



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y

MECÁNICA

CARRERA DE INGENIERÍA EN PETROQUÍMICA

**TRABAJO DE TITULACIÓN, PREVIO A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO
DE INGENIERO EN PETROQUÍMICA**

**TEMA: PROPUESTA DE CLASIFICACIÓN DE ACEITES ESENCIALES
MEDIANTE EL ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES (ACP).**

AUTOR: PESANTEZ QUINTANILLA, JONATHAN ANGEL

DIRECTOR: DR. PH.D. RODRÍGUEZ MAECKER, ROMAN NICOLAY

LATACUNGA

2019



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

II

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE INGENIERÍA EN PETROQUÍMICA

CERTIFICACIÓN

Certifico que el trabajo de titulación, **“PROPUESTA DE CLASIFICACIÓN DE ACEITES ESENCIALES MEDIANTE EL ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES (ACP)”** fue realizado por el señor **JONATHAN ANGEL PESANTEZ QUINTANILLA**, el mismo que ha sido revisado en su totalidad, analizado por la herramienta de verificación de similitud de contenido; por lo tanto cumple con los requisitos teóricos, científicos, técnicos, metodológicos y legales establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, razón por la cual me permito acreditar y autorizar para que lo sustente públicamente.

Latacunga, 03 de julio de 2019



DR. PH.D. ROMAN NICOLAY RODRIGUEZ MAECKER
DIRECTOR



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE INGENIERÍA EN PETROQUÍMICA

AUTORÍA DE RESPONSABILIDAD

Yo, Pesantez Quintanilla Jonathan Angel declaro que el contenido, ideas y criterios del trabajo de titulación: **“PROPUESTA DE CLASIFICACIÓN DE ACEITES ESENCIALES MEDIANTE EL ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES (ACP)”** es de mi autoría y responsabilidad, cumpliendo con los requisitos teóricos, científicos, técnicos, metodológicos y legales establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, respetando los derechos intelectuales de terceros y referenciando las citas bibliográficas.

Consecuentemente el contenido de la investigación mencionada es veraz.

Latacunga, 03 de julio de 2019

JONATHAN ANGEL PESANTEZ QUINTANILLA

C.C.: 0502945215



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA

CARRERA DE INGENIERÍA EN PETROQUÍMICA

AUTORIZACIÓN

Yo, Pesantez Quintanilla Jonathan Angel, autorizo a la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE publicar el trabajo de titulación: **“PROPUESTA DE CLASIFICACIÓN DE ACEITES ESENCIALES MEDIANTE EL ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES (ACP)”** en el Repositorio Institucional, cuyo contenido, ideas y criterios son de responsabilidad.

Latacunga, 03 de julio de 2019

JONATHAN ANGEL PESANTEZ QUINTANILLA

C.C.: 0502945215

DEDICATORIA

A Dios quien me ha guiado con fortaleza y sabiduría a lo largo de esta etapa de estudio, a mis padres que me han brindado su apoyo incondicional durante toda mi vida, a mis hermanos Danny, Johana, Josué y Angel por siempre darme fuerza y apoyo cuando lo he necesitado, a mi novia Anita por ser mi apoyo, alentarme y no dejarme caer para que yo pudiera lograr mis sueños, a mi tutor quien ha fomentado disciplina, emprendimiento y desenvolvimiento y a mis profesores quienes con su confianza y paciencia supieron guiarme a lo largo de este camino.

Jonathan Angel Pesantez Quintanilla

AGRADECIMIENTO

A Dios por guiarme a lo largo de este camino y darme la fortaleza para culminar esta nueva etapa de mi vida.

A mis padres y hermanos por ser mi motivación para salir adelante en cada paso que he dado logrando alcanzar mis metas confiando en mí.

A mi novia Anita por enseñarme a luchar y aconsejarme para nunca rendirme ante ningún obstáculo que se presente a lo largo de la vida.

A mis profesores por brindarme sus conocimientos y apoyo constante a lo largo de mi vida estudiantil.

A mi tutor, Dr. Roman Rodríguez por ser un ejemplo a seguir, quien supo brindarme su apoyo incondicional.

A mi distinguida Universidad que ha sido mi segundo hogar en donde a través del día a día he aprendido valores, conocimientos y experiencias que fueron momentos inolvidables.

Jonathan Angel Pesantez Quintanilla

ÍNDICE DE CONTENIDO**CARATULA**

CERTIFICACIÓN.....	II
AUTORÍA DE RESPONSABILIDAD	III
AUTORIZACIÓN.....	IV
DEDICATORIA	V
AGRADECIMIENTO.....	VI
ÍNDICE DE CONTENIDO	VII
ÍNDICE DE TABLAS	XI
ÍNDICE DE FIGURAS	XII
ABREVIATURAS.....	XIV
RESUMEN	XV
ABSTRACT	XVI

CAPÍTULO I**GENERALIDADES**

1.1. Introducción.....	1
1.2. Descripción del problema.....	3
1.3. Propuesta.....	4

1.4. Objetivos.....	5
1.4.1. Objetivo General.....	5
1.4.2. Objetivos Específicos.....	5

CAPÍTULO II

FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

2.1. Fundamentación Teórica.....	6
2.1.1. Aceites esenciales.....	6
2.1.2. Características físicas de los aceites esenciales.....	7
2.1.3. Características químicas de los aceites esenciales.....	8
2.1.4. Métodos de obtención de aceites esenciales.....	11
2.1.5. Clasificación de aceites esenciales.....	12
2.1.6. Aplicaciones de aceites esenciales.....	15
2.1.7. Aceites esenciales en el Ecuador.....	15
2.1.8. Técnicas de Espectroscopía.....	16
a. Espectroscopía de Raman.....	16
b. Espectroscopía Infrarroja.....	18
c. Análisis de Componentes Principales.....	20

CAPÍTULO III

METODOLOGÍA

3.1. Materiales y equipos.	23
3.1.1. Materiales.	23
3.1.2. Equipos.	25
3.2. Métodos.	25
3.2.1. Recolección de aceites esenciales.	25
3.2.2. Técnicas Espectroscópicas.	26
a. Espectroscopía Infrarroja.	26
b. Espectroscopía Raman.	27
3.2.3. Análisis de Componentes Principales	28
a. Minitab.	30

CAPÍTULO IV

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1. Espectroscopía Infrarroja.	33
4.2. Espectroscopía Raman.	37
4.3. Análisis de componentes principales ACP	40
4.3.1. Clasificación ACP de espectroscopía infrarroja.	41

	X
4.3.2. Clasificación ACP de espectroscopía Raman.....	47
4.4. Comparación de Análisis de Componentes Principales.....	52
CAPÍTULO V	
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	
5.1. CONCLUSIONES	55
5.2. RECOMENDACIONES	56
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	57
ANEXOS.....	59

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. <i>Zonas infrarrojas</i>	19
Tabla 2. <i>Representación de matriz de valores y elementos</i>	21
Tabla 4. <i>Clasificación infrarroja ACP cuadrante 1</i>	42
Tabla 5. <i>Clasificación infrarroja ACP cuadrante 2</i>	43
Tabla 6. <i>Clasificación infrarroja ACP cuadrante 3</i>	45
Tabla 7. <i>Clasificación infrarroja ACP cuadrante 4</i>	46
Tabla 8. <i>Clasificación Raman ACP cuadrante 1</i>	48
Tabla 9. <i>Clasificación Raman ACP cuadrante 2</i>	49
Tabla 10. <i>Clasificación Raman ACP cuadrante 3</i>	50
Tabla 11. <i>Clasificación Raman ACP cuadrante 4</i>	52

ÍNDICE DE FIGURAS

<i>Figura 1.</i> Grupos funcionales	10
<i>Figura 2.</i> Aceites esenciales provenientes de Isabru.	26
<i>Figura 3.</i> Selección de variables (Minitab).....	31
<i>Figura 4.</i> Gráfica de Componentes Principales.....	32
<i>Figura 5.</i> Espectro AE_ Árbol de te.....	33
<i>Figura 6.</i> Espectro AE_Cedrón.....	34
<i>Figura 7.</i> Espectro AE_Eucalipto	35
<i>Figura 8.</i> Espectro AE_Lavanda.....	36
<i>Figura 9.</i> Espectro Raman AE_Arrayan.....	37
<i>Figura 10.</i> Espectro Raman AE_Clavo	38
<i>Figura 11.</i> Espectro Raman AE_Hierba Luisa.....	38
<i>Figura 12.</i> Espectro Raman AE_Menta.....	39
<i>Figura 13.</i> Componentes principales Espectroscopía infrarroja.....	40
<i>Figura 14.</i> Grafica ACP Espectroscopía Raman	41
<i>Figura 15.</i> Clasificación infrarroja ACP cuadrante 1	42
<i>Figura 16.</i> Clasificación infrarroja ACP cuadrante 2	43
<i>Figura 17.</i> Clasificación infrarroja ACP cuadrante 3	44
<i>Figura 18.</i> Clasificación infrarroja ACP cuadrante 4	46
<i>Figura 19.</i> Clasificación Raman ACP cuadrante 1.....	47

Figura 20. Clasificación Raman ACP cuadrante 2.....	48
Figura 21. Clasificación Raman ACP cuadrante 3.....	50
Figura 22. Clasificación Raman ACP cuadrante 4.....	51

ABREVIATURAS

ACP	Análisis de Componentes Principales
APC	Component Principal Analysis
AE	Aceite Esencial
°C	Grados Celsius
IR	Infrarrojo
FTIR	Espectro Infrarrojo con Transformada de Fourier
n	elementos
p	variables
CP	Componente Principal
CCD	Dispositivo de Carga Captada
cm	Centímetros
T	Transmitancia
I	Intensidad Raman

RESUMEN

En el Ecuador existe en gran medida diversas materias primas, pero la mayoría de esta materia prima solo es ocupada para su exportación mas no para su investigación y procesamiento en el país. Los aceites esenciales han ido teniendo un alto impacto en el Ecuador en cuanto a su obtención, pero no se ha realizado una investigación minuciosa acerca de cómo están formados y relacionados entre sí. El presente trabajo se enfoca en analizar un determinado grupo de aceites esenciales mediante técnicas espectroscópicas como espectroscopía infrarroja y espectroscopía raman que brindan información cuantitativa acerca de los aceites esenciales de como estos están compuestos con el fin de obtener información y generar una base de datos referente a los picos más representativos de cada técnica espectroscopía por separado y así se podrá proponer una posible clasificación mediante la técnica de análisis de componentes principales. El análisis de componentes principales es una técnica que nos permite establecer una clasificación de un grupo de datos mediante la correlación que puede existir entre ellos evaluada por diferentes variables. El estudio de los componentes por los cuales están formados los aceites esenciales permite brindar información para que las industrias químicas, productos farmacéuticos, y cosméticos puedan beneficiarse.

PALABRAS CLAVE:

- **ACEITES ESENCIALES**
- **ESPECTROSCOPIA INFRARROJA**
- **ESPECTROSCOPIA RAMAN**
- **CLASIFICACIÓN DE ACEITES ESENCIALES**
- **COMPONENTES PRINCIPALES**

ABSTRACT

In Ecuador there are many different raw materials, but most of this raw material is only used for export but not for research and processing in the country. Essential oils have been having a high impact in Ecuador in terms of obtaining them, but there has not been a thorough investigation of how they are formed and related to each other. The present work focuses on analyzing a certain group of essential oils using spectroscopic techniques such as infrared spectroscopy and raman spectroscopy that provide quantitative information about essential oils as they are composed in order to obtain information and generate a database regarding the most representative peaks of each technique spectroscopy separately and thus a possible classification can be proposed by means of the principal component analysis technique. The analysis of main components is a technique that allows us to establish a classification of a group of data through the correlation that can exist between them evaluated by different variables. The study of the components by which essential oils are formed allows providing information so that the chemical industries, pharmaceuticals, and cosmetics can benefit.

KEYWORDS:

- **ESSENTIAL OILS**
- **INFRARED SPECTROSCOPY**
- **RAMAN SPECTROSCOPY**
- **CLASSIFICATION OF ESSENTIAL OIL**
- **PRINCIPAL COMPONENT**

CAPÍTULO I

1. GENERALIDADES

1.1. Introducción.

Los aceites esenciales son sustancias naturales concentradas, con propiedades saborizantes y aromáticas, extraídas de plantas cultivadas tradicionalmente en la región amazónica, se los utiliza principalmente en la industria alimenticia, cosmetológica, farmacéutica y aromaterapia.

Los aceites actúan relajando alma y cuerpo, hidratan y nutren la superficie, lo más importante de estas esencias vivas son sus virtudes relajantes, tonificantes captadas al instante por el olfato y que constituyen toda una ciencia curativa. Cada aceite tiene una identidad, un aroma y unas características propias. Cuando los aceites se mezclan unos con otros también se están mezclados sus beneficios; algunos aceites son calmantes y relajantes, mientras que otros son estimulantes y vigorizantes, otros pueden ser muy efectivos para aliviar síntomas de infecciones comunes como resfriados y gripes.

Aislados de flores (rosa, azahar, lirio, ylang- ylang), semillas (coriandro, cilantro, anís, cardamomo), hojas y tallos (albahaca, tomillo, menta, lavanda, orégano), corteza (canela), madera (pino, sándalo), raíces (valeriana, ve-tíver) y rizomas (jengibre, cúrcuma), los aceites esenciales pueden considerarse el alma de la planta, su espíritu, que la caracteriza y destaca, evoca y hace memorizar en el tiempo; los aceites, generalmente, producen una sensación placentera, sobre todo, cuando están diluidos. Encontramos su mención en jeroglíficos egipcios, manuscritos chinos,

escrituras de sacerdotes de la Edad Media y de alquimistas, sus usos no solo eran mágico- religiosos sino también curativos. Algunos frascos sellados se encontraron en la tumba de Tutankamon, en Egipto, y contenían un ungüento, cuyo análisis reveló la presencia de frankincense (árbol de incienso, *Boswellia thurifera*) y de la esencia de nardo índico (*Nardostachys jatamansi*). Éste, tal vez, fue el hallazgo de un perfume más antiguo elaborado hace más de 3300 años. La literatura Ayur védica revela que en la India desde ya hace más de 2000 años se empleaban esencias para curar diferentes enfermedades. Los griegos antiguos y los romanos usaban esencias y extractos de plantas con fines cosméticos y para baños, que tomaban varias veces al día, aromatizaban con esencias su cabello, cuerpo y hasta la cama, para tener un sueño placentero, o como afrodisíacos. El verdadero despliegue del uso de aceites esenciales en diferentes productos y por sí solos, así como su elaboración industrial, empezaron en Francia, a finales del siglo XVII. El conocimiento obtenido por los árabes en la Edad Media sobre cómo destilar el alcohol fue el éxito para la posterior elaboración de perfumes en su forma moderna de presentación y uso, puesto que un perfume es una mezcla de agua, alcohol y aceites esenciales, junto con algunos aditivos (anti oxidantes, fijadores, colorantes, etc.) (Stashenko, 2009)

Los aceites esenciales o volátiles “la quinta esencia”, como los solían llamar los griegos en la Antigüedad-, se producen en cantidades apreciables (0.5–6%) en las llamadas plantas “aromáticas”, aquellas, que generalmente son hierbas o arbustos, poseen un fuerte y característico olor o fragancia y a menudo son atractores de insectos. (Stashenko, 2009)

El Ecuador es un país rico en materia prima y muy diverso, el cual posee diferentes plantas en algunos casos medicinales, los antepasados en su tiempo ocuparon dichas plantas con fines medicinales. A raíz de esto ha existido un interés por investigar los aceites esenciales en diferentes

localidades del país con el fin de obtener dicho producto y así beneficiarse a través de la elaboración de diferentes productos que han sido útiles desde las medicinas caseras hasta industrias como químicas, cosméticas, farmacéutica y de alimentos.

