-3-(1-methyl nyl)-, trans-(-)- acen-1-yne, (Z)-	le 15382	005113-87- 056816-08- 061827-88-	1 50
32	44.932	(75 7-0 2, 4, ste	,6-Heptatrienoic acid, methyl	e 16794	080376-59- 100378-49- 000589-29-	2 30
33	46.388	Car Cyc the	\Database\NISTO5a.L yophyllene oxide lohexene, 3-methyl-6-(1-methy: nyl)-, (3R-trans)- etradecen-5-yne, (E)-	le 15383	001139-30- 005113-87- 074744-44-	1 55
34	46.865	Car Car Cyc	\Database\NIST05a.L yophyllene oxide yophyllene oxide lohexene, 5-methyl-3-(1-methyl nyl)-, trans-(-)-	71353	001139-30- 001139-30- 056816-08-	6 87
35	47.616	Ner 1, 6, ime 1, 6	\Database\NIST05a.L olidol 2 ,10-Dodecatrien-3-ol, 3,7,11-i thy1- .10-Dodecatrien-3-ol, 3,7,11-i thy1-, [S-(Z)]-	tr 72930	1000285-43 007212-44- 000142-50-	4 91
36	48.498	12-0 ne, ,3E, 2-0	\Database\NIST05a.L Oxabicyclo[9.1.0]dodeca-3,7-d: 1,5,5,8-tetramethyl-, [1R-(18,7E,11R+)]- ,7E,11R+)]- yclohexen-1-one, 4-(1-methylei	R*	019888-34-	
		y1)- o-M	- enth-8-ene	16285	015193-25-	6 53
37	48.699	2(1) Cyc	\Database\NIST05a.L H)-Pyrimidinone, 4-amino- lopentanecarboxamide, N-(2-flu henyl)- minopyrimidine-1-oxide	10 62070	000071-30- 1000308-60 035034-15-	-7 38
38	49.090		\Database\NIST05a.L hthalene, 1,2,3,4,4a,7-hexahyo	ir 59947	016728-99-	7 59
ACEI	TES ESE	WAX SC	AN 2.M Thu Feb 13 13:35:32 20:	20		

Pk#	RT	Areas	Library/ID	Ref#	CAS#	Qua1			
		4 8 [C	-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)7-Methanoazulene. 1.2.3.4.5.6.7octahydro-1,4,9,9-tetramethyl-, 1S-(1.alpha.,4.alpha.,7.alpha.)]- yclohexene, 6-ethenyl-6-methyl-1- 1-methylethyl)-3-(1-methylethylid ne)-, (S)-		000514-51-3				
39	49.263	1	C:\Database\NIST05a.L H-Cycloprop[e]azulene, decahydro- ,1,7-trimethyl-4-methylene-, [laR (la.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.b ta.,7b.alpha.)1-	60075	025246-27-5	78			
		1	H-Cycloprop[e]azulene, decahydro- .1.7-trimethyl-4-methylene-	59928	072747-25-2	68			
		A o	zulene, 1,2,3,3a,4,5,6,7-octahydr -1,4-dimethyl-7-(1-methylethenyl) , [1R-(1.alpha.,3a.beta.,4.alpha. 7.beta.)]-	60066	022567-17-	64			
40	49.354	0.14	C:\Database\NIST05a.L						
			. 4. 4-Trimethv1-3-(3-oxo-but-1-eny)-bicyclo[4.1.0]heptan-2-one	71245	1000190-30-	8 83			
		1 2	yclopropanecarboxylic acid, 2,2-d methyl-3-(2-methyl-1-propenyl)-, -methyl-4-oxo-3-(2-pentenyl)-2-cy	142588	004466-14-2	80			
		Č	<pre>lopenten-1-yl ester, [1R-[1.alpha [S*(Z)], 3.beta.]]- yclohexene, 6-(2-butenyl)-1, 5, 5-t imethyl-, (E)-</pre>	41751	053941-16-5	64			
41	49.636		C:\Database\NIST05a.L aphthalene, 2,3,4,4a,5,6-hexahydr	59951	000473-14-3	8 83			
		o N	-1, 4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)- aphthalene, decahydro-4a-methyl-1 methylene-7-(1-methylethenyl)-, [60021	017066-67-0	83			
		4	aR-(4a.alpha.,7.alpha.,8a.beta.)] H-Cycloprop[e]azulene, decahydro- ,1,7-trimethyl-4-methylene-	59928	072747-25-3	2 70			
42	51.214	N a h	C:\Database\NIST05a.L aphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct hydro-4a,8-dimethy1-2-(1-methy1et eny1)-, [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8	60054	000473-13-2	86			
		1 8	.beta.)]- ,4-Methanoazulene, decahydro-4,8, -trimethyl-9-methylene-, [15-(1.a	60020	000475-20-7	7 46			
		N	pha.,3a.beta.,4.alpha.,8a.beta.)] aphthalene, decahydro-4a-methyl-1 methylene-7-(1-methylethenyl)-,[aR-(4a.alpha.,7.alpha.,8a.beta.)]	60015	017066-67-0	46			
43	51.341	4 4	C:\Database\NIST05a.L yclohexane, 1-etheny1-1-methy1-2, -bis(1-methyletheny1)-, [1S-(1.al ha.,2.beta.,4.beta.)]-		000515-13-9				
		C	aryophyllene oxide	71352	001139-30-6	43			
ACEI	ACEITES ESEWAX SCAN 2.M Thu Feb 13 13:35:32 2020								

