

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS ESPE-L

CARRERA DE INGENIERÍA 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



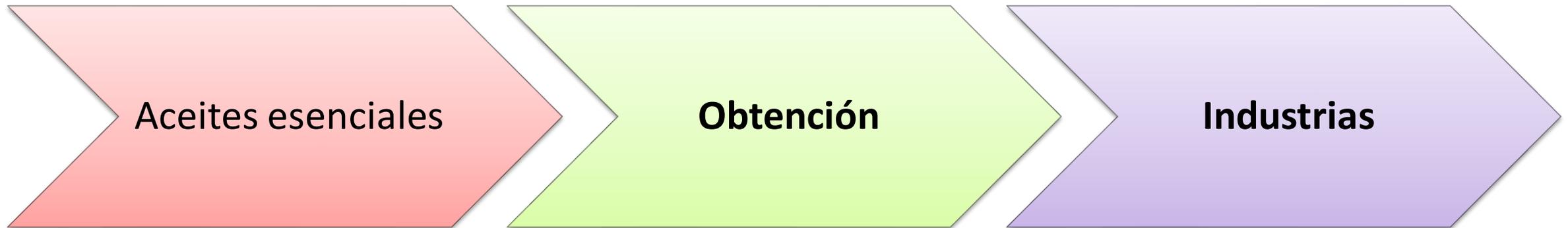
INTRODUCCIÓN

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

INTRODUCCIÓN



INTRODUCCIÓN



Flores (rosa, azahar, lirio, ylang- ylang)



Semillas (coriandro, cilantro, anís, cardamomo)



Hojas y tallos (albahaca, tomillo, menta, lavanda, orégano)



Corteza (canela)



Madera (pino, sándalo)



Rizomas (jengibre, cúrcuma)

OBJETIVOS

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 espectroscopia de Raman y espectroscopia infrarroja.

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).

INTRODUCCIÓN

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

METODOLOGÍA

Materiales

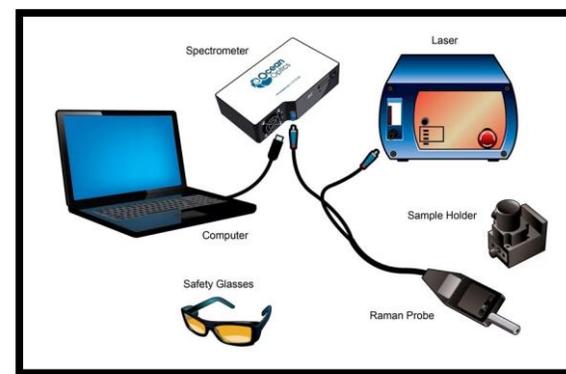
- 49 aceites esenciales
- Pipeta graduada de 10 μ l
- Papel absorbente.
- Guantes quirúrgicos.

N°	Nombre del Aceite esencial	N°	Nombre del Aceite esencial	N°	Nombre del Aceite esencial
1	AE_albahaca	18	AE_eneldo	35	AE_orégano
2	AE_apio	19	AE_eucalipto	36	AE_pachullí
3	AE_árbol de té	20	AE_eucalipto limonero	37	AE_palo de rosa
4	AE_arrayan	21	AE_geranio	38	AE_palo santo
5	AE_azahar	22	AE_hierba buena	39	AE_petitgrain
6	AE_bergamota	23	AE_hierba luisa	40	AE_pimienta negra
7	AE_canela	24	AE_jengibre	41	AE_pino
8	AE_canelo	25	AE_lavanda	42	AE_romero
9	AE_cardamamo	26	AE_lima	43	AE_rosa
10	AE_cedro	27	AE_limón	44	AE_salvia clara
11	AE_cedrón	28	AE_mandarina	45	AE_sándalo
12	AE_ciprés	29	AE_manzanilla	46	AE_muña
13	AE_citronella	30	AE_mejorana	47	AE_tomillo
14	AE_clavo	31	AE_menta	48	AE_toronja
15	AE_comino	32	AE_molle	49	AE_ylang_ylang
16	AE_curcuma	33	AE_naranja		
17	AE_enebro	34	AE_olíbano		

