



**PROPUESTA DE CLASIFICACIÓN DE
ACEITES ESENCIALES A PARTIR DE SUS
PROPIEDADES TÉRMICAS**



AUTORA: ESTEFANIA CALVACHE GARCÍA.
DIRECTOR: Ph.D. ROMAN RODRÍGUEZ MAECKERS.

CONTENIDO

1. INTRODUCCIÓN

2. OBJETIVOS

2.1. General

2.2 Específicos

3. METODOLOGÍA

4. RESULTADOS Y DISCUSIONES

5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

1. INTRODUCCIÓN

La materia prima ecuatoriana se exporta en grandes cantidades, lo cual disminuye el porcentaje de investigaciones que aportarían para aumentar la rentabilidad económica del país.



1. INTRODUCCIÓN



El papel que tienen los aceites esenciales aumenta a medida que se van descubriendo nuevas formas de aplicación, y el desarrollo de la sociedad ha demandado que se implementen sustancias alternativas en la mayoría de productos de consumo, pero solicitando información precisa acerca de las propiedades que tienen dichas sustancias.

2. OBJETIVOS

GENERAL

Proponer la clasificación de aceites esenciales a partir de sus propiedades térmicas por medio del Analizador Termogravimétrico (TGA) y Calorimetría Diferencial de Barrido (DSC).

ESPECÍFICOS

- Analizar en el TGA la cinética de evaporación mediante las curvas térmicas TG y DTG proporcionadas en el análisis para cada aceite esencial.
- Analizar en el DSC el calor específico, tipo de reacción y entalpía de vaporización mediante el termograma térmico proporcionado por el software del equipo.
- Proponer una clasificación de los aceites esenciales en base a los resultados obtenidos.

3. METODOLOGÍA

Materiales.

- 43 Aceites esenciales (Albahaca, apio, árbol de té, bergamota, canela, canelo, cardamomo, cedro, cedrón, ciprés, citronella, clavo, comino, cúrcuma, eneldo, eucalipto, eucalipto limonero, geranio, hierba buena, hierba luisa, jengibre, lavanda, lima, limón, mandarina, manzanilla, menta, molle, naranja, orégano, pachullí, palo de rosa, petitgrain, pimienta negra, pino, romero, rosa, salvia clara, sándalo, muña, tomillo, toronja, ylang ylang)
- Pipeta graduada de 10 μ l
- Papel absorbente.
- Crisoles de platino.
- Crisoles de aluminio.
- Guantes quirúrgicos.



3. METODOLOGÍA

Equipos.

- Analizador termogravimétrico (TGA) “Thermal Gravimetric Analysis”



- Calorímetro Diferencial de Barrio Scanning (DSC) “Differential Scanning Calorimetry”



3. METODOLOGÍA

Preparación de las muestras.