En la antigüedad de acuerdo a la necesidad se realizaban prácticas en torno a la medicina y salud usando plantas medicinales para satisfacer estas necesidades, en la actualidad se siguen utilizando métodos similares y según transcurre el tiempo cada vez se va mejorando su uso, haciendo que el país crezca en relación al uso de los aceites esenciales en diferentes ámbitos. (Del Valle & Zambrano, 2015)

En la actualidad se han realizado varias investigaciones innovadoras las cuales se orientan en la extracción y obtención de aceites esenciales con el fin de reemplazar los productos de síntesis (productos que no existen de forma natural) en las industrias existentes con productos naturales. En un enfoque en torno a las legislaciones ambientales a nivel nacional e internacional los aceites esenciales son muy accesibles dependiendo su necesidad.

1.2. Descripción del problema.

El Ecuador es un país con una localización geográfica privilegiada ya que tiene un hábitat de importantes especies vegetales y animales, el recurso más importante del país es la diversidad vegetal, por tal motivo los aceites esenciales han tomado posesión dentro de las industrias, como alimenticia, cosmética y farmacéutica, existe una gran variedad de productos que en la mayoría de países pueden ser comercializados.

Los aceites esenciales pueden contener más de una centena de moléculas aromáticas en proporciones muy variables, estas distintas combinaciones de moléculas son las causantes de su

olor característico, es decir son extractos vegetales aromáticos muy complejos y concentrados, para poder identificar la composición de los aceites esenciales detalladamente con información química y estructural con la aplicación de la espectroscopía de Raman e infrarroja ya que estas dos se complementan, el cálculo de esta propiedad permitirá plantear una clasificación cuantitativa de aceites esenciales a partir de sus componentes principales.

Cabe recalcar que en la actualidad Ecuador cuenta con diversas empresas que se dedican a la elaboración de aceites esenciales, la importancia de realizar esta investigación se enfoca en realizar nuevos estudios que permitan mejorar dichos productos nacionales en cuanto a calidad y uso; para aumentar la productividad en el ámbito nacional e internacional.

1.3. Propuesta.

El trabajo de investigación se basa en analizar los aceites esenciales mediante técnicas de espectroscopía Raman e Infrarroja para tener una clasificación mediante la utilización del análisis de componentes principales de una manera cuantitativa y así lograr generar una base de datos para distribuirlas en forma eficaz en diferentes industrias relacionadas en los ámbitos químicos, petroquímicos, farmacéuticos, perfumería, alimenticia, textil, entre otras.

Para ejecutar la presente propuesta es necesario realizar una revisión bibliográfica referente a aceites esenciales, todo en cuanto a la obtención, propiedades, aplicaciones, producción nacional e internacional, y estudios que se han realizado y así se podrá tener en cuenta la información que se encuentra proporcionada hasta la actualidad.

Se analizará los resultados obtenidos y se aplicará la técnica de análisis de componentes principales, logrando así establecer la clasificación de aceites esenciales.

1.4. Objetivos.

1.4.1. Objetivo General.

- Proponer la clasificación de aceites esenciales a partir de un Análisis por Componentes Principales (ACP) por medio de los datos obtenidos por la espectroscopía de Raman y espectroscopía infrarroja.

1.4.2. Objetivos Específicos.

- Obtener una base de datos mediante el análisis de los espectros de Raman proporcionadas por el equipo para cada aceite esencial.
- Obtener una base de datos mediante el análisis de los espectros de infrarrojo proporcionadas por el equipo para cada aceite esencial.
- Proponer una clasificación de los aceites esenciales en base a los resultados obtenidos por medio del Análisis por Componentes Principales (ACP).

CAPÍTULO II

2. FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

2.1. Fundamentación Teórica.

2.1.1. Aceites esenciales.

“Los aceites esenciales también llamado esencias volátiles o aceites etéreos, son una mezcla de sustancias aromáticas producidas por muchas plantas. Están presentes en formas de minúsculas gotas en las hojas, en la piel de la fruta, en la resina, en las ramas o en la madera. Las plantas poseen pequeñas cantidades de aceite esencial respecto a su masa vegetal. Estos aceites son olorosos muy volátiles, es decir, que se evaporan rápidamente al entrar en contacto con el aire. Tienen una química compleja, pero en general son una mezcla de terpenos, alcoholes, aldehídos, esteroides, etc. Son solubles en los aceites y en el alcohol, e insolubles en el agua, aunque le transmiten el perfume” (Teresa, 2010)

Se denomina aceite esencial a los fluidos aromáticos los cuales son de aspecto fluido o espeso y tiene un color variable dependiendo de las plantas de donde sea extraído, las gotitas de aceite esencial se liberan en la atmosfera con el simple hecho de frotar la planta. Se debe tomar en cuenta el lugar de origen, el habitat en que se desarrolle, el momento de la recolección, el método de extracción, entre otras ya que de estos factores dependen las propiedades que poseen cada aceite esencial.

En la destilación por arrastre con vapor de agua de los aceites esenciales se obtienen fracciones líquidas con una volatilidad alta, dichas fracciones poseen compuestos que generan el aroma de las plantas y que son de gran importancia en diferentes industrias como de alimentos, industrias farmacéuticas, industrias cosméticas, etc. (Galarza & Marcial, 2014)

El proceso de almacenamiento de los aceites esenciales es de gran importancia ya que pueden existir alteraciones por rancidez o polimerización, es por esto que se debe tomar en cuenta el cuidado y duración de estos aceites manteniéndoles siempre protegidos de la luz, en lugares fríos, los aceites esenciales son frágiles y se pueden alterar si no se conservan de una forma correcta.

2.1.2. Características físicas de los aceites esenciales.

Los aceites esenciales son volátiles y son líquidos a temperatura ambiente, posterior a su destilación presentan un color amarillento muy ligero en algunos casos son incoloros, posee una densidad menor a la de 1g/cm^3 , presentan un índice de refracción elevado, en cuanto a su solubilidad son liposolubles, solubles en alcoholes y disolventes orgánicos habituales, son apolares con el agua por lo que son muy poco solubles, pero pueden ser arrastrables por el vapor de agua.

Las principales características físicas de los aceites esenciales son el olor penetrante y llamativo, el sabor concentrado que posee, dependiendo ya sea dulce, amargo y aromático, conserva una densidad inferior al agua con excepción de la canela y clavo de olor.

Los Aceites Esenciales son ópticamente activos; de peso específico de 0,8 a 2,0 a temperatura de $15\text{ }^\circ\text{C}$; con punto de ebullición de 150 a $300\text{ }^\circ\text{C}$; índice de refracción de 1,45 a 1,5. Además, se alteran fácilmente bajo la acción de la luz, tornándose oscuros y modificando su perfume. (Cadavid, 2010)

Los Aceites Esenciales son volátiles, lo que significa que pasan fácilmente del estado líquido al estado gaseoso a temperatura ambiente o algo mayor. Son solubles en los aceites, alcohol, éter de petróleo, tetracloruro de carbono y demás solventes orgánicos; e insolubles en agua, aunque le transmiten su perfume. Son inflamables. Si, por ejemplo, se exprime un trozo de cáscara de naranja cerca de una estufa encendida, las gotitas de aceite que se expulsan se encienden al entrar en contacto con la llama. Son generalmente destilables por arrastre con vapor de agua y contienen las sustancias responsables del aroma de las plantas. Algunos tienen colores y sabor agradable. (Cadavid, 2010)

Son de aspecto oleoso, pero no son del todo aceitosos, sino que son un fluido como agua. La ruptura de las glándulas del aceite esencial, o simplemente la exposición al calor, ayudará a emitir estos olores de esencias volátiles. Ésta es una de las razones por las que se experimentan más fragancias en verano que en invierno. Obviamente hay pocas plantas que florecen en invierno, pero también es porque el tiempo es más frío, y el aire más denso, por lo que las moléculas se están moviendo a una velocidad más lenta y los aceites esenciales son menos evaporables. Esto hace que sea más difícil percibir su olor. (Cadavid, 2010)

2.1.3. Características químicas de los aceites esenciales.

Los componentes de los aceites se clasifican en terpenoides y no terpenoides.

No terpenoides: En este grupo tenemos sustancias alifáticas de cadena corta, sustancias aromáticas, sustancias con azufre y sustancias nitrogenadas. No son tan importantes como los terpenoides en cuanto a sus usos y aplicaciones.

Terpenoides: Son los más importantes en cuanto a propiedades y comercialmente. Los terpenos derivan de unidades de isopreno (C5) unidas en cadena. En los aceites esenciales, sustancias aromáticas y resinas como pinos y varios cítricos se encuentra una sustancia química llamada terpenos. Principalmente encontramos en los aceites monoterpenos (C10), aunque también son comunes los sesquiterpenos (C15) y los diterpenos (C20). Pueden ser alifáticos, cíclicos o aromáticos. (Stashenko, 2009)

Según los grupos funcionales que tengan pueden ser:

- Alcoholes (mentol, bisabolol) y fenoles (timol, carvacrol)
- Aldehídos (geranial, citral) y cetonas (alcanfor, thuyona)
- Ésteres (salicilato de metilo, acetato de bornilo o linalilo, compuesto antiinflamatorio).
- Éteres (1,8 – cineol) y peróxidos (ascaridol)
- Hidrocarburos (limoneno, α y β pineno)

(Stashenko, 2009)





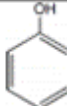
Compuesto	Grupo funcional	Ejemplo	Propiedades
Alcohol		Mentol, geraniol	Antimicrobiano, antiséptico, tonificante, espasmolítico
Aldehído		Citral, citronelal	Espasmolítico, sedante, antiviral
Cetona		Alcanfor, tuyona	Mucolítico, regenerador celular, neurotóxico
Éster		Metil salicilato	Espasmolítico, sedativo, antifúngico
Éteres	-C - O - C -	Cineol, ascaridol	Expectorante, estimulante
Éter fenólico	Anillo - O - C	Safrol, anetol, miristicina	diurético, carminativo, estomacal, expectorante
Fenol		Timol, eugenol, carvacrol	Antimicrobiano Irritante Estimulante inmunológico
Hidrocarburo	Sólo contiene C y H	Pineno, limoneno	Estimulante descongestionante antivírico, antitumoral

Figura 1. Grupos funcionales
(Escudero, 1999)

En la figura 1, se puede identificar diferentes grupos funcionales, cuyas moléculas participan en los aceites esenciales como por ejemplo los aldehídos que son compuestos muy reactivos se los puede encontrar en aceites esenciales cítricos, hidrocarburos que son compuestos formados por carbono e hidrogeno, los cuales están presentes mayoritariamente en los aceites esenciales como por ejemplo el pineno, limoneno, también los fenoles que participan de una manera escasa en algunos aceites esenciales, como el timol, eugenol y el carvacrol.

Los aceites esenciales son extractos vegetales aromáticos muy complejos y concentrados. Pueden contener más de una centena de moléculas aromáticas en proporciones muy variables. Son estas distintas combinaciones de moléculas las que aportan a los aceites esenciales sus propiedades tan particulares y las causantes de su olor característico. (Pamies, 2004)

2.1.4. Métodos de obtención de aceites esenciales.

La destilación por vapor de agua, o arrastre por vapor de agua, es la técnica más habitual para obtener aceites esenciales. Es la única técnica autorizada por la Farmacopea Europea, junto con el prensado en frío para extraer aceites esenciales de las cáscaras de los cítricos. El alambique fue inventado por los Faraones y perfeccionado por la civilización árabe. Consiste en general en una cuba de metal inerte como el cobre o el acero inoxidable, con un tamiz en el fondo para que las plantas no entren en contacto directo con el agua. El vapor generado atraviesa la planta y extrae las microgotas del aceite esencial. Este vapor de agua aromático se enfría en un serpentín mediante un circuito de agua fría. A la salida del serpentín, se obtiene una mezcla de agua aromática y aceite esencial. El aceite esencial, de menor densidad que el agua, flota, lo que permite recuperarlo por la diferencia de densidad mediante un vaso florentino o esenciero. El aceite esencial se separa del agua de destilación, el hidrolato (también llamado agua floral para las flores). (Pamies, 2004)

El prensado en frío: La técnica del prensado en frío se reserva para las cáscaras de los cítricos (limón, lima, naranja dulce, naranja amarga). El aceite esencial de los cítricos se encuentra en pequeñas bolsas situadas bajo la piel del fruto (pericarpio). Para llevar a cabo esta

técnica se utilizan prensas hidráulicas. A continuación, se separa la pulpa y el aceite esencial en la centrifugadora. (Pamies, 2004)

El enflorado: La técnica del enflorado (o maceración por saturación) es antigua y apenas se utiliza en la actualidad. Se utiliza para las plantas o las partes de plantas con un aroma demasiado frágil para soportar el calor de una destilación. Consiste en extender una capa de esas sustancias vegetales frágiles entre dos capas espesas de materia grasa. Se van renovando las materias vegetales hasta que la grasa está saturada de la fragancia de la planta. Se elimina entonces el excedente graso y se obtiene una esencia absoluta (o absoluto), un aceite esencial de muy alta calidad olfativa. Nuestro laboratorio elabora un enflorado de rosa de Damasco según el método tradicional en el propio corazón del valle de las rosas de El Kelaa M'Gouna. Esta técnica es la única que permite recuperar la fragancia de la planta en toda su plenitud. (Pamies, 2004)

La extracción mediante disolventes: La técnica de la extracción mediante disolventes sustituye en la actualidad a la del enflorado. También logra obtener unas esencias absolutas muy solicitadas entre los perfumistas por la pureza de su potente aroma. (Pamies, 2004)

2.1.5. Clasificación de aceites esenciales.

Se puede clasificar a los aceites esenciales según los siguientes criterios:

Por su consistencia

Por su consistencia las esencias se pueden clasificar en: esencias de bálsamos, esencias de oleorresinas y esencias fluidas.