METODOLOGÍA

Equipos

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



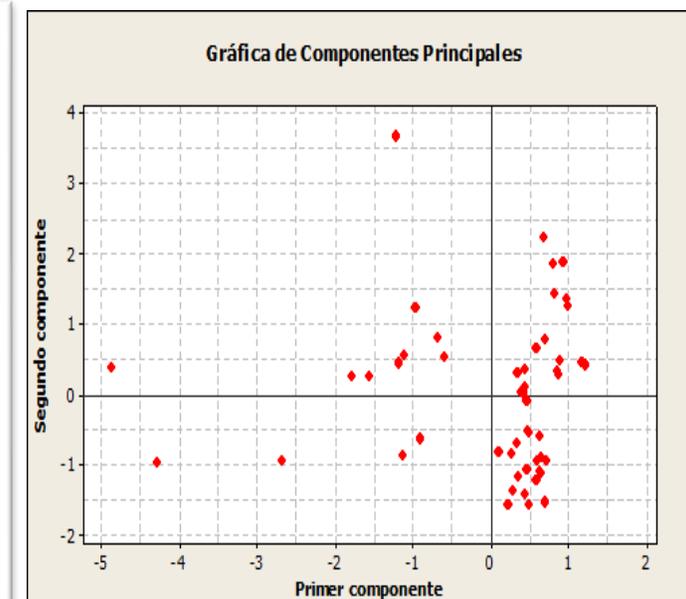
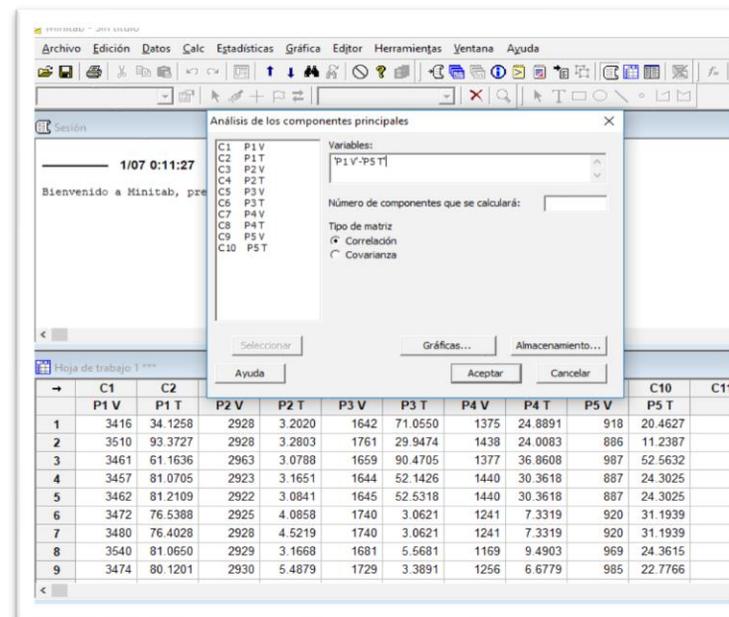
METODOLOGÍA

Análisis de Componentes Principales

Minitab

		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	$n_3 * p_1$	$n_3 * p_2$	$n_3 * p_3$