TGA

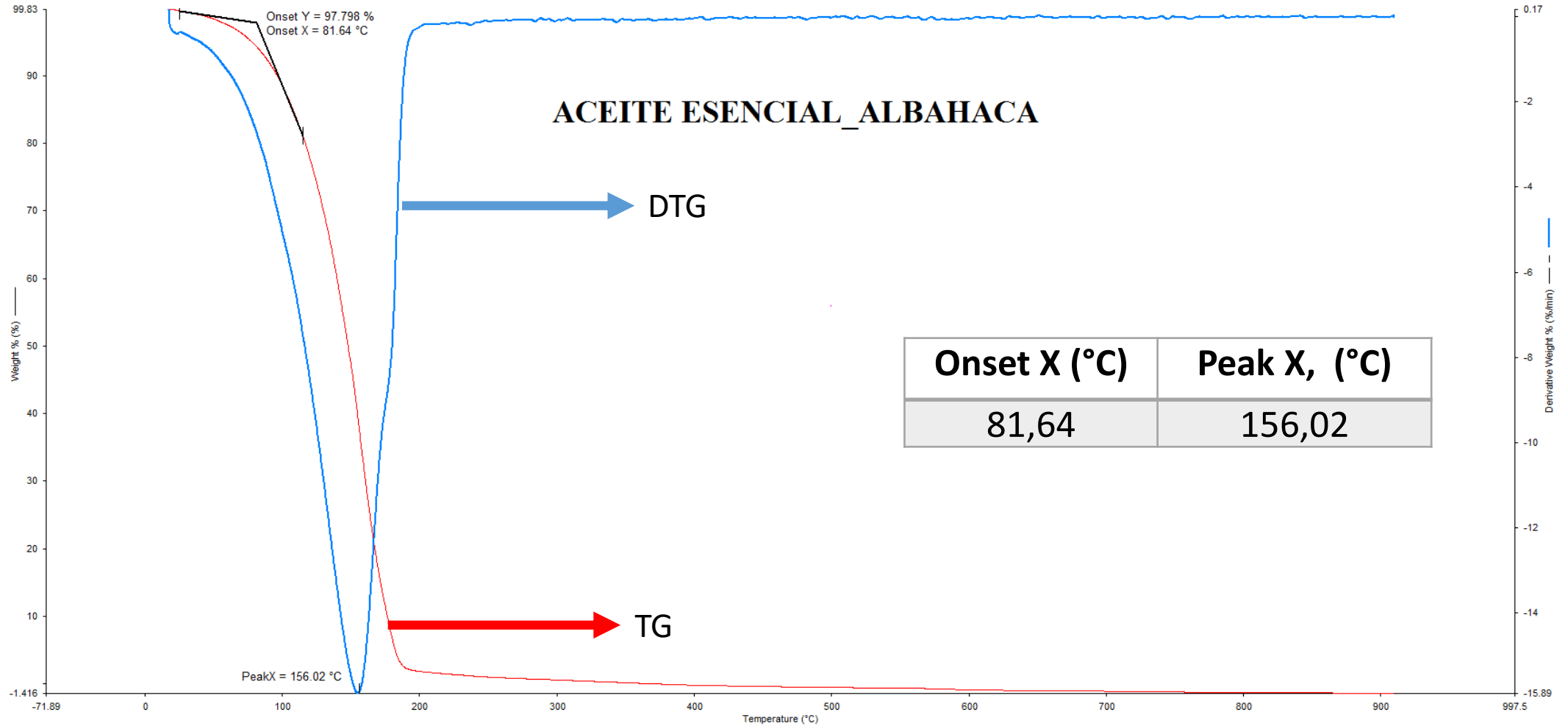
- Condiciones del análisis ($t_i = 40\text{ °C}$ hasta llegar a 900 °C ; la velocidad de calentamiento fue de 10 °C/min)
- Colocar la muestra en el crisol de platino.
- Correr la muestra.
- El tiempo de análisis fue de 1h 40 min.

DSC

- Condiciones del análisis ($t_i = 40\text{ °C}$ hasta llegar a 600 °C ; la velocidad de calentamiento fue de 10 K/min)
- Colocar la muestra en el crisol de aluminio.
- Correr la muestra.
- El tiempo de análisis fue de 40 min.

4. Resultados y Discusiones

Análisis del termograma proporcionado por el TGA.



4. Resultados y Discusiones

Análisis del termograma proporcionado por el TGA.

TABLA 1. Datos iniciales obtenidos de las curva TG y DTG del termograma proporcionado por el Analizador termogravimétrico para el aceite esencial de albahaca.