Las esencias fluidas son líquidos muy volátiles a temperatura ambiente (esencias de romero, menta, salvia, limón, albahaca), las esencias de bálsamos poseen una composición más espesa, son líquidos poco volátiles, se encuentran formados por compuestos sesquiterpenoides y estos pueden formar cadenas mediante la polimerización, las oleorresinas son extractos de especias, que se obtienen por tratamiento de la droga seca con solventes. Los solventes empleados se eliminan casi completamente por procesos de destilación al vacío, destilación azeotrópica, o ambas. Las oleorresinas tienen uso en las industrias de alimentos y de medicamentos, sustituyendo las plantas secas o las tinturas. Las oleorresinas contienen los Aceites Esenciales, los aceites fijos, los colorantes y los principios activos de la planta. (Galarza & Marcial, 2014)

Los concretos, se obtienen de plantas aromáticas frescas por extracción con solventes apolares (hidrocarburos). Están constituidos por compuestos apolares y no contienen compuestos hidrosolubles. Tienen forma de semisólidos coloreados, libres del solvente original. Generalmente se obtienen de flores y de los cogollos florecidos, aunque también se pueden obtener de hojas y de las partes aéreas de las plantas herbáceas. (Cadavid, 2010)

Los absolutos, son productos de conversión de concretos por la extracción con etanol absoluto. Una vez completa la disolución, los absolutos se refrigeran a temperaturas de -5 a -10°C. A estas temperaturas las ceras se precipitan y se pueden remover por filtración. El Rendimiento de absolutos a partir de concretos varía de 10 a 65%. (Cadavid, 2010)

Por su origen

En cuanto al origen del estudio de los aceites esenciales se pueden clasificar en: aceites naturales, aceites artificiales y aceites sintéticos. Los aceites esenciales naturales se obtienen

directamente de la planta y no se someten posteriormente a ninguna modificación fisicoquímica o química, son costosos y de composición variada. Las esencias artificiales se obtienen por enriquecimiento de esencias naturales con uno de sus componentes; también se preparan por mezclas de varias esencias naturales extraídas de distintas plantas como mezcla de esencias de eucalipto, lima, mandarina o limón. Las esencias sintéticas son mezclas de diversos productos obtenidos por procesos químicos. Son más económicos y por lo tanto se utilizan mucho en la preparación de sustancias aromatizantes y saborizantes, como esencias de vainilla, limón, fresa. (Cadavid, 2010)

Por la naturaleza química de los componentes mayoritarios

Según la estructura química de los componentes mayoritarios que determinan el olor particular de los aceites, estos se dividen en tres grupos principales monoterpenoides, sesquiterpenoides y compuestos oxigenados. (Cadavid, 2010)

El primer grupo lo constituyen Aceites Esenciales que contienen básicamente monoterpenos $C_{10}H_{16}$ y monoterpenoides $C_{10}H_{18}$, $C_{10}H_{20}$, $C_{10}H_{18}O$. Como los aceites de hierbabuena, albahaca, menta, romero, salvia. El segundo grupo lo constituyen aceites cuyos principales componentes son sesquiterpenos $C_{15}H_{24}$ y sesquiterpenoides $C_{15}H_{26}$, $C_{15}H_{26}O$, como los aceites de ciprés, copaiba, pino, enebro. El tercer grupo, corresponde a compuestos ricos en fenilpropanos, están formados por esencias cuyos principales componentes son diferentes compuestos oxigenados como aldehídos, cetonas, alcoholes, ásteres, éteres, lactonas entre los que se tiene el aceite de geranio, jazmín, lavanda, rosa e ylang-ylang. Los aceites de este grupo poseen olores pronunciados y se utilizan como materia prima valiosa para la fabricación de perfumes finos. (Cadavid, 2010)

La mayoría de aceites esenciales poseen un olor característico agradable, por otra parte, hay que tener en cuenta que existen algunos aceites esenciales que presentan un aroma desagradable como es el caso del ajo y cebolla, debido a que estos contienen compuestos azufrados. (Martinez, 2003)

2.1.6. Aplicaciones de aceites esenciales.

Los aceites esenciales pueden ser ocupados en diferentes ramas de la industria química, farmacéutica, petroquímica, textil, perfumería entre otras por lo cual han ido teniendo un impacto importante en muchas industrias.

Si hacemos un enfoque en el tiempo pasado se puede observar que los aceites esenciales solo participaban o se enfocaban en la aromaterapia como un tipo de medicina alterna, pero esto fue cambiando acorde a la implementación y desarrollo de nuevas tecnologías acorde a la necesidad de las industrias químicas.

2.1.7. Aceites esenciales en el Ecuador.

En el Ecuador ha aumentado el interés por investigar acerca de los aceites esenciales, para ello se ha cuestionado una serie de preguntas entre ellas donde se encuentran ubicados, estos son accesibles y si son de fácil producción con el fin de enriquecer al país a través de la obtención de dicho producto para poder satisfacer las necesidades de las industrias farmacéuticas, químicas, cosméticas, alimenticia y en algunos casos para crear medicina casera donde estos están ubicados alrededor del país. En algunas provincias del Ecuador se puede destacar que algunos de estos aceites esenciales se dan de forma natural y las personas los ocupan en forma de plantas aromáticas y medicinales con el fin de tratar molestias o malestares gracias a sus propiedades medicinales,

pero es importante conocer que los aceites esenciales poseen diferentes compuestos que pueden ser utilizados en las industrias que pueden ser obtenidos mediante la destilación de los mismos.

El número de investigaciones que se ha realizado no ha sido significativo para la producción de aceites esenciales, siendo un país rico en materia prima para realizar proyectos de obtención de aceites, con el pasar del tiempo el Ecuador debe aprovechar en la ubicación geográfica que se encuentra y así desarrollarse económicamente.

2.1.8. Técnicas de Espectroscopía

a. Espectroscopía de Raman

La espectroscopía Raman fue descubierta en 1928 por Chandrasekhara Venkata Raman. Es una técnica basada en la dispersión inelástica de luz monocromática. Cuando la luz alcanza a la muestra con una frecuencia ν_0 , una parte es dispersada. La mayor parte de la luz dispersada tendrá la misma frecuencia que la luz incidente (dispersión de Rayleigh). Sin embargo, también hay luz dispersa que posee una energía diferente al haz incidente (hablándose, en este caso, de desplazamiento Raman), lo cual puede dar información acerca de los niveles vibracionales de las moléculas. En este caso hay dos situaciones diferentes, llamadas líneas Stokes y anti-Stokes y corresponden a valores de energía más bajos o más altos que el de la luz incidente, respectivamente. (Sánchez, 2014)

Al igual que para la espectroscopía infrarroja, en Raman se pueden analizar muestras en estado sólido, líquido o gaseoso sin necesitar ninguna preparación de la muestra. Los espectros Raman suelen abarcar el intervalo $100-4000 \text{ cm}^{-1}$.

La espectroscopía Raman es una técnica analítica muy poderosa gracias principalmente a dos razones: la primera es que permite la identificación de materiales de una forma muy precisa y no ambigua, ya que cada compuesto tiene su propio espectro; la segunda razón es que es una técnica no invasiva, es decir, a parte de la luz láser incidiendo sobre la muestra, no es necesario que exista ninguna alteración más de ésta. Otra ventaja importante que ofrece es que las muestras con las que se trabaja pueden ser realmente pequeñas, posibilitando el análisis de objetos con la simple extracción de una micro muestra y llevando esta al laboratorio. (Serradell, 2009)

A través de un espectro Raman es posible realizar dos tipos de análisis, uno cuantitativo y el otro cualitativo, cada uno adecuado según la aplicación. De forma rápida, se puede decir que un análisis cuantitativo se basa en ciertas medidas de intensidad de las bandas Raman que aparecen en el espectro. Este tipo de análisis es útil, por ejemplo, para estudiar los niveles de concentración de algún producto en una disolución. En cuanto a un análisis cualitativo, es muy útil a la hora de identificar un material o diferenciarlo de otro. Este procedimiento se lleva a cabo comparando el espectro en estudio con espectros existentes en una base de datos. Aunque la precisión de esta técnica es prácticamente del 100%, el inconveniente que presenta es la infinidad de espectros posibles que, evidentemente, no están todos archivados en una base de datos. (Serradell, 2009)

Funcionalidad del equipo.

El análisis mediante espectroscopía Raman se basa en el examen de la luz dispersada por un material al incidir sobre él un haz de luz monocromático. Una pequeña porción de la luz es dispersada inelásticamente experimentando ligeros cambios de frecuencia que son característicos de los materiales analizados e independientes de la frecuencia de la luz incidente. Se trata de una técnica de análisis que se realiza directamente sobre el material a analizar sin necesitar éste ningún

tipo de preparación especial y que no conlleva ninguna alteración de la superficie sobre la que se realiza el análisis, es decir, es no-destructiva.

Aplicaciones.

Queda claro que la Espectroscopía Raman es una de las técnicas analíticas con mayor poder de las existentes en la actualidad en donde se puede resaltar que dicha técnica tiene implicaciones en todos los ámbitos de la investigación científica debido a que está basada en las vibraciones moleculares y estas tienen lugar en cualquier cuerpo. Algunos de sus campos de aplicación son los siguientes: industria petroquímica, aplicaciones biomédicas, industria alimentaria, medio ambiente, análisis de polímeros, identificación de materiales pictóricos, donde podemos destacar que la Espectroscopía Raman nos proporciona información muy útil como presencia compuestos, estructura química, análisis de compuestos orgánicos e inorgánicos.

b. Espectroscopía Infrarroja

Las técnicas de espectroscopía infrarroja (IR) permiten conocer los principales grupos funcionales de la estructura molecular de un compuesto y son muy utilizadas actualmente por la industria. Tienen múltiples aplicaciones en agricultura, medioambiente, biotecnología, alimentación, medicina o textiles, por citar algunos ejemplos. Comprende las longitudes de onda (λ) entre 780 nm y 106 nm y está dividida en tres regiones: IR cercano (NIR), donde se producen las absorciones debidas a sobretonos y la combinación de las bandas fundamentales, IR lejano (FIR), donde se producen las absorciones debidas a cambios rotacionales e IR medio (MIR), donde tienen lugar las vibraciones fundamentales, siendo esta región utilizada para la determinación estructural de compuestos orgánicos. (Sánchez, 2014)

Aunque el espectro infrarrojo se extiende desde 10 a $14\,300\text{ cm}^{-1}$, desde un punto de vista funcional se divide en tres zonas: IR lejano, donde se producen las absorciones debidas a cambios rotacionales, el IR medio (MIR o simplemente, IR), donde tienen lugar las vibraciones fundamentales y el IR cercano (near infrared, NIR), donde se producen absorciones debidas a sobretonos y combinaciones de las bandas fundamentales. (Macho, 2002)

Tabla 1.
Zonas infrarrojas.

Región	Transición característica	Longitud de onda (nm)	Numero de onda (cm^{-1} .)
Infrarrojo cercano (NIR)	Sobretonos y combinaciones	700 – 2500	14300 – 4000
Infrarrojo medio (IR)	Vibraciones fundamentales	2500 - 5×10^4 .	4000 – 200
Infrarrojo lejano	Rotaciones	5×10^4 - 10^6 .	200 – 10

Fuente: (Macho, 2002)

Características del equipo.

El equipo donde se lleva a cabo la interacción entre la materia (muestra) y la radiación infrarroja es un espectrómetro de infrarrojo. Actualmente a estos equipos también se les conoce como espectrómetros de infrarrojo con transformada de Fourier, o como espectrómetros FTIR (del inglés Fourier Transform Infrared). El resultado de la interacción entre la muestra y la energía en infrarrojo se lee en un espectro de infrarrojo. (Mondragón, 2017)

El equipo infrarrojo se encuentra proveído con una fuente que emite radiación infrarroja. La radiación infrarroja que sale por la fuente se descompone en dos haces al pasar por diferentes espejos, a través de la rejilla de difracción el haz emitido se divide en longitudes de onda correspondientes a su composición hasta llegar al detector. El detector es una bobina de alambre

con una resistencia que reacciona con el calentamiento producido por la radiación incidente, por tal razón la intensidad de la radiación influye en la resistencia del detector. El interruptor rotatorio tiene la función de variar la llegada del detector del haz de la muestra con la del haz de referencia, consiguiendo comparar las señales (muestra y referencia) a través de circuitos eléctricos. (García, 2018)

Funcionalidad del equipo.

La espectroscopía de infrarrojos (IR) es una técnica de análisis de sustancias en diferentes estados como son sólido, líquido y gaseoso, a través de un espectro de absorción en el rango IR del espectro electromagnético, permitiendo así la identificación de compuestos químicos a través de la determinación de la frecuencia a la que los distintos grupos funcionales presentan bandas de absorción en la región IR.

Aunque fundamentalmente se emplea para el estudio de compuestos orgánicos, también los compuestos inorgánicos que contienen cationes o aniones poliatómicos dan lugar a espectros de infrarrojo útiles.

Aplicaciones.

En la industria farmacéutica, en la síntesis orgánica, control de calidad, tautomerismo (Cis-Trans), determinación de ácido mirístico, clorhidrato de anilina, polímeros, entre otros.

c. Análisis de Componentes Principales

Análisis de componentes principales (ACP), del inglés principal components analysis (PCA) es una técnica con múltiples aplicaciones quimiométricas que sirve para la representación mediante la agrupación de diferentes muestras o especies.

La información de partida para realizar análisis de datos multivariados es una tabla donde aparecen los valores de p variables observadas sobre n elementos como se muestra en la tabla 2. Las variables pueden ser cuantitativas, cuando su valor se exprese numéricamente, como la edad de una persona, su estatura o su renta, o cualitativas, cuando su valor sea un atributo o categoría, como el género, el color de los ojos. (Peña, 2002)

Tabla 2.

Representación de matriz de valores y elementos.

		Variables (p)		
		p_1	p_2	p_3
Elementos (n)	n_1	$n_1 * p_1$	$n_1 * p_2$	$n_1 * p_3$
	n_2	$n_2 * p_1$	$n_2 * p_2$	$n_2 * p_3$
	n_3	$n_3 * p_1$	$n_3 * p_2$	$n_3 * p_3$

El análisis de componentes principales tiene como objetivo de buscar combinaciones lineales que puedan ser usadas para resumir los datos, perdiendo la mínima información en el proceso. Es decir, dadas n observaciones de p variables, se analiza si es posible representar adecuadamente esta información con un menor número de variables construidas como combinaciones lineales de las originales. (Amóros, 2017)

El ACP proporciona una aproximación a la matriz R como un producto de dos matrices: la matriz de scores, T y la matriz de loadings, P , que capturan la estructura de los datos de R . Los

scores capturan la estructura de las filas o lo que es lo mismo, las relaciones entre objetos (elementos) y los loadings retienen la relación existente entre las variables. (Macho, 2002)

Para poder elegir el número de componentes, un razonamiento básico en ACP es que el rango informativo de los datos es menor que el número de variables originales. Por lo tanto, es posible reemplazar las variables originales con componentes (CP1, CP2, etc.) y obtener una serie de beneficios. La interpretación y visualización se ve favorecida en gran medida por tener una vista más simple (menos variables) de todas las variaciones. Además, la compresión de la variación en menos componentes puede producir beneficios estadísticos en futuros modelos con los datos. Por lo tanto, hay muchas buenas razones para usar ACP. Sin embargo, para poder usar ACP, es necesario poder decidir cuántos componentes usar. La respuesta a ese problema depende un poco del propósito del análisis. (Bro & Smilde, 2014)

Este método es muy útil para la interpretación de datos multivariantes, donde es importante tener en cuenta que no importa el número de datos o las unidades con las que se trabaje debido a que se trabaja con diferentes tipos de variables. Para la interpretación de los datos tenemos, por un lado, la representación de los scores que permite establecer relaciones entre los elementos permitiendo así la detección de muestras discrepantes y agrupaciones. Por otra parte, los loadings permiten comparar y estudiar la influencia de las distintas variables.

CAPÍTULO III

3. METODOLOGÍA

En el presente capítulo contiene el proceso que se realizó para cumplir con el objetivo general planteado; es así que se detalla la recolección de materia prima, las técnicas de análisis y el método para la clasificación de los aceites esenciales.

3.1. Materiales y equipos.

3.1.1. Materiales.

- 49 aceites esenciales
- Pipeta graduada de 10 μ l
- Papel absorbente.
- Guantes quirúrgicos.


Tabla 3.