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



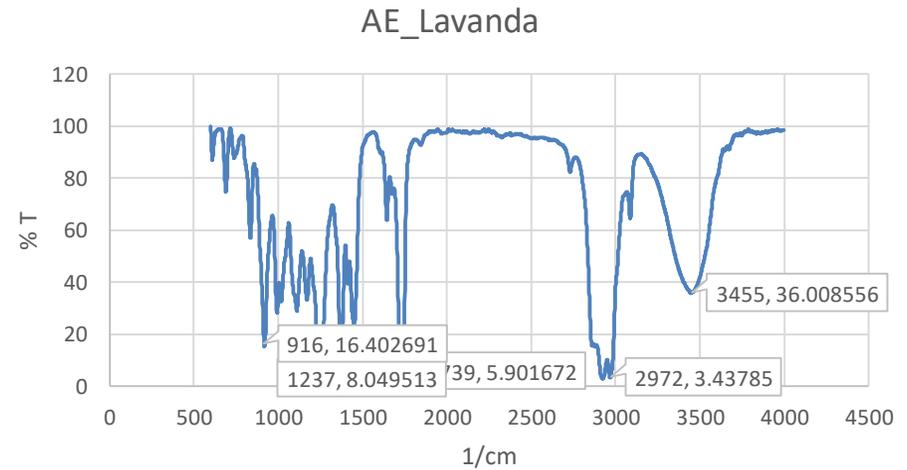
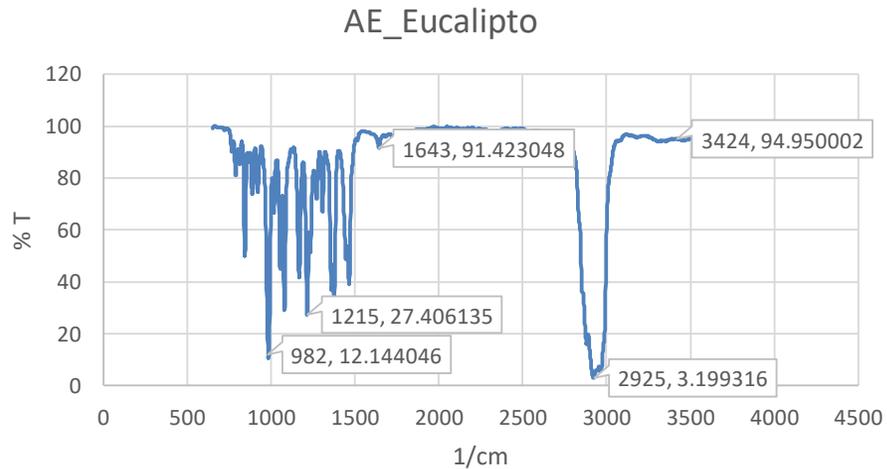
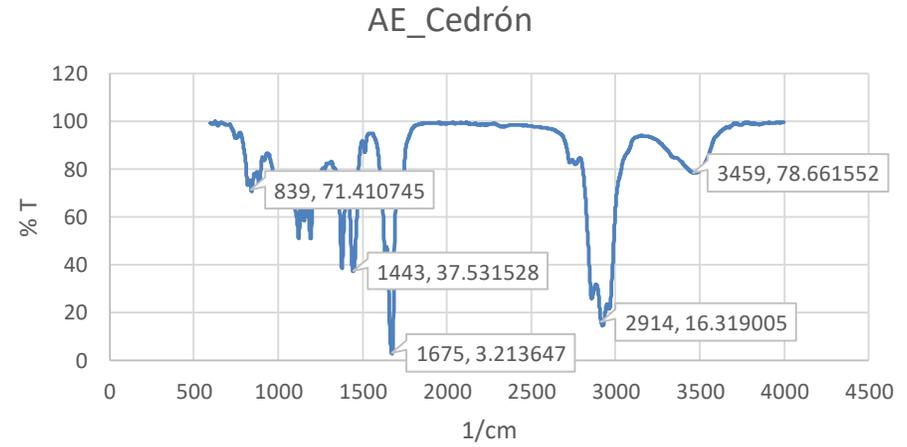
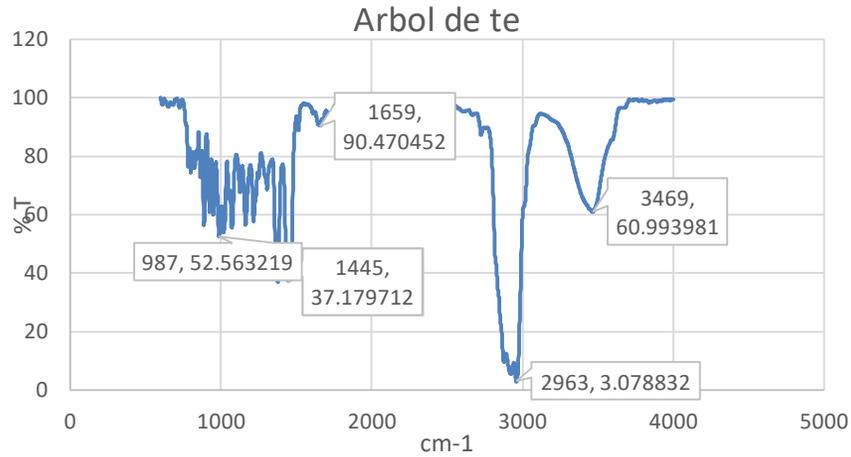
INTRODUCCIÓN