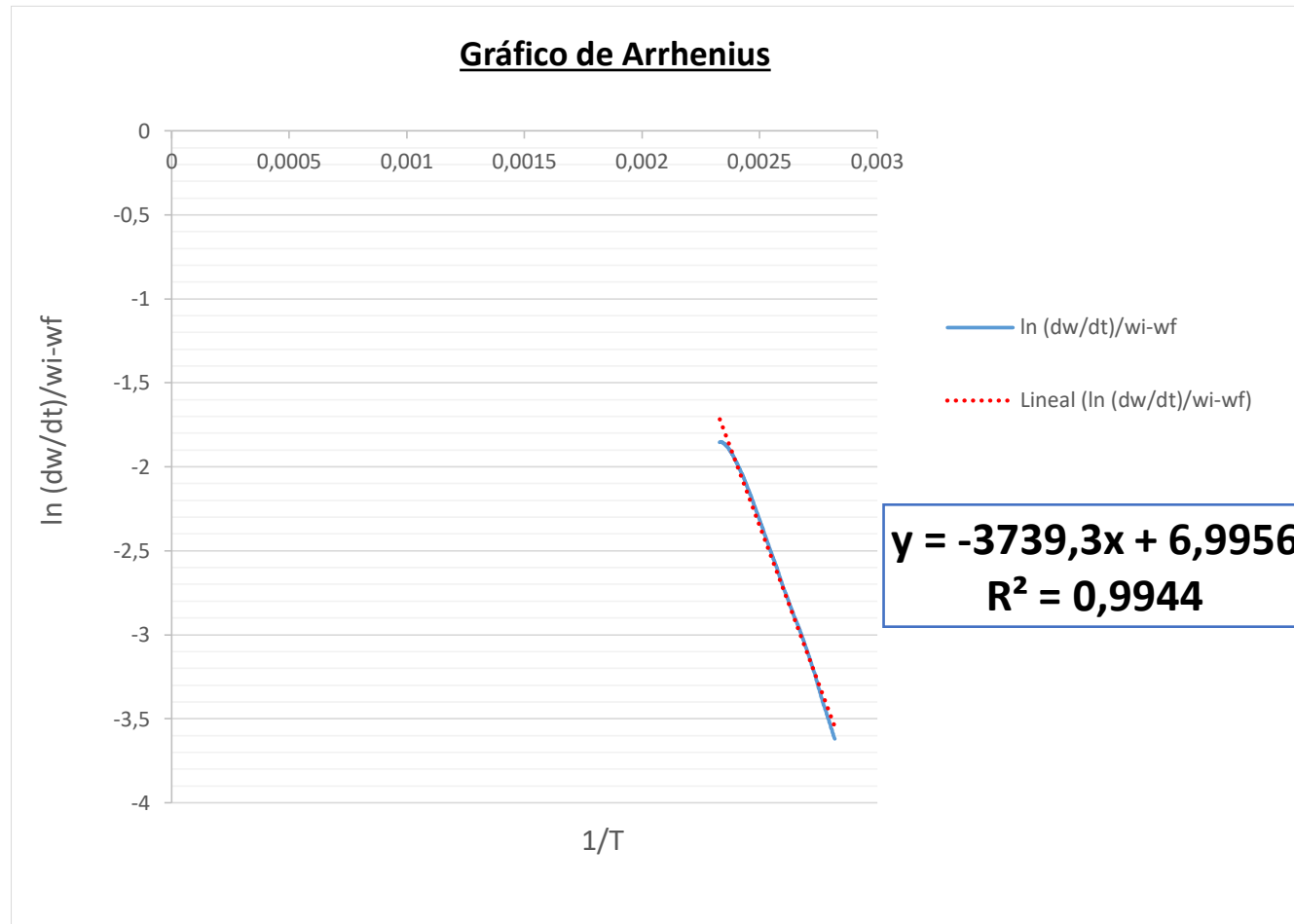
Onset X (°C)	Peak X, (°C)	wi (mg)	wf(mg)	wi-wf
81,64	156,02	7,47	-0,105	7,575

TABLA 2. Valores calculados a partir de la tabla 1, para la construcción del Grafico de Arrhenius, para el aceite esencial de albahaca.

T (°C)	T (°K)	dw/dt	$\frac{dw/dt}{wi - wf}$	1 / T (°K)	ln (dw/dt)/wi-wf
81,59	354,74	0,2030	0,02679868	0,002818	-3,619402651

4. Resultados y Discusiones

Análisis del termograma proporcionado por el TGA.