Lista de aceites esenciales

N°	Nombre del Aceite esencial
1	AE_albahaca
2	AE_apio
3	AE_árbol de té
4	AE_arrayan
5	AE_azahar
6	AE_bergamota
7	AE_canela
8	AE_canelo
9	AE_cardamamo

CONTINÚA 

10	AE_cedro
11	AE_cedrón
12	AE_ciprés
13	AE_citronella
14	AE_clavo
15	AE_comino
16	AE_curcuma
17	AE_enebro
18	AE_eneldo
19	AE_eucalipto
20	AE_eucalipto limonero
21	AE_geranio
22	AE_hierba buena
23	AE_hierba luisa
24	AE_jengibre
25	AE_lavanda
26	AE_lima
27	AE_limón
28	AE_mandarina
29	AE_manzanilla
30	AE_mejorana
31	AE_menta
32	AE_molle
33	AE_naranja
34	AE_olíbano
35	AE_orégano
36	AE_pachullí
37	AE_palo de rosa
38	AE_palo santo
39	AE_petitgrain
40	AE_pimienta negra
41	AE_pino
42	AE_romero
43	AE_rosa
44	AE_salvia clara
45	AE_sándalo
46	AE_muña
47	AE_tomillo

CONTINÚA 

48	AE_toronja
49	AE_ylang_ylang

3.1.2. Equipos.

El Laboratorio de Investigación de Universidad de las Fuerzas Armadas-ESPE Latacunga, permitió la utilización de los siguientes equipos para llevar a cabo dicho proyecto de titulación.

- Se utilizó el Espectrómetro infrarrojo FT-IR accesorio de muestreo universal ATR Perkin Elmer, modelo Frontier.
- Se utilizó el Espectrómetro ID Raman Ocean Optics de 785nm

3.2. Métodos.

3.2.1. Recolección de aceites esenciales.

Las muestras fueron provenientes de la compañía Isabrubotanik S.A., obteniéndose 49 aceites esenciales de diferentes familias que entre ellas tenemos: leñosas, cítricas, comestibles, entre otras; tal como se muestra en la figura 2.



Figura 2. Aceites esenciales provenientes de Isabru.

3.2.2. Técnicas Espectroscópicas.

a. Espectroscopía Infrarroja

La espectroscopía infrarroja es la técnica vibratoria más utilizada para el estudio de productos naturales. Las bandas de los grupos funcionales particulares de la muestra absorben la radiación infrarroja de frecuencias específicas del haz y ésta se representa como un espectro de absorbancia contra el número de onda (Pereira, Gueda, & Ribeiro-Claro, 2013).

Según el manual de Espectrómetro infrarrojo FT-IR accesorio de muestreo universal ATR-Perkin Elmer, modelo Frontier, enuncia una serie de aplicaciones tales como: identificación en la recepción de materias primas, identificación de contaminantes en productos, resolución de problemas en la fabricación o en campo, desarrollo de métodos de garantía de calidad económicamente rentables, desde materias primas al control de producto final, generar un mejor

conocimiento de las propiedades de materiales avanzados, con un amplio rango de opciones de muestreo, otros.

La espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) permite obtener información específica sobre la presencia de grupos funcionales en las muestras a analizar, principalmente en la región 4000 a 650 cm^{-1} . (Barraza, y otros, 2013). El accesorio ATR mide los cambios que ocurren en un haz infrarrojo internamente, totalmente reflejado cuando entra en contacto con la muestra, mejorando la versatilidad de los sistemas infrarrojo IR, permitiendo obtener espectros a partir de la superficie de un material. (Downey, 2016)

En la investigación se obtuvieron espectros de los 49 aceites esenciales proporcionados y estos fueron analizados en la región de 600 a 4000 cm^{-1} por espectroscopía infrarroja por la transformada de Fourier el cual cuenta de un dispositivo ATR con cristal de diamante. Los espectros obtenidos fueron analizados para extraer información de los picos más representativos en variaciones del número de onda en intervalos de (4000-3000, 3000-2500, 2000-1500, 1500-1000 y 1000-500) cm^{-1} , con estos resultados se puede obtener una base de datos para su posterior análisis de componentes principales.

b. Espectroscopía Raman

La espectroscopía Raman se basa principalmente en aprovechar la dispersión inelástica de la luz que se produce cuando un material es irradiado con luz monocromática, como es el caso del láser. La manera de recoger esta luz que contiene información y convertirla en datos útiles, es mediante la utilización de un equipo Raman y la posterior representación del espectro obtenido. (Serradell, 2009)

En primera instancia tenemos que colocar la muestra (aceites esenciales) a analizar en el equipo. La luz monocromática procedente del láser es guiada a través de fibra óptica hasta el cabezal óptico. Este es el encargado de filtrar la luz para eliminar posibles frecuencias interferentes y focalizarla sobre la muestra, la luz dispersada por la muestra se recoge otra vez en el cabezal óptico y es reenviada a través de fibra óptica hacia el monocromador. Allí se separan espacialmente las componentes espectrales de la luz y se envían al CCD donde se digitaliza la señal y se manda al ordenador. En ese momento ya tenemos la posibilidad de visualizar, almacenar, tratar e interpretar los espectros obtenidos. (Serradell, 2009)

En la investigación se obtuvieron espectros de los 49 aceites esenciales proporcionados y estos fueron analizados en la región de 0 a 2500 cm^{-1} por el espectrómetro ID Raman Ocean Optics de 785nm. Los espectros obtenidos fueron analizados para extraer información de los picos más representativos en variaciones del número de onda en intervalos de (0-500, 500-1000, 1000-1500 y 1500-2000) cm^{-1} , con estos resultados se puede obtener una base de datos para su posterior análisis de componentes principales.

3.2.3. Análisis de Componentes Principales

El análisis de componentes principales tiene por objetivo: dadas las observaciones (elementos) de cada una de las variables, se analizará si es posible representar adecuadamente esta información con un número menor de variables construidas como combinaciones lineales de las originales. (Peña, 2002).

El método de componentes principales tiene por objeto transformar un conjunto de variables, a las que se denomina originales, en un nuevo conjunto de variables denominadas componentes

principales, estas últimas se caracterizan por estar correlacionadas entre sí y, además, pueden ordenarse de acuerdo con la información que llevan incorporada. (De la Fuente, 2011). Para obtener la matriz de componentes principales es necesario obtener los dos primeros componentes principales CP1 y CP2 respectivamente.

El primer componente principal CP1, se define como la combinación lineal de las variables originales que tiene varianza máxima. Los valores en este primer componente de los n individuos se representarán por un vector z_1 , dado por:

$$z_1 = Xa_1$$

Obteniendo así una matriz de varianza S .

$$Sa_1 = \lambda a_1$$

z_1 : vector del primer componente principal

X : matriz original

λ : vector varianza

S : matriz de varianza.

En el segundo componente principal CP2, vamos a obtener el mejor plano de proyección de las variables. Lo calcularemos estableciendo como función objetivo que la suma de las varianzas de $z_1 = Xa_1$ y $z_2 = Xa_2$ sea máxima.

$$\varphi = \lambda_1 + \lambda_2$$

(Peña, 2002)

Para realizar el análisis de componentes principales ACP, se representará a las variables como p y a los elementos como n , dichos datos se encuentran dispuestos en una matriz X de dimensiones $n \times p$, donde las columnas contienen las variables y las filas los elementos. El problema que se desea resolver es encontrar un espacio de dimensión más reducida que represente adecuadamente los datos.

En primera instancia se debe construir la matriz X con n -elementos y p -variables, para ello se realizó la recolección de los datos proporcionados por la espectroscopía infrarroja y Raman. En la Espectroscopía Raman y Espectroscopía Infrarroja se trabajó con 49 muestras de aceites de diferentes especies, incluyen familias leñosas, cítricas, comestibles, entre otras, para procesar la información se analizó el espectro de cada aceite esencial en el cual se tomó en cuenta los picos más representativos en cada espectro infrarrojo y Raman. Una vez procesada la información se formó la matriz $X = n \times p$. Los paquetes estadísticos habituales (Minitab, SPSS, Statgraphics, RStudio, etc.) proporcionan detallada y directamente el análisis componentes principales en este caso se trabajará con el Software Minitab.

a. Minitab

Minitab es un Software que nos permite realizar funciones estadísticas básicas y avanzadas, puede trabajar con documentos de Microsoft Excel con la capacidad de ejecución de análisis estadísticos.

Una vez obtenida la matriz X en Excel, cargamos la matriz en el programa (únicamente datos numéricos), mediante la herramienta de componentes principales seleccionamos las variables con las que vamos a trabajar, en este caso corresponde a los picos representativos obtenidos, como se

muestra en la figura 3. Se obtendrá el análisis de los componentes principales (la matriz y la gráfica de componentes principales) correspondiente a la correlación que existe en los datos, para poder analizar e interpretar los datos obtenidos como se muestra en la figura 4.

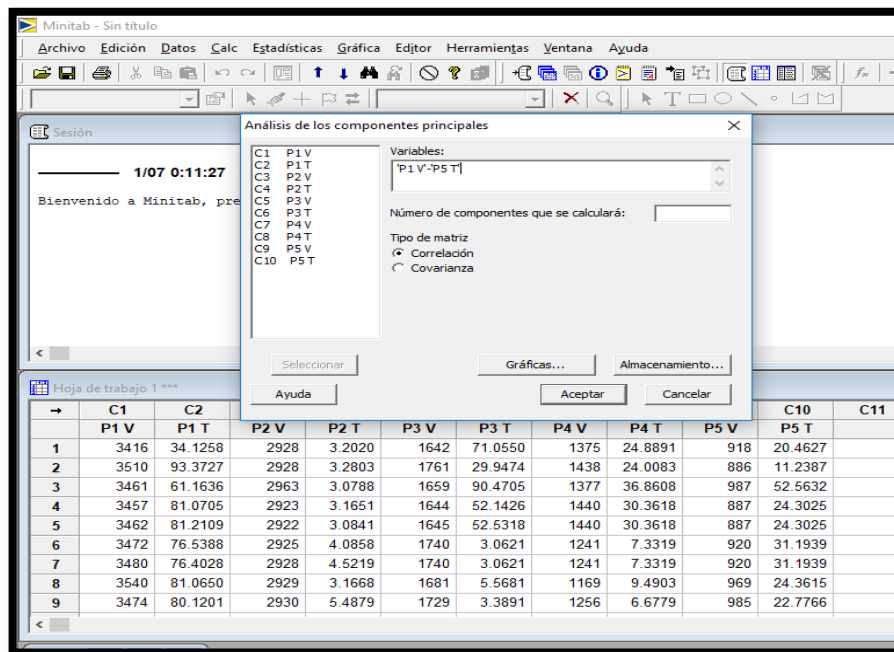
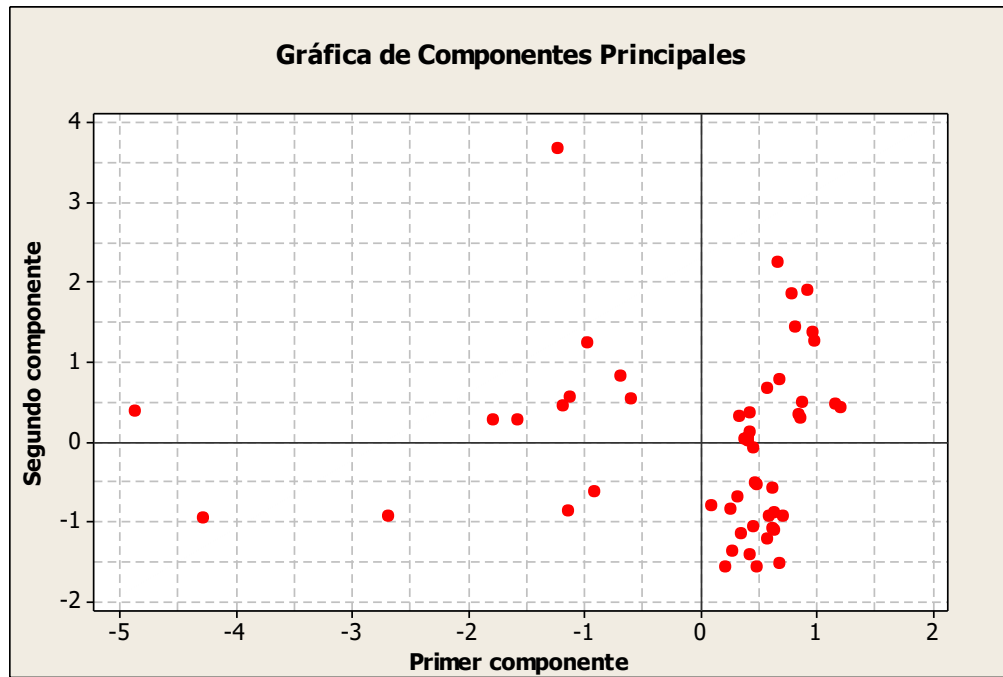


Figura 3. Selección de variables (Minitab)



CAPÍTULO IV

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.

En este capítulo se presentarán los espectros obtenidos mediante la espectroscopía Infrarroja y espectroscopía Raman, el procesamiento de la base de datos procedente de los espectros y la clasificación obtenida mediante el análisis de componentes principales.

4.1. Espectroscopía Infrarroja

Los espectros obtenidos mediante la técnica de espectroscopía infrarroja se analizaron en base a los picos más representativos en longitudes de onda con intervalos de $4000-3000\text{cm}^{-1}$, $3000-2500\text{cm}^{-1}$, $2000-1500\text{cm}^{-1}$, $1500-1000\text{cm}^{-1}$ y $1000-500\text{cm}^{-1}$ con su respectiva transmitancia como podemos observar en las siguientes figuras elegidas al azar:

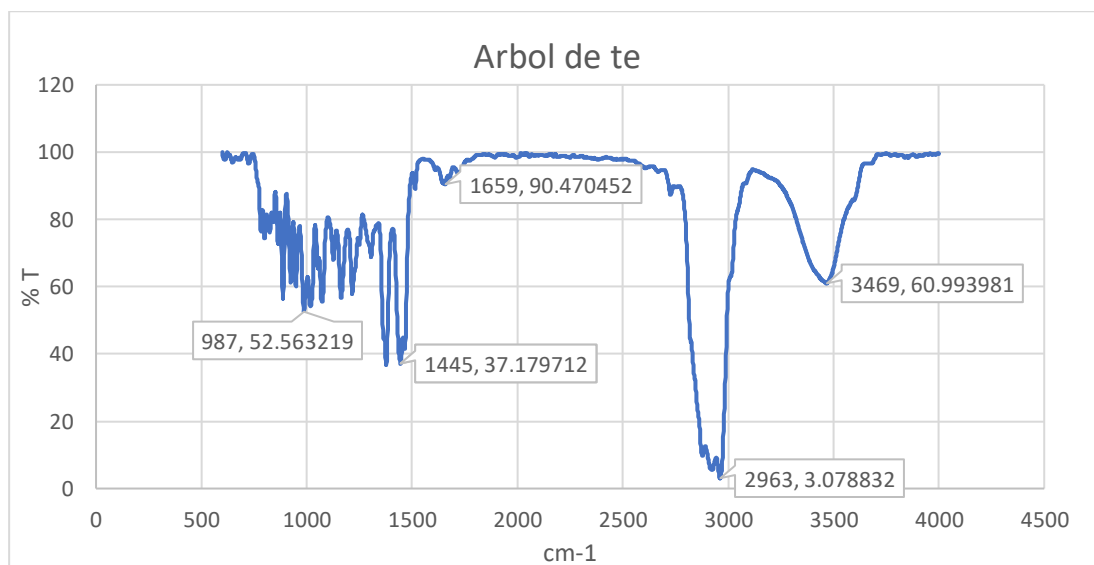


Figura 5. Espectro AE_ Árbol de te

En la figura 5 se observa el espectro infrarrojo de árbol de té donde los picos más representativos son de 987 cm^{-1} para el intervalo de $(500-1000)\text{ cm}^{-1}$ con una transmitancia de 52,56; 1445 cm^{-1} para el intervalo de $(1000-1500)\text{ cm}^{-1}$ con una transmitancia de 37,17; 1659 cm^{-1} para el intervalo de $(1500-2000)\text{ cm}^{-1}$ con una transmitancia de 90,47; 2963 cm^{-1} para el intervalo de $(2500-3000)\text{ cm}^{-1}$ con una transmitancia de 3,07 y 3469 cm^{-1} para el intervalo de $(3000-4000)\text{ cm}^{-1}$ con una transmitancia de 60,99, en el intervalo de $(2000-2500)\text{ cm}^{-1}$ no se puede apreciar ningún pico representativo por lo que no se ha tomado un valor.