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Espectros infrarrojos



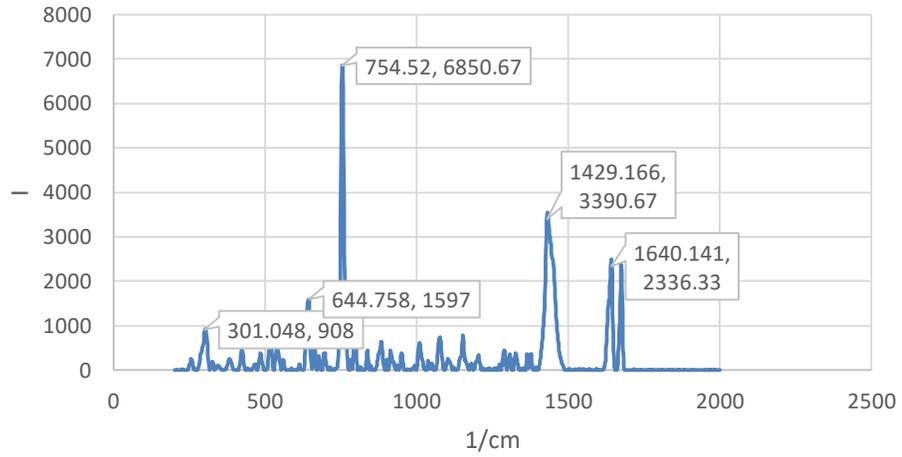
Base de datos espectros infrarrojo

BASE DE DATOS ESPECTROS INFRARROJO

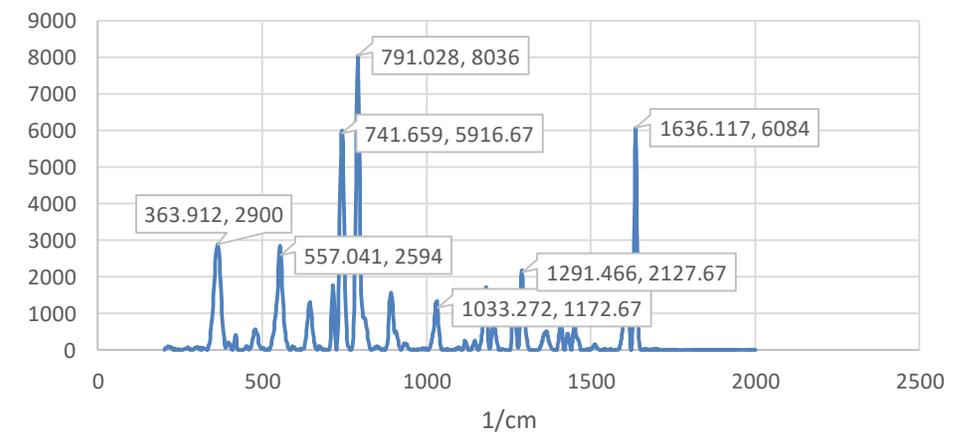
N°	Nombre del Aceite esencial	Enlaces Simples		Enlace triple	Enlaces dobles		Huella					
		4000-3000			3000-2500		2000-1500		1500-1000		1000-500	
		cm-1	% T	cm-1	% T	cm-1	% T	cm-1	% T	cm-1	% T	
3	AE_árbol de té	3461	61.163564	2963	3.078832		1659	90.47045	1377	36.860828	987	52.563219
11	AE_cedrón	3459	78.661552	2914	16.319005		1675	3.213647	1447	37.47994	844	70.881428
19	AE_eucalipto	3454	94.349756	2925	3.199316		1645	91.40161	1215	27.406135	985	10.995925
25	AE_lavanda	3455	36.008556	2972	3.43785		1739	5.901672	1243	7.636575	920	15.346109