1. $k = Ae^{\left(\frac{-Ea}{RT}\right)} \rightarrow k = \left(\frac{d\alpha}{dt}\right) = \frac{dw/dt}{w_i-w_f}$

2. $\ln\left(\frac{dw/dt}{w_i-w_f}\right) = -\frac{Ea}{R}\left(\frac{1}{T}\right) + \ln A$

3. $y = mx + b$

4. $y = -3739,3x + 6,9956$

5. $m = -\frac{Ea}{R}$

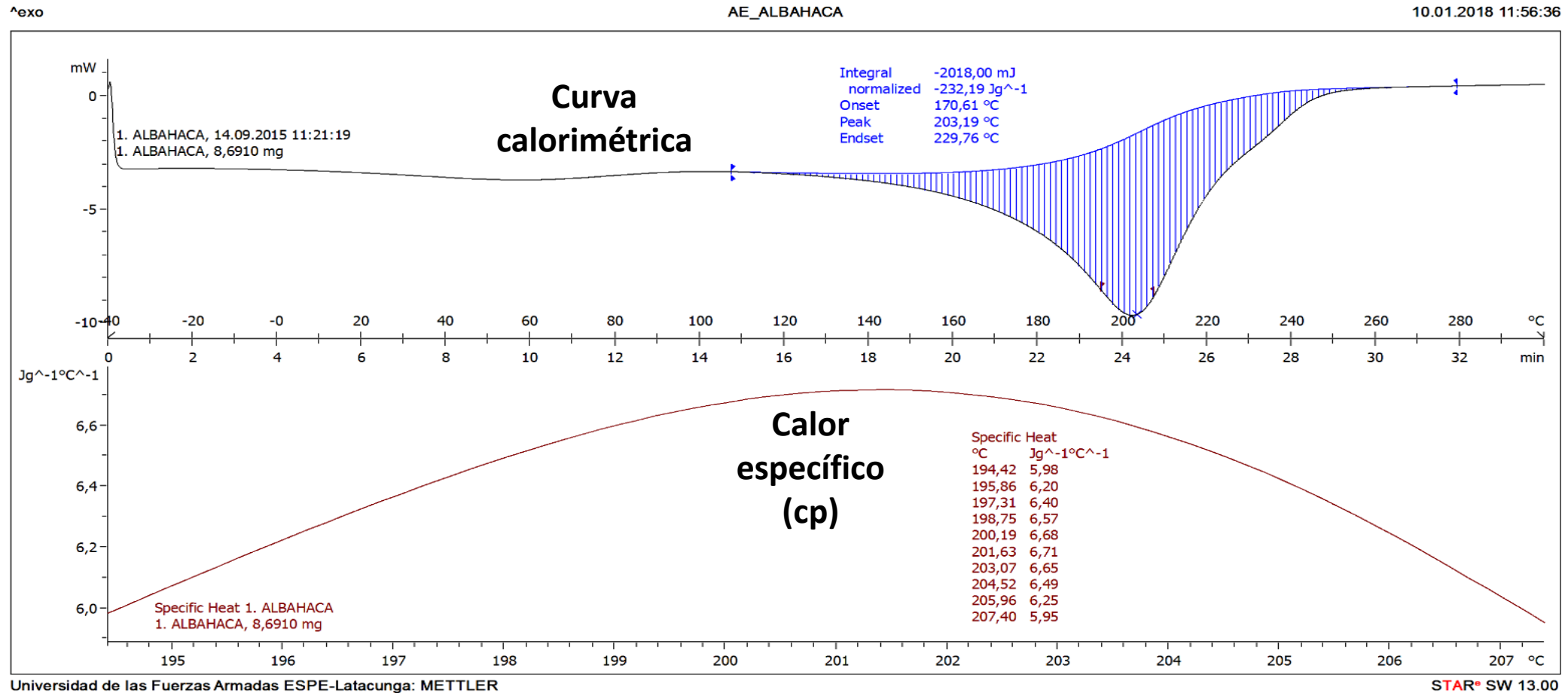
$Ea = 31,090 \text{ kJ/mol}$

6. $b = \ln A$

$A = 1091,819 \text{ min}^{-1}$

4. Resultados y Discusiones

Análisis del termograma proporcionado por el DSC.



NOMBRE DEL AE.	Masa (mg)	°T-evap. (Peak) (°C)	cp @ °T-evap. (J/g°C)	H-evap. (J/g)	°T-ebu (Onset) (°C)	TIPO DE REACCIÓN
AE_albahaca	8,691	203,190	6,650	232,190	170,610	endotérmica

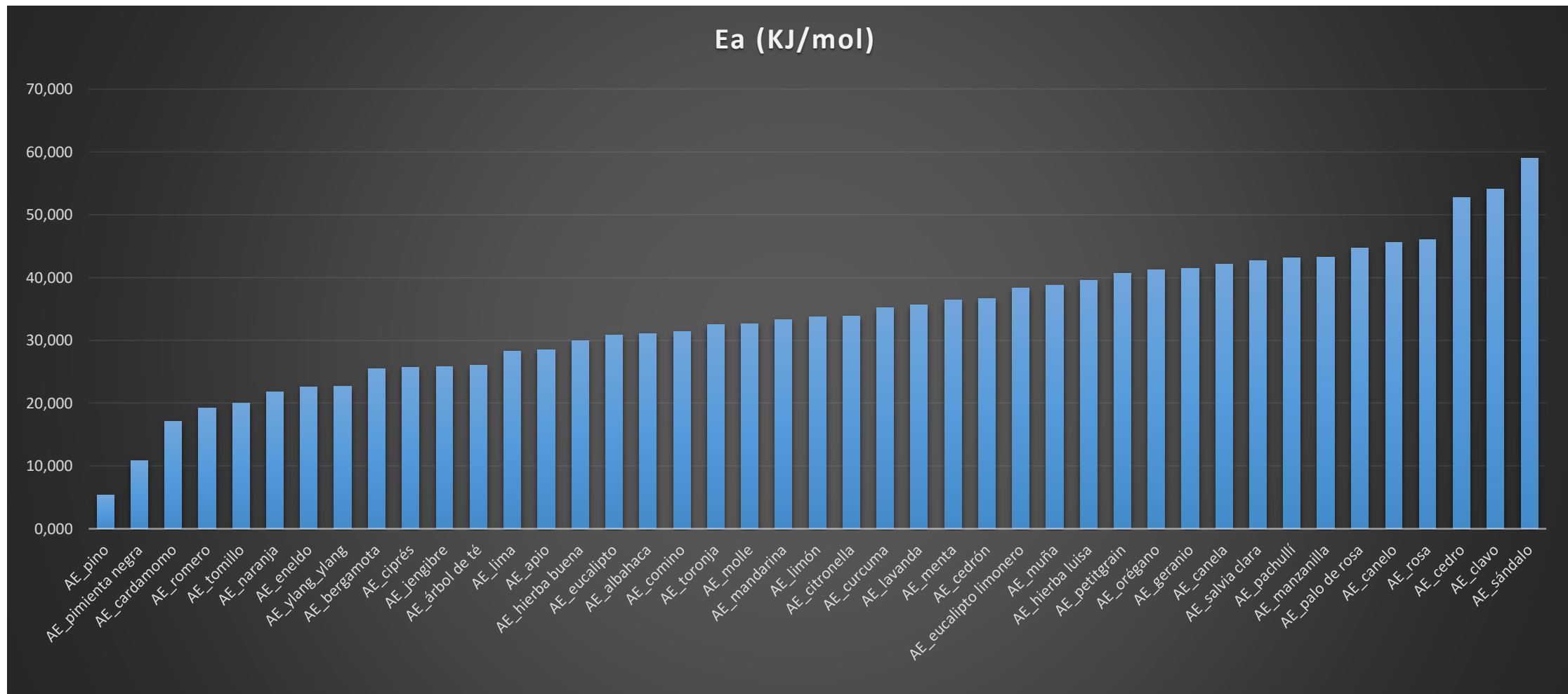
4. Resultados y Discusiones

Propiedades calculadas a partir del TGA y DSC para cada aceite esencial.

N°	NOMBRE DEL AE	TGA		DSC					TIPO DE REACCIÓN
		Ea (kJ/mol)	$A_{min^{-1}}$	Masa (mg)	$^{\circ}T\text{-evap. (Peak)}$ ($^{\circ}C$)	cp @ $^{\circ}T\text{-evap. (J/g}^{\circ}C$)	H-evap. (J/g)	$^{\circ}T\text{-ebu (Onset)}$ ($^{\circ}C$)	
1	AE_albahaca	31,09	1091,819	8,691	203,19	6,65	232,19	170,61	endotérmica
2	AE_apio	28,523	775,726	7,684	177	5,689	173,24	137,45	endotérmica
3	AE_árbol_de_té	25,995	348,522	9,832	186,63	11,19	251,22	172,43	endotérmica
4	AE_bergamota	25,512	278,244	8,748	191,16	7,32	243,95	162,16	endotérmica
5	AE_canela	42,085	10118,29	9,11	251,97	8,38	280,8	224,79	endotérmica

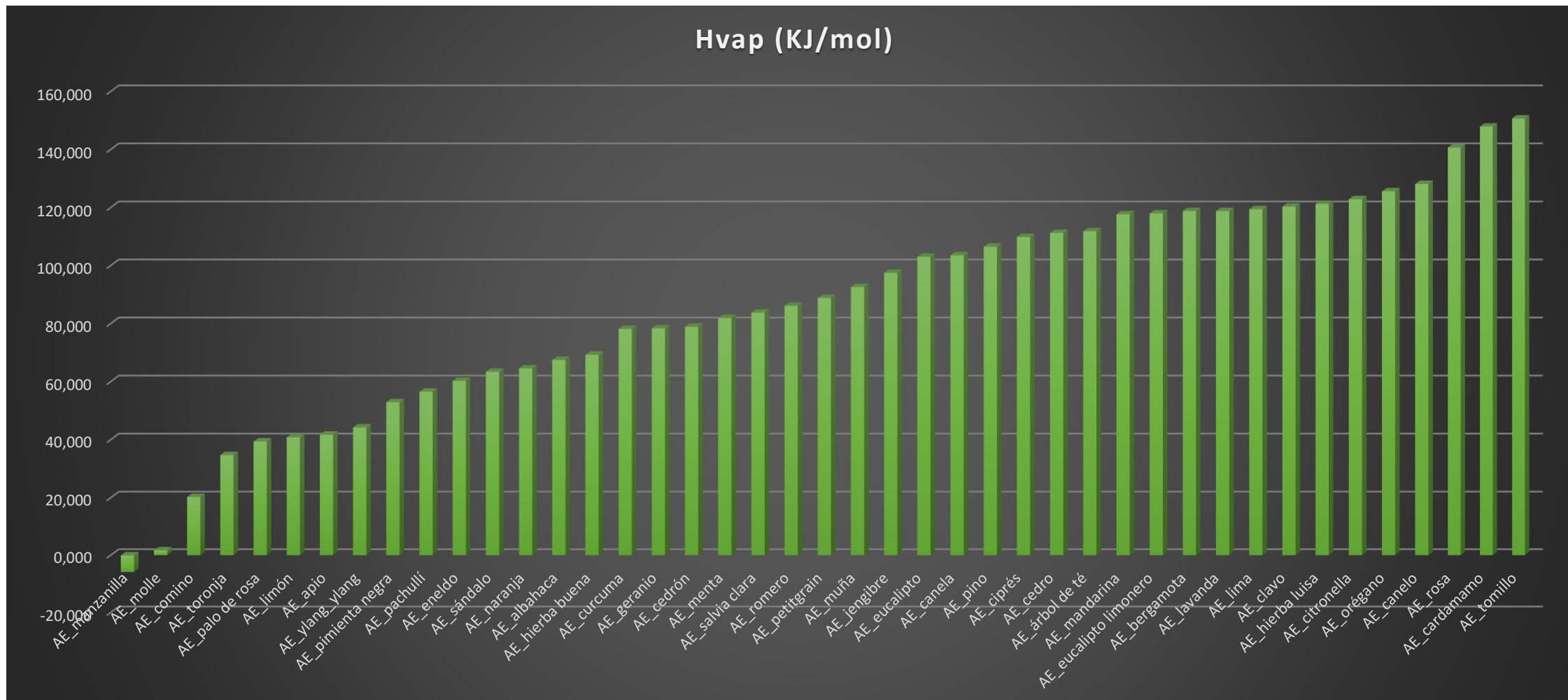
4. Resultados y Discusiones

Propuesta de clasificación de AE a partir de EA y H-vap



4. Resultados y Discusiones

Propuesta de clasificación de AE a partir de EA y H-vap



4. Resultados y Discusiones

Propuesta de clasificación de AE a partir de Volatilidad (EA y H-vap)

Tipo de volatilidad	Propiedades Térmicas	
	Ea	H-vap
Volatilidad baja	Pino, pimienta negra, cardamomo, romero, tomillo, naranja, eneldo, ylang ylang, bergamota, ciprés, jengibre, árbol de té, y lima	Manzanilla, molle, comino, toronja, palo de rosa, limón, apio, ylang_ylang, pimienta negra, pachullí, eneldo, sándalo, naranja, albahaca, hierba buena, y cúrcuma
Volatilidad media	Apio, hierba buena albahaca, comino, toronja, molle, mandarina, limón, citronella, cúrcuma, lavanda, menta, cedrón, eucalipto limonero, muña, hierba luisa, y petitgrain.	Geranio, cedrón, menta, salvia clara, romero, petitgrain, muña, jengibre, eucalipto, canela, pino, ciprés, cedro, árbol de té, y mandarina.
Volatilidad alta	Orégano, geranio, canela, salvia clara, pachullí, manzanilla, palo de rosa, canelo, rosa, cedro, clavo, y sándalo.	Bergamota, lavanda, lima, clavo, hierba luisa, citronella, orégano, canelo, rosa, cardamomo, tomillo, y eucalipto limonero.

5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES



Conclusiones

- La propuesta de clasificación de aceites esenciales está en función de la volatilidad, en donde se diferenció volatilidad baja, volatilidad media y volatilidad alta; estos tres rangos permiten eludir que tipo de sustancia es, es decir, si el aceite esencial tiene volatilidad baja, entonces se trata de una sustancia ligera (viscosidad baja) porque se evapora con mayor rapidez, esta analogía se aplica y se interpreta para los dos grupos restantes.
- Los aceites esenciales están formados por varios compuestos orgánicos tales como hidrocarburos y compuestos oxigenados, estas moléculas tienen una estructura basada en hidrógeno, carbono, y oxígeno. Cuando estos elementos se combinan lo realizan a través de fuerzas intermoleculares, la mezcla de estas atracciones químicas dependen del tipo de enlace que se desee formar. Las propiedades térmicas permiten conocer el punto exacto en el que dichas fuerzas se rompen para producir nuevas moléculas. Si se trata de una mezcla como es en este caso de los aceites esenciales, las propiedades de estos compuestos netamente dependerán de las propiedades que tengan los elementos que conforman dicha mezcla.

5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES



Recomendaciones

- El análisis termogravimétrico se utilizó exclusivamente para determinar la cinética de evaporación de cada aceite esencial, sería importante realizar una caracterización de la curva proporcionada por el equipo, para determinar otros parámetros que influyen en su tipificación, como por ejemplo, cuantificación de: pérdida de agua, pirólisis, oxidación, y porcentaje en peso de cenizas.
- La información de las propiedades térmicas analizadas para cada aceite esencial, formarían parte de la ficha técnica de cada sustancia, por lo tanto se recomienda formular dicho documento para tener un registro a nivel nacional de todas las características que se debe conocer acerca de los aceites esenciales; y por ende este sería un aporte importante a nivel mundial.



GRACIAS