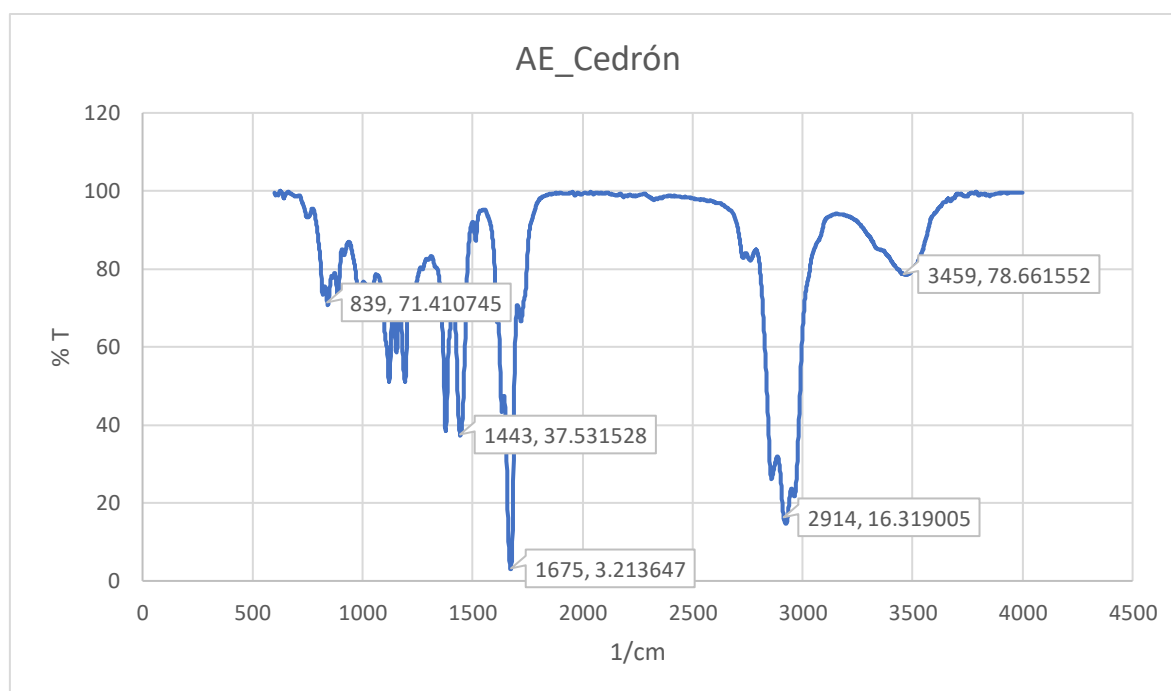


Figura 6. Espectro AE_Cedrón

En la figura 6 se observa el espectro infrarrojo de cedrón donde los picos más representativos son de 839 cm^{-1} para el intervalo de $(500-1000)\text{ cm}^{-1}$ con una transmitancia de 71,41, 1443 cm^{-1} para el intervalo de $(1000-1500)\text{ cm}^{-1}$ con una transmitancia de 37,53, 1675 cm^{-1} para el intervalo de $(1500-2000)\text{ cm}^{-1}$ con una transmitancia de 3,21, 2914 cm^{-1} para el intervalo

de (2500- 3000) cm^{-1} con una transmitancia de 16,31 y 3459 cm^{-1} para el intervalo de (3000-4000) cm^{-1} con una transmitancia de 78,66, en el intervalo de (2000-2500) cm^{-1} no se puede apreciar ningún pico por lo que no se ha tomado un valor.

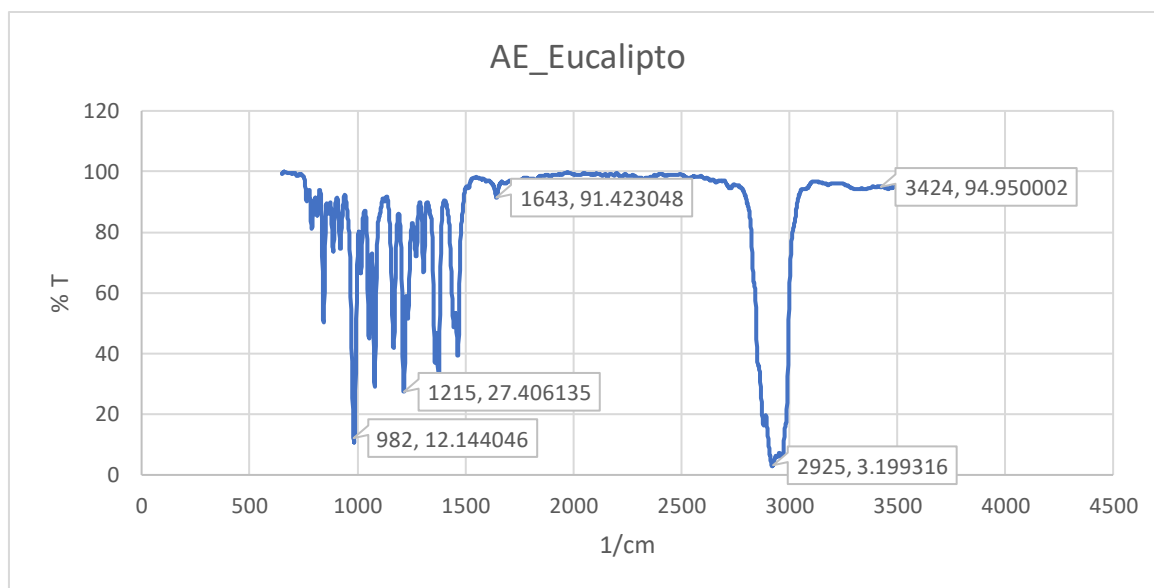


Figura 7. Espectro AE_Eucalipto

En la figura 7 se observa el espectro infrarrojo de eucalipto donde los picos más representativos son de 982 cm^{-1} para el intervalo de (500-1000) cm^{-1} con una transmitancia de 12,14; 1215 cm^{-1} para el intervalo de (1000-1500) cm^{-1} con una transmitancia de 27,40; 1643 cm^{-1} para el intervalo de (1500- 2000) cm^{-1} con una transmitancia de 91,42; 2925 cm^{-1} para el intervalo de (2500- 3000) cm^{-1} con una transmitancia de 3,19 y 3424 cm^{-1} para el intervalo de (3000-4000) cm^{-1} con una transmitancia de 94,95, en el intervalo de (2000-2500) cm^{-1} no se puede apreciar ningún pico por lo que no se ha tomado un valor.

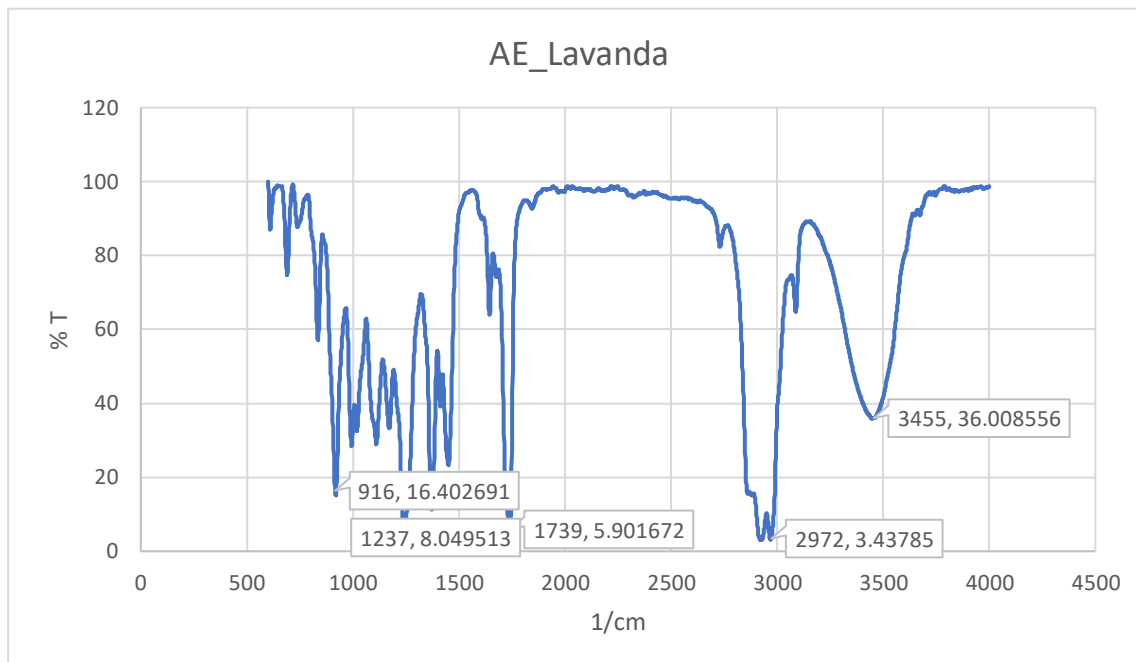


Figura 8. Espectro AE_Lavanda

En la figura 8 se observa el espectro infrarrojo de lavanda donde los picos más representativos son de 916 cm^{-1} para el intervalo de $(500-1000)\text{ cm}^{-1}$ con una transmitancia de 16,40; 1237 cm^{-1} para el intervalo de $(1000-1500)\text{ cm}^{-1}$ con una transmitancia de 8,04; 1739 cm^{-1} para el intervalo de $(1500-2000)\text{ cm}^{-1}$ con una transmitancia de 5,90; 2972 cm^{-1} para el intervalo de $(2500-3000)\text{ cm}^{-1}$ con una transmitancia de 3,43 y 3455 cm^{-1} para el intervalo de $(3000-4000)\text{ cm}^{-1}$ con una transmitancia de 36,00, en el intervalo de $(2000-2500)\text{ cm}^{-1}$ no se puede apreciar ningún pico por lo que no se ha tomado un valor.

Se ha realizado el análisis de los 49 aceites esenciales de la misma manera en la que pudimos observar en las figuras anteriores correspondientes a espectros infrarrojos y se obtuvo una base de datos con toda la información obtenida por los picos más representativos con su respectiva transmitancia obteniendo una matriz de datos, en la zona de $(2000-2500)\text{ cm}^{-1}$ no se puede

apreciar ningún pico representativo en todos aceite por lo que en ese intervalo no se tomó ningún valor.

4.2. Espectroscopía Raman

Los espectros obtenidos mediante la técnica de espectroscopía raman se analizaron en base a los picos más representativos en longitudes de onda con intervalos de (0-500, 500-1000, 1000-1500 y 1500-2000) cm^{-1} con su respectiva intensidad raman, como podremos observar en las siguientes figuras elegidas al azar:

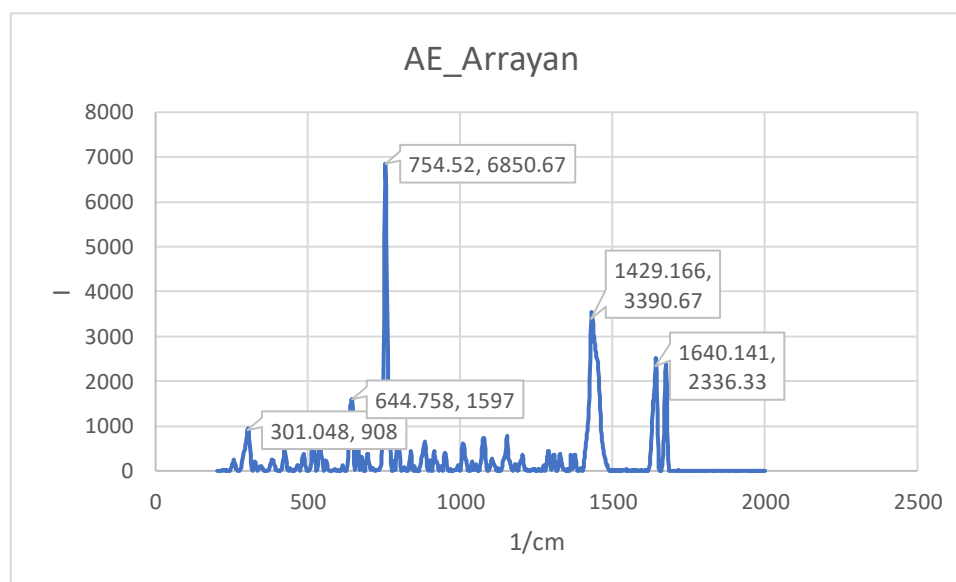


Figura 9. Espectro Raman AE_Arrayan

En la figura 9 se observa el espectro raman de arrayan donde los picos más representativos son de $301,048\text{ cm}^{-1}$ para el intervalo de $(0-500)\text{ cm}^{-1}$ con una intensidad raman de 908 , $754,52\text{ cm}^{-1}$ para el intervalo de $(500- 1000)\text{ cm}^{-1}$ con una intensidad raman de 6850,67, $1429,166\text{ cm}^{-1}$ para el intervalo de $(1000-1500)\text{ cm}^{-1}$ con una intensidad raman de 3390,67, y $1640,141\text{ cm}^{-1}$ para el intervalo de $(1500-2000)\text{ cm}^{-1}$ con una intensidad raman de 2336,33.

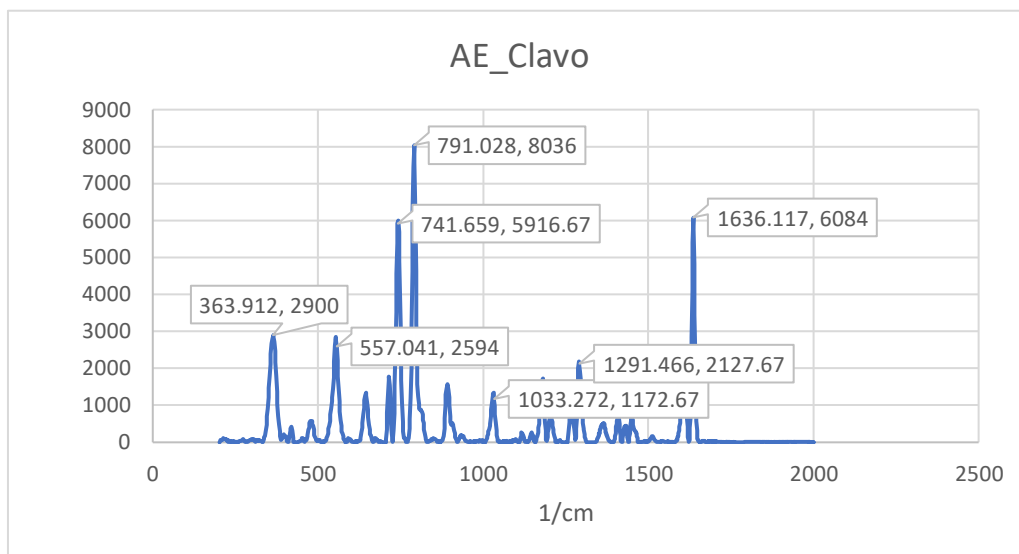


Figura 10. Espectro Raman AE_Clavo

En la figura 10 se observa el espectro raman de clavo donde los picos más representativos son de $363,91 \text{ cm}^{-1}$ para el intervalo de $(0-500) \text{ cm}^{-1}$ con una intensidad raman de 2900, $791,03 \text{ cm}^{-1}$ para el intervalo de $(500- 1000) \text{ cm}^{-1}$ con una intensidad raman de 8036, $1291,47 \text{ cm}^{-1}$ para el intervalo de $(1000-1500) \text{ cm}^{-1}$ con una intensidad raman de 2127,67 y $1636,12 \text{ cm}^{-1}$ para el intervalo de $(1500-2000) \text{ cm}^{-1}$ con una intensidad raman de 6084.

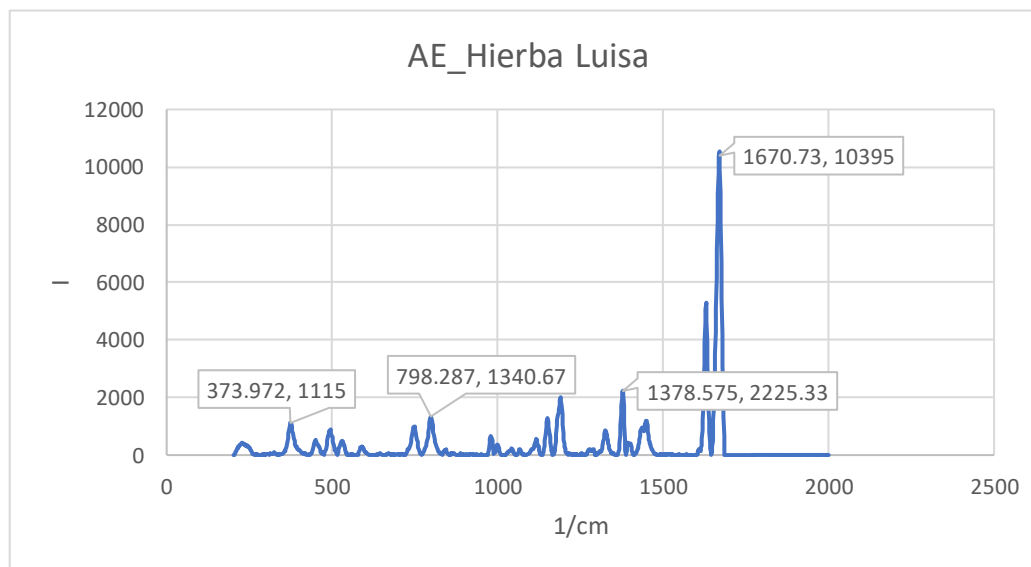


Figura 11. Espectro Raman AE_Hierba Luisa

En la figura 11 se observa el espectro raman de hierba luisa donde los picos más representativos son de $373,97\text{ cm}^{-1}$ para el intervalo de $(0-500)\text{ cm}^{-1}$ con una intensidad raman de $1115,798,29\text{ cm}^{-1}$ para el intervalo de $(500-1000)\text{ cm}^{-1}$ con una intensidad raman de $1340,67, 1378,57\text{ cm}^{-1}$ para el intervalo de $(1000-1500)\text{ cm}^{-1}$ con una intensidad raman de $2225,33$ y $1670,73\text{ cm}^{-1}$ para el intervalo de $(1500-2000)\text{ cm}^{-1}$ con una intensidad raman de 10395 .

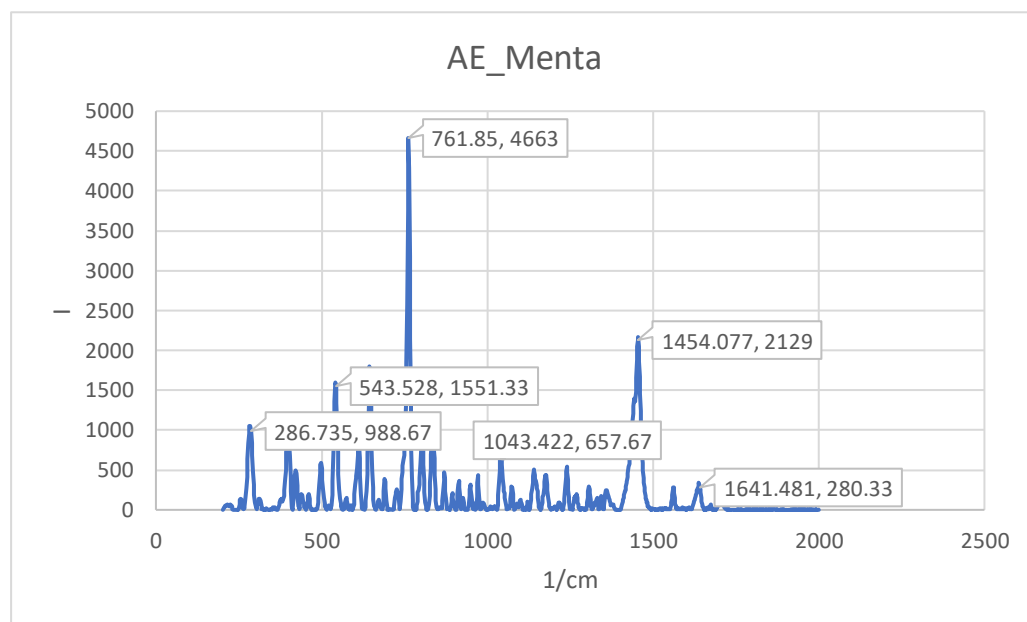


Figura 12. Espectro Raman AE_Menta

En la figura 12 se observa el espectro raman de menta donde los picos más representativos son de $286,73\text{ cm}^{-1}$ para el intervalo de $(0-500)\text{ cm}^{-1}$ con una intensidad raman de $988,67, 761,85\text{ cm}^{-1}$ para el intervalo de $(500-1000)\text{ cm}^{-1}$ con una intensidad raman de $4663, 1454,07\text{ cm}^{-1}$ para el intervalo de $(1000-1500)\text{ cm}^{-1}$ con una intensidad raman de 2129 y $1641,48\text{ cm}^{-1}$ para el intervalo de $(1500-2000)\text{ cm}^{-1}$ con una intensidad raman de $280,33$.

Se ha realizado el análisis de los 49 aceites esenciales de la misma manera en la que pudimos observar en las figuras anteriores correspondientes a espectroscopía Raman y se obtuvo una base

de datos con toda la información obtenida por los picos más representativos de cada espectro con su respectiva intensidad Raman obteniendo así una matriz de datos, en algunos casos no se ha podido identificar ningún pico en ciertos intervalos de los espectros raman por lo que no se ha tomado un valor como.

4.3. Análisis de componentes principales ACP

Para el análisis de componentes principales ACP se ha tomado en cuenta las matrices correspondientes a la base de datos de espectroscopía infrarroja y Raman. Para realizar el ACP se ha ocupado el software Minitab 15 el cual puede calcular directamente la matriz de correlación y las gráficas donde se puede observar la clasificación deseada en torno a la correlación de los datos de los dos componentes principales (variables).

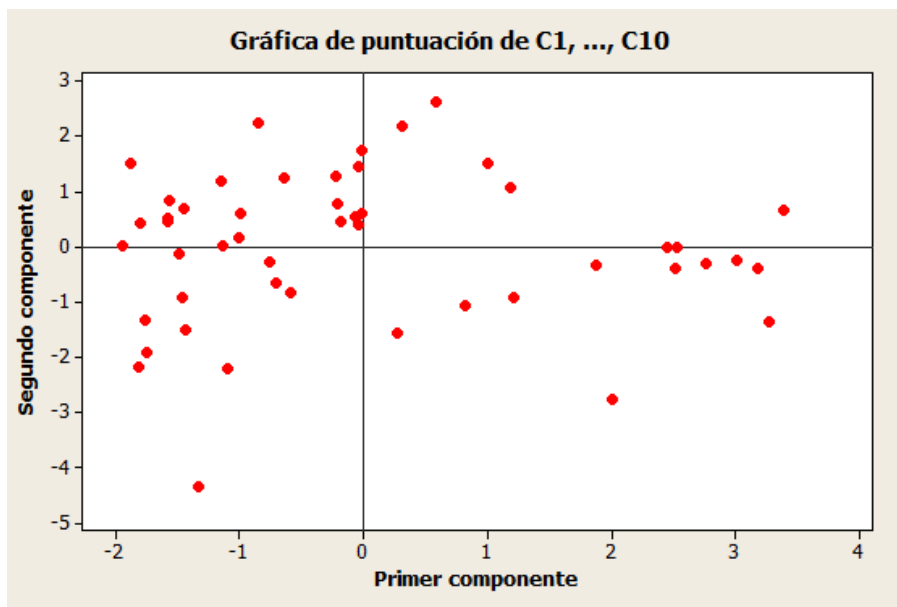


Figura 13. Componentes principales Espectroscopía infrarroja

La figura 13 nos muestra cómo se correlacionan los datos provenientes de la espectroscopía infrarroja en donde podemos observar una agrupación de puntos (aceites esenciales) que tienen variables en común para poder proponer una clasificación.

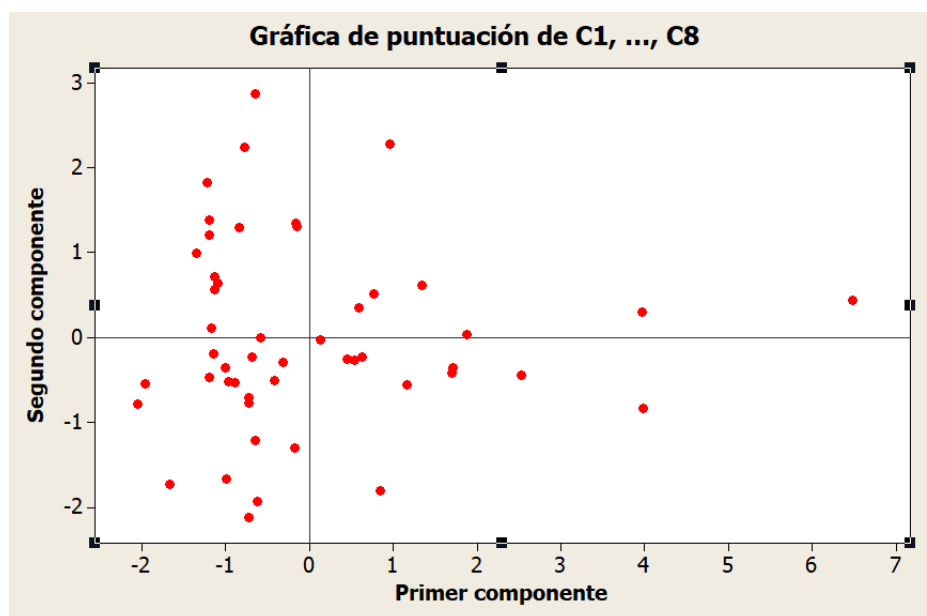


Figura 14. Grafica ACP Espectroscopía Raman

La figura 14 nos muestra cómo se correlacionan los datos provenientes de la espectroscopía raman en donde podemos observar una agrupación de puntos (aceites esenciales) que tienen variables en común para poder proponer una clasificación.

Para poder establecer una clasificación de los aceites esenciales podemos establecerlos por cuadrantes como se muestra en la figura 13 y figura 14 obteniendo así una clasificación de acuerdo a la correlación que tengan estos valores según sus variables.

4.3.1. Clasificación ACP de espectroscopía infrarroja

En la figura 15 podemos observar una correlación que existe entre los datos, cada punto pertenece a un aceite esencial que se encuentra ordenado según en la base de datos como se muestra en la tabla 3.

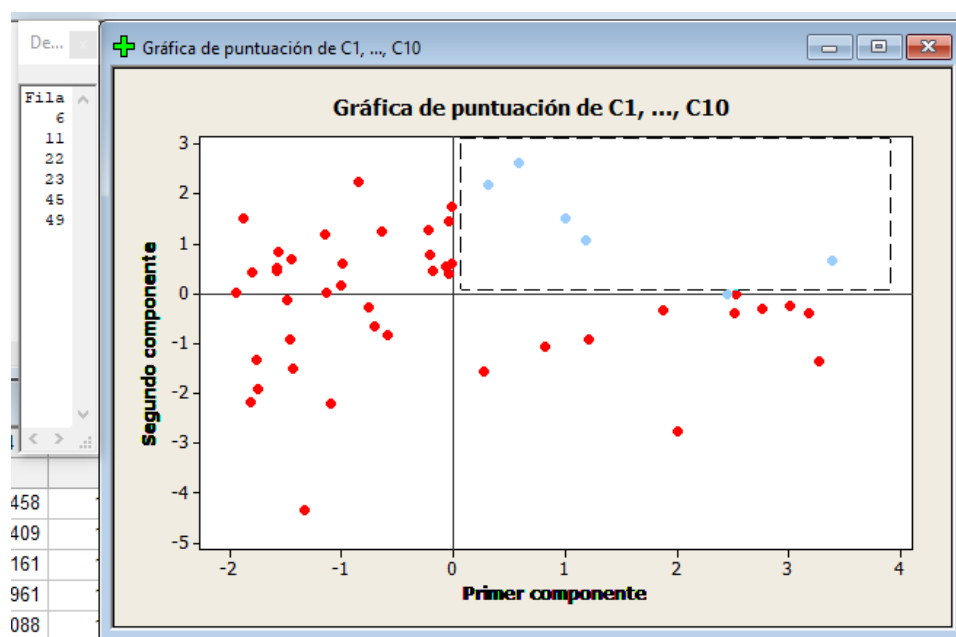


Figura 15. Clasificación infrarroja ACP cuadrante 1

En la tabla 4 se observa la correlación que existe en el primer cuadrante de los aceites esenciales mediante el análisis de componentes principales, por lo cual se ha propuesto la siguiente clasificación.

Tabla 4

Clasificación infrarroja ACP cuadrante 1

Nº	Nombre del Aceite esencial
6	AE_bergamota
11	AE_cedrón
22	AE_hierba buena
23	AE_hierba luisa
45	AE_sándalo
49	AE_ylang_ylang

En la figura 16 podemos observar una correlación que existe entre los datos, cada punto pertenece a un aceite esencial que se encuentra ordenado según en la base de datos como se muestra en la tabla 3.

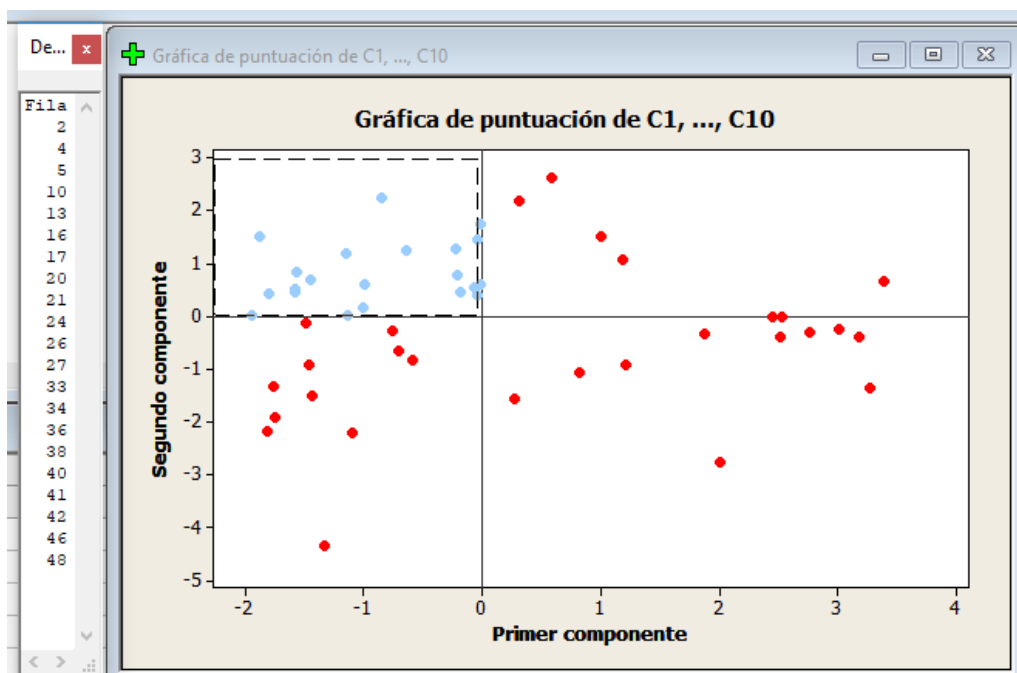


Figura 16. Clasificación infrarroja ACP cuadrante 2

En la tabla 5 se observa la correlación que existe en el segundo cuadrante de los aceites esenciales mediante el análisis de componentes principales, por lo cual se ha propuesto la siguiente clasificación.

Tabla 5

Clasificación infrarroja ACP cuadrante 2

Nº	Nombre del Aceite esencial
2	AE_apio
4	AE_arrayan
5	AE_azahar
10	AE_cedro
13	AE_citronella

CONTINÚA →

16	AE_curcuma
17	AE_enebro
20	AE_eucalipto limonero
21	AE_geranio
24	AE_jengibre
26	AE_lima
27	AE_limón
33	AE_naranja
34	AE_olíbano
36	AE_pachullí
38	AE_palo santo
40	AE_pimienta negra
41	AE_pino
42	AE_romero
46	AE_muña
48	AE_toronja

En la figura 17 podemos observar una correlación que existe entre los datos, cada punto pertenece a un aceite esencial que se encuentra ordenado según en la base de datos como se muestra en la tabla 3.

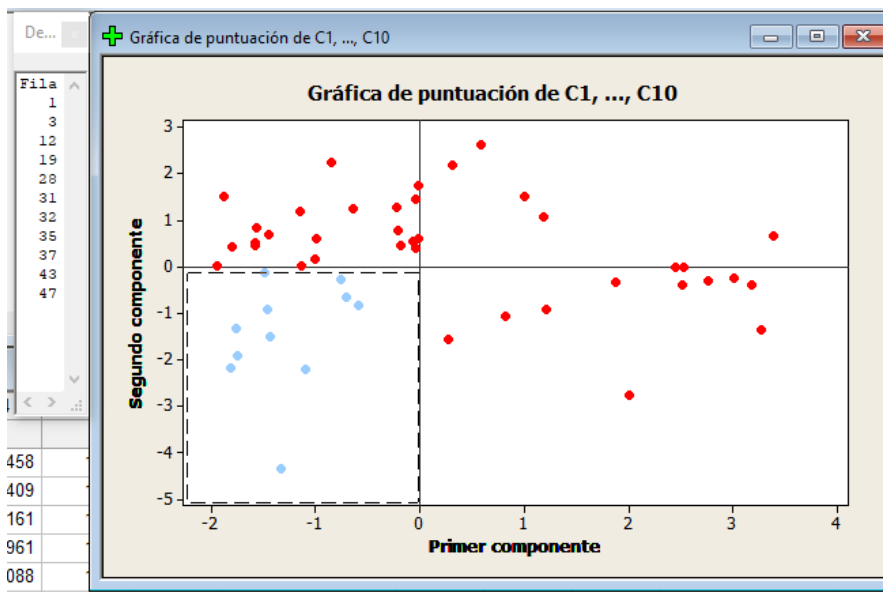


Figura 17. Clasificación infrarroja ACP cuadrante 3

En la tabla 6 se observa la correlación que existe en el tercer cuadrante de los aceites esenciales mediante el análisis de componentes principales, por lo cual se ha propuesto la siguiente clasificación.

Tabla 6

Clasificación infrarroja ACP cuadrante 3

Nº	Nombre del Aceite esencial
1	AE_albahaca
3	AE_árbol de té
12	AE_ciprés
19	AE_eucalipto
28	AE_mandarina
31	AE_menta
32	AE_molle
35	AE_orégano
37	AE_palo de rosa
43	AE_rosa
47	AE_tomillo

En la figura 18 podemos observar una correlación que existe entre los datos, cada punto pertenece a un aceite esencial que se encuentra ordenado según en la base de datos como se muestra en la tabla 3.

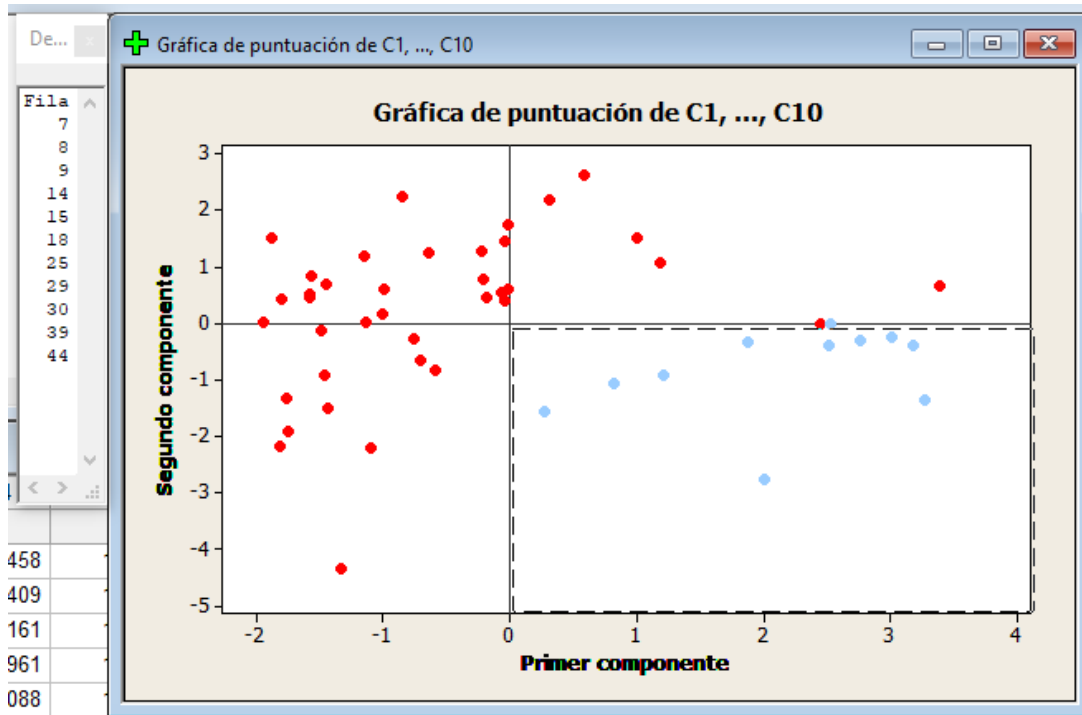


Figura 18. Clasificación infrarroja ACP cuadrante 4

En la tabla 7 se observa la correlación que existe en el cuarto cuadrante de los aceites esenciales mediante el análisis de componentes principales, por lo cual se ha propuesto la siguiente clasificación.

Tabla 7

Clasificación infrarroja ACP cuadrante 4

Nº	Nombre del Aceite esencial
7	AE_canela
8	AE_canelo
9	AE_cardamamo
14	AE_clavo
15	AE_comino
18	AE_eneldo
25	AE_lavanda

CONTINÚA →

29	AE_manzanilla
30	AE_mejorana
39	AE_petitgrain
44	AE_salvia clara

4.3.2. Clasificación ACP de espectroscopía Raman

En la figura 19 podemos observar una correlación que existe entre los datos, cada punto pertenece a un aceite esencial que se encuentra ordenado según en la base de datos como se muestra en la tabla 3.

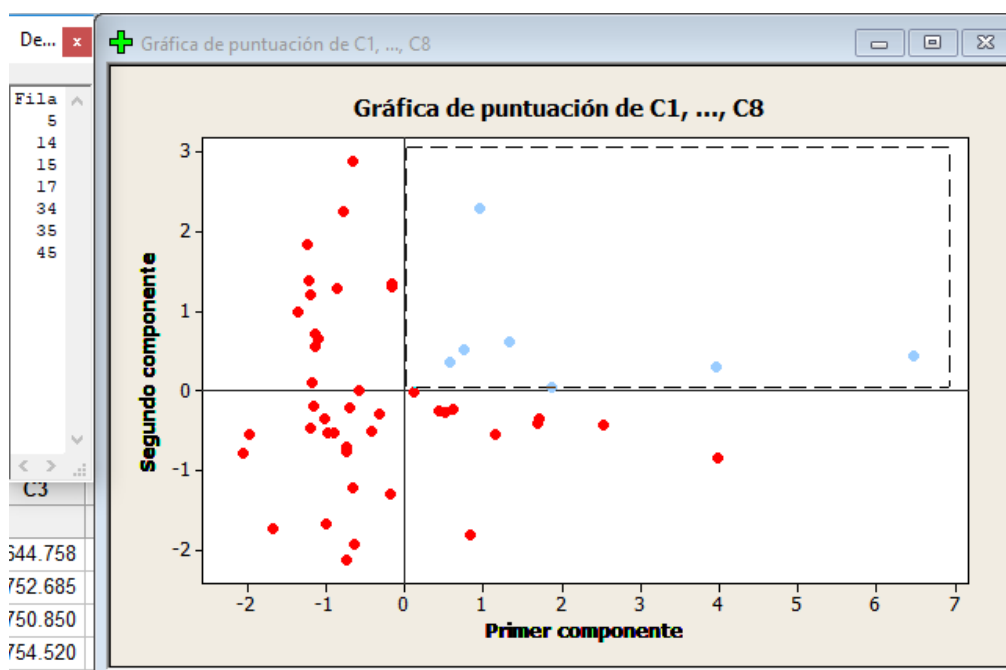


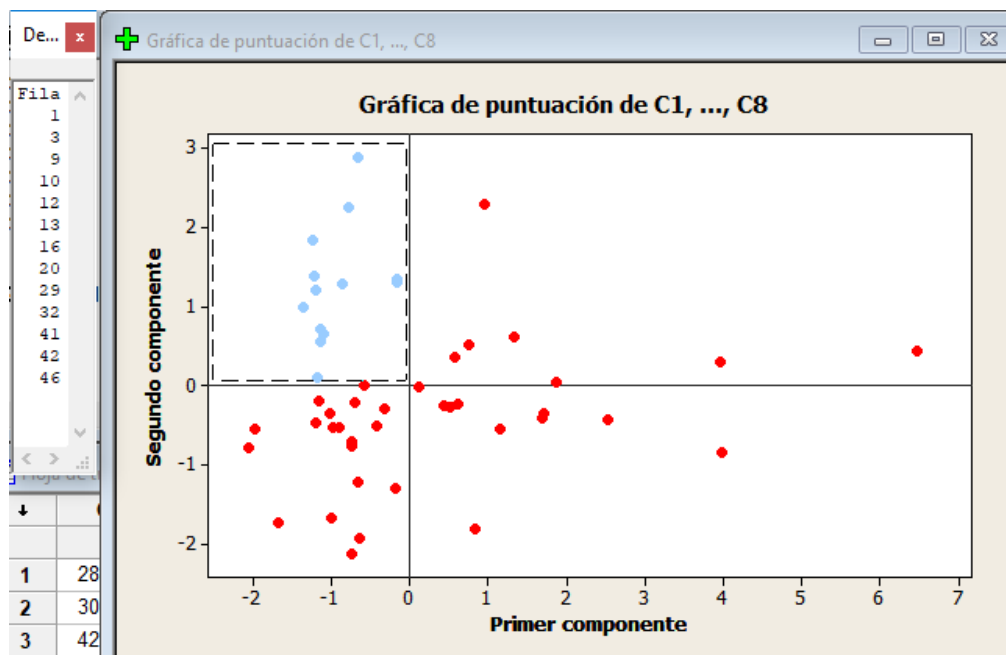
Figura 19. Clasificación Raman ACP cuadrante 1

En la tabla 8 se observa la correlación que existe en el primer cuadrante de los espectros Raman de los aceites esenciales mediante el análisis de componentes principales, por lo cual se ha propuesto la siguiente clasificación.

Tabla 8*Clasificación Raman ACP cuadrante 1*

N°	Nombre del Aceite esencial
5	AE_azahar
14	AE_clavo
15	AE_comino
17	AE_enebro
34	AE_olibano
35	AE_orégano
45	AE_sándalo

En la figura 20 podemos observar una correlación que existe entre los datos, cada punto pertenece a un aceite esencial que se encuentra ordenado según en la base de datos como se muestra en la tabla 3.

**Figura 20.** Clasificación Raman ACP cuadrante 2

En la tabla 9 se observa la correlación que existe en el segundo cuadrante de los espectros Raman de los aceites esenciales mediante el análisis de componentes principales, por lo cual se ha propuesto la siguiente clasificación.

Tabla 9

Clasificación Raman ACP cuadrante 2

N°	Nombre del Aceite esencial
1	AE_albahaca
3	AE_árbol de té
9	AE_cardamamo
10	AE_cedro
12	AE_ciprés
13	AE_citronella
16	AE_curcuma
20	AE_eucalipto limonero
29	AE_manzanilla
32	AE_molle
41	AE_pino
42	AE_romero
46	AE_muña

En la figura 21 podemos observar una correlación que existe entre los datos, cada punto pertenece a un aceite esencial que se encuentra ordenado según en la base de datos como se muestra en la tabla 3.