Espectros Raman

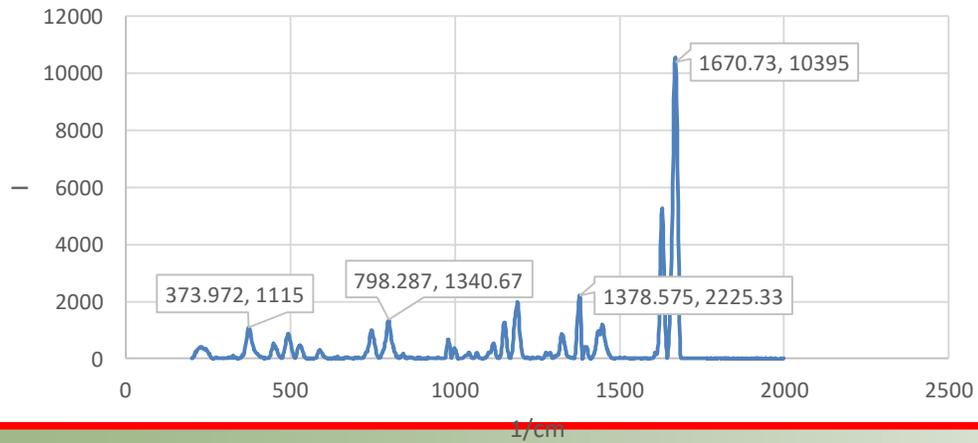
AE_Arrayan



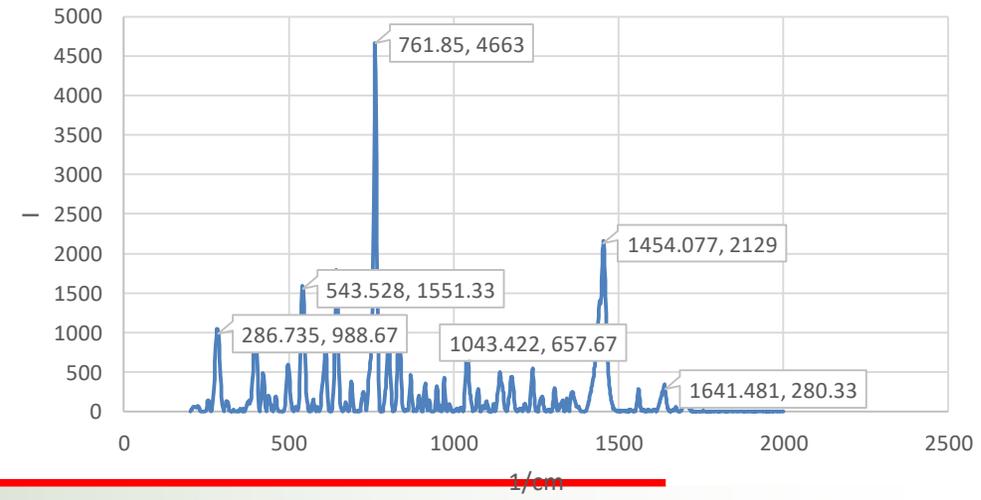
AE_Clavo



AE_Hierba Luisa



AE_Menta

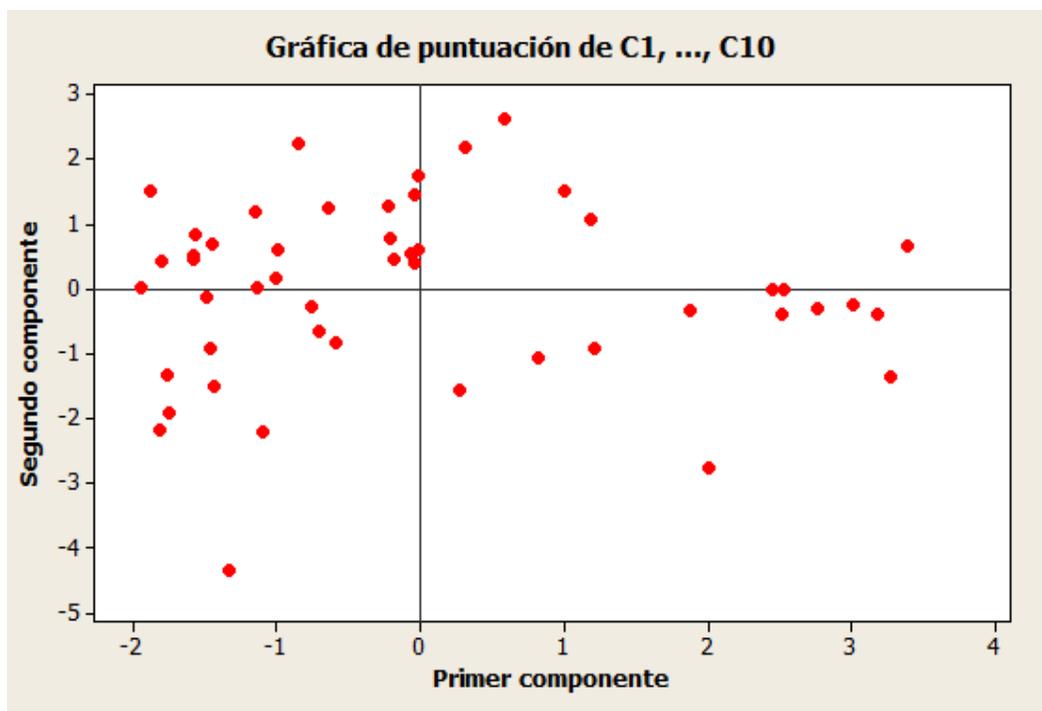


Base de datos de espectros Raman

BASE DE DATOS DE ESPECTROS RAMAN									
N°	Nombre del Aceite esencial	0-500		500-1000		1000-1500		1500-2000	
		cm-1	I	cm-1	I	cm-1	I	cm-1	I
4	AE_arrayan	301.048	908	754.52	6850.67	1429.166	3390.67	1640.141	2336.33
14	AE_clavo	363.912	2900	791.028	8036	1291.466	2127.67	1636.117	6084
23	AE_hierba luisa	373.972	1115	798.287	1340.67	1378.575	2225.33	1670.73	10395
31	AE_menta	286.735	988.67	761.85	4663	1454.077	2129	1641.481	280.33

Análisis de Componentes Principales

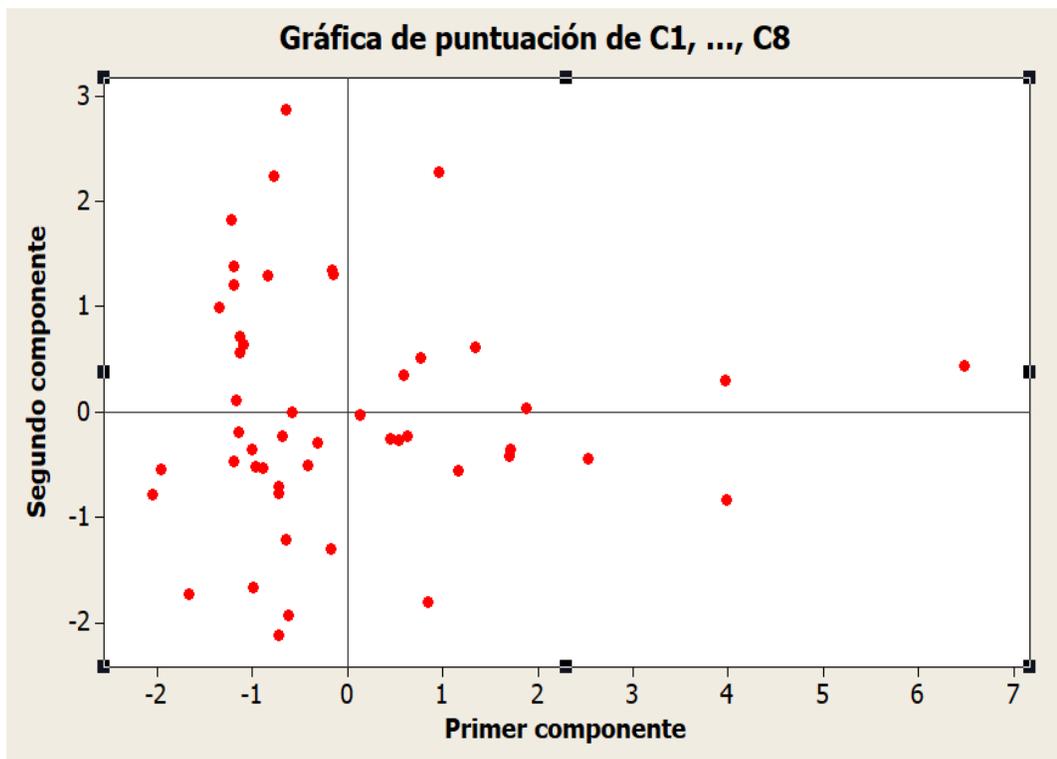
Espectroscopía Infrarroja



Primer cuadrante		Segundo Cuadrante		Tercer Cuadrante		Cuarto Cuadrante	
N°	Nombre del Aceite esencial	N°	Nombre del Aceite esencial	N°	Nombre del Aceite esencial	N°	Nombre del Aceite esencial
6	AE_bergamota	2	AE_apio	1	AE_albahaca	7	AE_canela
11	AE_cedrón	4	AE_arrayan	3	AE_árbol de té	8	AE_canelo
22	AE_hierba buena	5	AE_azahar	12	AE_ciprés	9	AE_cardamamo
23	AE_hierba luisa	10	AE_cedro	19	AE_eucalipto	14	AE_clavo
45	AE_sándalo	13	AE_citronella	28	AE_mandarina	15	AE_comino
49	AE_ylang_ylang	16	AE_curcuma	31	AE_menta	18	AE_eneldo
		17	AE_enebro	32	AE_molle	25	AE_lavanda
		20	AE_eucalipto limonero	35	AE_orégano	29	AE_manzanilla
		21	AE_geranio	37	AE_palo de rosa	30	AE_mejorana
		24	AE_jengibre	43	AE_rosa	39	AE_petitgrain
		26	AE_lima	47	AE_tomillo	44	AE_salvia clara
		27	AE_limón				
		33	AE_naranja				
		34	AE_olibano				
		36	AE_pachullí				
		38	AE_palo santo				
		40	AE_pimienta negra				
		41	AE_pino				

Análisis de Componentes Principales

Espectroscopía Raman



Primer cuadrante		Segundo Cuadrante		Tercer Cuadrante		Cuarto Cuadrante	
N°	Nombre del Aceite esencial	N°	Nombre del Aceite esencial	N°	Nombre del Aceite esencial	N°	Nombre del Aceite esencial
5	AE-azahar	1	AE_albahaca	2	AE_apio	7	AE_canela
14	AE_clavo	3	AE_árbol de té	4	AE_arrayan	8	AE_canelo
15	AE_comino	9	AE_cardamamo	6	AE_bergamota	18	AE_eneldo
17	AE_enebro	10	AE_cedro	11	AE_cedrón	22	AE_hierba buena
34	AE_olibano	12	AE_ciprés	19	AE_eucalipto	27	AE_limón
35	AE_orégano	13	AE_citronella	21	AE_geranio	28	AE_mandarina
45	AE_sándalo	16	AE_curcumol	24	AE_jengibre	38	AE_palo santo
		20	AE_eucalipto limonero	25	AE_lavanda	40	AE_pimienta negra
		29	AE_manzanilla	26	AE_lima	47	AE_tomillo
		32	AE_molle	30	AE_mejorana	48	AE_toronja
		41	AE_pino	31	AE_menta		
		42	AE_romero	33	AE_naranja		
		46	AE_muña	36	AE_pachulli		
				37	AE_palo de rosa		
				39	AE_petitgrain		
				43	AE_rosa		
				44	AE_salvia clara		
				49	AE_ylang_ylang		