₽k#	RT	Areas	Library/ID	Ref#	CAS#	Qua1
			2-Cyclopentene-1-acetaldehyde, 2-f ormy1alpha.,3-dimethy1-	33319	075332-42-2	38
44	51.564		C:\Database\NIST05a.L Azulene, 1,2,3,3a,4,5,6,7-octahydr o-1,4-dimethyl-7-(1-methylethenyl) -, [1R-(1.alpha.,3a.beta.,4.alpha.,7.beta.)]-	60066	022567-17-5	90
			Naphthalene, decahydro-4a-methyl-1 -methylene-7-(1-methylethenyl)-, [4aR-(4a.alpha.,7.alpha.,8a.beta.)]	60021	017066-67-0	58
			1H-Cycloprop[e]azulene, decahydro- 1, 1, 7-trimethy1-4-methylene-, [1aR -(1a.alpha., 4a.beta., 7.alpha., 7a.b eta., 7b.alpha.)]-	60075	025246-27-9	49
45	51.878		C:\Database\NIST05a.L Benzene, 1,2-dimethoxy-4-(1-propen	41489	000093-16-3	97
			y1)- Benzene, 1,2-dimethoxy-4-(1-propen	41491	000093-16-3	95
		1	y1)- Benzene, 1,2-dimethoxy-4-(2-propen y1)-	41487	000093-15-2	92
46	52.169		C:\Database\NIST05a.L Bicyclo[4.4.0]dec-1-ene, 2-isoprop	E0010	150320-52-8	01
			yl-5-methyl-9-methylene- .tauCadinol		005937-11-1	
		1	.taucauhoi Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct ahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-m ethylethyl)-, (1.alpha.,4a.beta.,8 a.alpha.)-		039029-41-9	
47	52.451		C:\Database\NIST05a.L Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-oct ahydro-7-methy1-4-methylene-1-(1-m ethylethy1)-, (1.alpha.,4a.alpha.,	60070	030021-74-0	86
			8a.alpha.)- 1H-Cvclobroblelazulene, decahvdro- 1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [laR -(la.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.b	60075	025246-27-9	70
		1	eta.,7b.alpha.)]- Naphthalene, decahydro-4a-methyl-1 -methylene-7-(1-methylethylidene)- , (4aR-trans)-	59991	000515-17-3	64
48	52.679		C:\Database\NIST05a.L .alphaCadino1 4,7-Methanobenzofuran, 2,2'-oxybis		000481-34-5 087248-50-8	
			[octahydro-7,8,8-trimethyl-, [2R[2 .alpha.(2'R*,3'aS*,4'R*,7'R*,7'aS*),3a.alpha.,4.alpha.,7.alpha.,7a.a lpha.]]-			
			4- (Bromomethyl) cyclohexene	39204	034960-41-3	35
49	53.006		C:\Database\NIST05a.L Copaene	59779	003856-25-5	95
ACEL	TES ESE.	WAX	SCAN 2.M Thu Feb 13 13:35:32 2020			