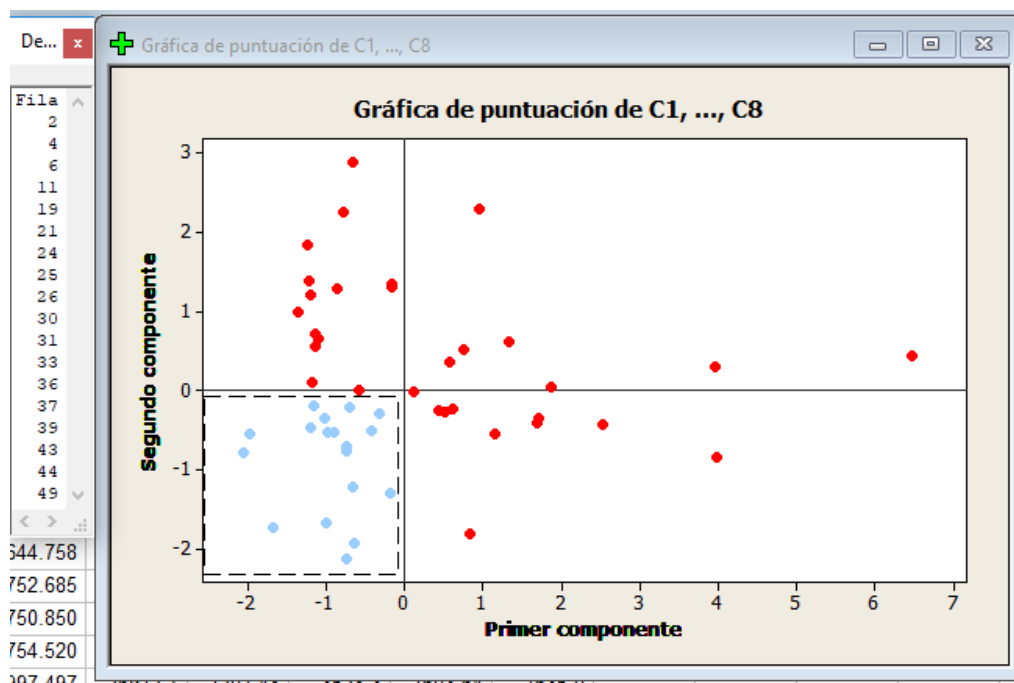


Figura 21. Clasificación Raman ACP cuadrante 3

En la tabla 10 se observa la correlación que existe en el tercer cuadrante de los espectros Raman de los aceites esenciales mediante el análisis de componentes principales, por lo cual se ha propuesto la siguiente clasificación.

Tabla 10

Clasificación Raman ACP cuadrante 3

Nº	Nombre del Aceite esencial
2	AE_apio
4	AE_arrayan
6	AE_bergamota
11	AE_cedrón
19	AE_eucalipto
21	AE_geranio
24	AE_jengibre

CONTINÚA 

25	AE_lavanda
26	AE_lima
30	AE_mejorana
31	AE_menta
33	AE_naranja
36	AE_pachulli
37	AE_palo de rosa
39	AE_petitgrain
43	AE_rosa
44	AE_salvia clara
49	AE_ylang_ylang

En la figura 22 podemos observar una correlación que existe entre los datos, cada punto pertenece a un aceite esencial que se encuentra ordenado según en la base de datos como se muestra en la tabla 3.

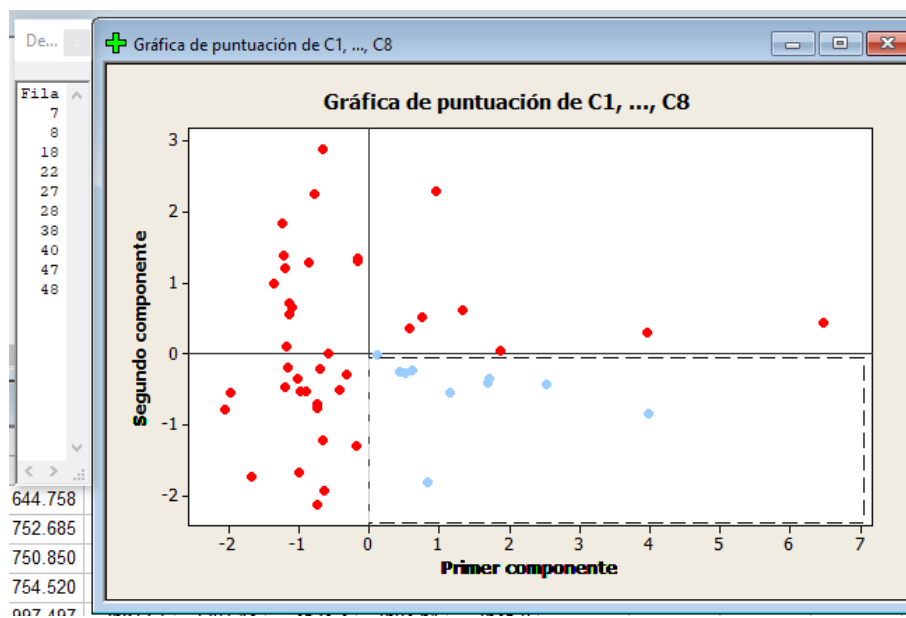


Figura 22. Clasificación Raman ACP cuadrante 4

En la tabla 11 se observa la correlación que existe en el cuarto cuadrante de los espectros Raman de los aceites esenciales mediante el análisis de componentes principales, por lo cual se ha propuesto la siguiente clasificación.

Tabla 11

Clasificación Raman ACP cuadrante 4


N°	Nombre del Aceite esencial
7	AE_canela
8	AE_canelo
18	AE_eneldo
22	AE_hierba buena
27	AE_limón
28	AE_mandarina
38	AE_palo santo
40	AE_pimienta negra
47	AE_tomillo
48	AE_toronja

4.4. Comparación de Análisis de Componentes Principales

En tabla 12 se comparan los valores por cuadrantes de los aceites esenciales con las técnicas de espectroscopía infrarroja y Raman. Se puede apreciar que la mayoría de aceites esenciales son diferentes en los 4 cuadrantes, esto se debe a que el ACP depende del número y tipo de variables con las que se trabaje y en las técnicas de espectroscopía infrarroja y espectroscopía Raman son diferentes.

Tabla 12.*Comparación por cuadrantes*

Primer cuadrante				Segundo Cuadrante			
Espectroscopía infrarroja		Espectroscopía Raman		Espectroscopía infrarroja		Espectroscopía Raman	
N°	Nombre del Aceite esencial	N°	Nombre del Aceite esencial	N°	Nombre del Aceite esencial	N°	Nombre del Aceite esencial
6	AE_bergamota	5	AE_azahar	2	AE_apio	1	AE_albahaca
11	AE_cedrón	14	AE_clavo	4	AE_arrayan	3	AE_árbol de té
22	AE_hierba buena	15	AE_comino	5	AE_azahar	9	AE_cardamamo
23	AE_hierba luisa	17	AE_enebro	10	AE_cedro	10	AE_cedro
45	AE_sándalo	34	AE_olíbano	13	AE_citronella	12	AE_ciprés
49	AE_ylang_ylang	35	AE_orégano	16	AE_curcuma	13	AE_citronella
		45	AE_sándalo	17	AE_enebro	16	AE_curcuma
				20	AE_eucalipto limonero	20	AE_eucalipto limonero
				21	AE_geranio	29	AE_manzanilla
				24	AE_jengibre	32	AE_molle
				26	AE_lima	41	AE_pino
				27	AE_limón	42	AE_romero
				33	AE_naranja	46	AE_muña
				34	AE_olíbano		
				36	AE_pachullí		
				38	AE_palo santo		
				40	AE_pimienta negra		
				41	AE_pino		
				42	AE_romero		
				46	AE_muña		
				48	AE_toronja		

CONTINÚA 

Tercer Cuadrante				Cuarto Cuadrante			
Espectroscopía infrarroja		Espectroscopía Raman		Espectroscopía infrarroja		Espectroscopía Raman	
N°	Nombre del Aceite esencial	N°	Nombre del Aceite esencial	N°	Nombre del Aceite esencial	N°	Nombre del Aceite esencial
1	AE_albahaca	2	AE_apio	7	AE_canela	7	AE_canela
3	AE_árbol de té	4	AE_arrayan	8	AE_canelo	8	AE_canelo
12	AE_ciprés	6	AE_bergamota	9	AE_cardamamo	18	AE_eneldo
19	AE_eucalipto	11	AE_cedrón	14	AE_clavo	22	AE_hierba buena
28	AE_mandarina	19	AE_eucalipto	15	AE_comino	27	AE_limón
31	AE_menta	21	AE_geranio	18	AE_eneldo	28	AE_mandarina
32	AE_molle	24	AE_jengibre	25	AE_lavanda	38	AE_palo santo
35	AE_orégano	25	AE_lavanda	29	AE_manzanilla	40	AE_pimienta negra
37	AE_palo de rosa	26	AE_lima	30	AE_mejorana	47	AE_tomillo
43	AE_rosa	30	AE_mejorana	39	AE_petitgrain	48	AE_toronja
47	AE_tomillo	31	AE_menta	44	AE_salvia clara		
		33	AE_naranja				
		36	AE_pachulli				
		37	AE_palo de rosa				
		39	AE_petitgrain				
		43	AE_rosa				
		44	AE_salvia clara				
		49	AE_ylang_ylang				

CAPÍTULO V

5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

5.1. CONCLUSIONES

La matriz correspondiente a la base de datos infrarrojo representa los picos más representativos de los 49 aceites esenciales en donde se trabajó en las siguientes zonas: huella (0-1500) cm^{-1} , enlaces dobles (1500-2000) cm^{-1} , enlaces simples (2500-4000) cm^{-1} cada uno con sus respectivas transmitancias. En todos los aceites esenciales que se analizaron en este trabajo de investigación se evidencio picos en todas las zonas excepto en la zona de enlaces triples de (2000-2500) cm^{-1} que no se evidencio ningún pico representativo.

La matriz correspondiente a la base de datos Raman representa los picos más representativos de los 49 aceites esenciales en donde se trabajó en las siguientes zonas: (0-500) cm^{-1} , (500-1000) cm^{-1} , (1000-1500) cm^{-1} , (1500-2000) cm^{-1} cada uno con su respectiva intensidad Raman. En todos los aceites esenciales que se analizaron en este trabajo de investigación se evidencio picos en todas las zonas.

La propuesta de clasificación de aceites esenciales está en función de la correlación de los datos tanto como de los espectros infrarrojos y espectros Raman independientemente, en donde se diferenció que para cata técnica espectroscopía hace referencia una clasificación diferente.

En las tablas 4,5,6 y 7 se observan los valores de los puntos correlacionados en la gráfica 3 en donde propone la clasificación de la técnica de espectroscopía infrarroja mediante el ACP por cuadrantes debido a la correlación que existe entre las variables entre todos los aceites esenciales.

En las tablas 8, 9, 10 y 11 se observan los valores de los puntos correlacionados en la gráfica 14 en donde propone la clasificación de la técnica de espectroscopía Raman mediante el ACP por cuadrantes debido a la correlación que existe entre las variables entre todos los aceites esenciales.

Los aceites esenciales se encuentran conformados por varios compuestos que tienen una estructura basada en hidrógeno, carbono, y oxígeno. El tipo de enlace que se forme entre ellos dependen de como estos elementos se combinan a través de fuerzas intermoleculares, por tal razón se ha aplicado las técnicas de espectroscopía ya que nos permiten identificar los grupos funcionales presentes en las muestras.

5.2. RECOMENDACIONES

Para la recolección de datos referente a los picos más representativos se recomienda tomar los picos que tengan una transmitancia en el caso de espectroscopía infrarroja y una intensidad Raman en el caso de espectroscopía Raman que pueda ser apreciable.

En el análisis de componentes principales, la correlación de los datos depende de las variables consideradas por lo que se recomienda trabajar con el mayor número de variables para poder obtener una mejor correlación ya que cada elemento interactúa con todas las variables.

Continuar con el estudio de los aceites esenciales mediante el ACP con el fin de obtener un modelo que pueda predecir los diferentes aceites esenciales según sea la necesidad.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Amóros, I. (2017). PCA-Gapminder, datos multivariantes en una nueva visión. *Universidad de Murcia*.
- Barraza, G., De la Rosa, L., Martinez, A., Castillo, H., Cotte, M., & Alvarez, E. (2013). La microespectroscopía de infrarrojo con transformada de Fourier (FTIRM) en el estudio de sistemas biológicos. *Revista Lationamericana de la Química*, 11.
- Bro, R., & Smilde, E. (2014). Análisis de componentes principales. *Royal Society of chemistry*, 2812-2831.
- Cadavid, G. D. (2010). *Aceites Esenciales*. Bogota.
- De la Fuente, S. (2011). *Componentes Principales*. Madrid: UNAM.
- Del Valle, H., & Zambrano, J. (2015). *Extracción de aceites esenciales de plantas autóctonas menta (Mentha Piperita L.), palo santo (Bursera Graveolens), hierba luisa (Cimbopongón Citratus) de la provincia de Manabí, con potenciales de industrialización*. Portoviejo: Universidad Tecnica de Manabi.
- Downey, G. (2016). *Advances in Food Authenticity Testing*. Woodhead Publishing.
- Escudero, A. (1999). *Las Plantas de Extractos*. Madrid: MELISSA.SA.
- Galarza, D., & Marcial, P. (2014). *Obtención de los derivados de la flor de cananga odorata (YLANG-YLANG) para diversas aplicaciones en la industria de las esencias y saborizantes*. Guayaquil: Universidad de Guayaquil.

- Garcia, A. (2018). *Liceo AGB*. Recuperado el 08 de Enero de 2019, de <https://www.liceoagb.es/quimiorg/docencia/textos/TEMA5.pdf>
- Macho, S. (2002). *Metodologías analíticas basadas en espectroscopía de infrarrojo y calibración multivariante. aplicación a la industria petroquímica*. Tarragona: Imperrial Tarraco.
- Martinez, A. (2003). *Aceites Esenciales*. Medellin.
- Mondragón, P. (2017). *Espectroscopía de Infrarrojo para todos*. Guadalajara: D.R. Centro de Investigación y Asistencia en Tecnología y Diseño del Estado.
- Pamies, C. (2004). *Los Aceites Esenciales*. España: HEVEA.
- Peña, D. (2002). *Análisis de datos multivariantes*. Mc Graw Hill.
- Pereira, L., Gueda, S., & Ribeiro-Claro, P. (2013). Analysis by Vibrational Spectroscopy of Seaweed Polysaccharides with Potential Use in Food Pharmaceutical and Cosmetic Industries. *International Journal of Carbohydrate Chemistry*, 7.
- Sánchez, E. (2014). *Construcción de una base de datos de aceites de oliva virgen extra andaluces basada en técnicas de IR, RMN, Raman e IRMS*. Cordoba: Servicio de Publicaciones de la Universidad de Córdoba.
- Serradell, R. (2009). *Metodología teórico-experimental para la medida indirecta del índice de refracción índice de pigmentos*. Cataluña.
- Stashenko, E. (2009). *Uso Industrial de Plantas Aromáticas y Medicinales*. Santander.
- Teresa, L. M. (2010). *Aceites ecenciales para recuperar la vitalidad, el bienestar, la belleza*. Vecchi S.A.

ANEXOS



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

**DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA CARRERA DE
INGENIERÍA EN PETROQUÍMICA**

CERTIFICACIÓN

Se certifica que el presente trabajo fue desarrollado por el señor: **JONATHAN ANGEL
PESANTEZ QUINTANILLA**

Latacunga a los 03 días del mes de julio del 2019


DR. PH.D. Roman Nicolay Rodriguez
Maccher
DIRECTOR DEL PROYECTO


DR. PH.D. Roman Nicolay Rodriguez
Maccher
DIRECTOR DE CARRERA


Abg. Darwin Alban
SECRETARIO ACADEMICO