Clasificación de aceites esenciales

Primer cuadrante		Segundo Cuadrante		Tercer Cuadrante		Cuarto Cuadrante									
Espectroscopia infrarroja		Espectroscopia Raman		Espectroscopia infrarroja		Espectroscopia Raman									
Nº	Nombre del Aceite esencial	Nº	Nombre del Aceite esencial	Nº	Nombre del Aceite esencial	Nº	Nombre del Aceite esencial	Nº	Nombre del Aceite esencial	Nº	Nombre del Aceite esencial				
6	AE_bergamota	5	AE-azahar	2	AE_apio	1	AE_albahaca	1	AE_albahaca	2	AE_apio	7	AE_canela	7	AE_canela
11	AE_cedrón	14	AE_clavo	4	AE_arrayan	3	AE_árbol de té	3	AE_árbol de té	4	AE_arrayan	8	AE_canelo	8	AE_canelo
22	AE_hierba buena	15	AE_comino	5	AE_azahar	9	AE_cardamamo	12	AE_ciprés	6	AE_bergamota	9	AE_cardamamo	18	AE_eneldo
23	AE_hierba luisa	17	AE_enebro	10	AE_cedro	10	AE_cedro	19	AE_eucalipto	11	AE_cedrón	14	AE_clavo	22	AE_hierba buena
45	AE_sándalo	34	AE_olíbano	13	AE_citronella	12	AE_ciprés	28	AE_mandarina	19	AE_eucalipto	15	AE_comino	27	AE_limón
49	AE_ylang_ylang	35	AE_orégano	16	AE_curcuma	13	AE_citronella	31	AE_menta	21	AE_geranio	18	AE_eneldo	28	AE_mandarina
		45	AE_sándalo	17	AE_enebro	16	AE_curcumol	32	AE_molle	24	AE_jengibre	25	AE_lavanda	38	AE_palo santo
				20	AE_eucalipto limonero	20	AE_eucalipto limonero	35	AE_orégano	25	AE_lavanda	29	AE_manzanilla	40	AE_pimienta negra
				21	AE_geranio	29	AE_manzanilla	37	AE_palo de rosa	26	AE_lima	30	AE_mejorana	47	AE_tomillo
				24	AE_jengibre	32	AE_molle	43	AE_rosa	30	AE_mejorana	39	AE_petitgrain	48	AE_toronja
				26	AE_lima	41	AE_pino	47	AE_tomillo	31	AE_menta	44	AE_salvia clara		
				27	AE_limón	42	AE_romero			33	AE_naranja				
				33	AE_naranja	46	AE_muña			36	AE_pachulli				
				34	AE_olíbano					37	AE_palo de rosa				
				36	AE_pachullí					39	AE_petitgrain				
				38	AE_palo santo					43	AE_rosa				
				40	AE_pimienta negra					44	AE_salvia clara				
				41	AE_pino					49	AE_ylang_ylang				
				42	AE_romero										
				46	AE_muña										
				48	AE_toronja										

INTRODUCCIÓN

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

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 espectroscopia hace referencia una clasificación diferente.

CONCLUSIONES

- 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 espectroscopia 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 espectroscopia 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 espectroscopia ya que nos permiten identificar los grupos funcionales presentes en las muestras.

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 espectroscopia infrarroja y una intensidad Raman en el caso de espectroscopia 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.

GRACIAS POR SU
ATENCIÓN