₽k#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qua1
		· ·	aene aene		003856-25- 003856-25-	
50	53.165	.a1 4-F	\Database\NISTO5a.L phaCadinol luorobenzyl alcohol luorobenzyl alcohol	10940	000481-34- 000459-56- 000446-51-	3 38
51	53.356	1,4 8-t 1ph	\Database\NIST05a.L -Methanoazulene, decahydro-4,8, rimethyl-9-methylene-, [IS-(1.a a.,3a.beta.,4.alpha.,8a.beta.)] Cycloprop[e]azulene, decahydro-	l	000475-20-	
		1, 1 1R,	,7-trimethy1-4-methylene- 3Z,9s-4,11,11-Trimethy1-8-methy abicyclo[7.2.0]undec-3-ene		1000140-07	
52	53.825	2-N 5, 6 a, 8	\Database\NISTO5a.L aphthalenemethanol, 1,2,3,4,4a, ,8a-octahydroalpha.,.alpha.,4 -tetramethy1-, [2R-(2.alpha.,4a pha8a.beta.)1-		000473-16-	5 99
		2-N alp yle	aphthalenemethanol, decahydro- ha., alpha., 4a-trimethyl-8-meth ne-, [2R-(2.alpha., 4a.alpha., 8a ta.)]-		000473-15-	4 76
		5, 6 a, 8	aphthalenemethanol, 1,2,3,4,4a, ,8a-octahydroalpha.,.alpha.,4 -tetramethyl-, [2R-(2.alpha.,4a pha.,8a.beta.)]-		000473-16-	5 58
53	54.075	.al	\Database\NIST05a.L phaCadinol lopentene, 1-isopropy1-4,5-dims 1-		000481-34- 007712-74-	
			-Methy1-5-(furan-3-y1)-pent-1-e -one	31890	1000143-28	-6 27
54	54.635	18-	NDatabase\NISTO5a.L 3a,7-Methanoazulene, octahydro- ,9,9-tetramethy1-	61559	019078-35-	4 27
		Bic thy	yclo[5.1.0]octane, 8-(1-methyle lidene)-		054166-47-	
		yle	-Hexadiene, 2,5-dimethy1-3-meth ne-	9/42	059131-13-	4 15
55	54.785	1H- 1, 1 -(1	\Database\NISTO5a.L Cycloprop[e]azulene, decahydro- ,7-trimethyl-4-methylene-, [laF a.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.f .,7b.alpha.)]-	t.	025246-27-	9 46
		Ben nte	zene, 1-(5,5-dimethy1-1-cyclops n-1-y1)-2-methoxy- anone, 1-(4-cyclobexy1pheny1)-		039877-93- 018594-05-	
56	55.794	0.21 C:	\Database\NISTO5a.L yclohexen-1-carboxaldehyde, 3,4		1000131-99	
ACEI	TES ESE.		AN 2.M Thu Feb 13 13:35:32 2020		1000131-99	-4 22

Pk#	RT	Areas	Library/ID	Ref#	CAS# Qual
		L	dimethyl- imonene oxide. cis- -Methyl-1,4-heptadiene		004680-24-4 52 013857-55-1 42
57	55.949	T	C:\Database\NIST05a.L ricyclo[5.2.1.0(4,8)]decane ricyclo[5.3.0.0(4,8)]decane ,5-Methano-1B-indene, octahydro-	15230	042836-61-3 58 019485-20-2 58 019026-94-9 49
58	56.117	1 1	C:\Database\NIST05a.L socaryophillene H-Cycloprop[e]azulene, decahydro- ,1,7-trimethyl-4-methylene-, [laR (la.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.b ta.,7b.alpha.)]-		1000140-07-2 56 025246-27-9 53
		S	eychellene	59790	020085-93-2 49
59	57.209	1 C 1	C:\Database\NIST05a.L -Nonen-3-yne yclobexane, 1,5-dietheny1-3-methy -2-methylene-, (1.alpha.,3.alpha. 5.alpha.)- yclopentane, 1-etheny1-3-methylen	30919	057223-18-4 43 074742-35-1 42 029668-63-1 42
60	57.800	C h 7. V	C:\Database\NIST05a.L yclohexanol, 2-methylene-3-(1-met ylethyl)-, acetate, cis- -0xabicyclo[4.1.0]heptane, 1-meth 1-4-(2-methyloxiranyl)- ydroxyalphaterpenyl acetate	34750	054845-30-6 43 000096-08-2 32 1000293-00-9 32
61	58.378	1 - B t	C:\Database\NIST05a.L (2E)-Naphthalenone, 3,4,4a,5,8,8a hexahydro-8a-methyl-, trans- icyclo[6.1.0]nonane, 9-(1-methyle hylidene)- -Nonen-3-yne	32218	021841-29-2 78 056666-90-1 70 057223-18-4 60

ACRITES ESE... WAX SCAN 2.M Thu Feb 13 13:35:32 2020

Fuente: Universidad del Valle de Guatemala. Departamento de Ingeniería Bioquímica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia.