



UNAP



FACULTAD DE FARMACIA Y BIOQUÍMICA
ESCUELA PROFESIONAL DE FARMACIA Y BIOQUÍMICA

TESIS

**CARACTERIZACIÓN FÍSICOQUÍMICA Y CROMATOGRFÍA DEL ACEITE
ESENCIAL DE HOJAS DE *Tagetes erecta* L.**

**PARA OPTAR EL TÍTULO PROFESIONAL DE
QUÍMICO FARMACÉUTICO**

PRESENTADO POR:

STHEFANY LUCERO CACHI RIOS

RAFAEL GONGORA FLORES

ASESOR:

ING. CLETO JARA HERRERA, Mgr.

IQUITOS, PERÙ

2021

ACTA DE SUSTENTACIÓN



Facultad de Farmacia y Bioquímica
Escuela Profesional de Facultad de Farmacia y Bioquímica

“Año del Bicentenario del Perú: 200 años de Independencia”

ACTA DE SUSTENTACION DE TESIS N°029-PCGT-FFyB-UNAP-2021/OFICIO N°052-DINV-UNAP-2021

En la ciudad de Iquitos, Distrito de Iquitos, Departamento de Loreto, por vía Zoom de la Universidad Nacional de la Amazonía Peruana, a los 22 días del mes de junio de 2021, a horas 15:35, se dio inicio a la sustentación pública de Tesis titulado “**CARACTERIZACIÓN FISCOQUÍMICA Y CROMATOGRAFÍA DEL ACEITE ESENCIAL DE HOJAS DE *Tagetes erecta L***”, aprobado con Resolución Decanal N°118-2021-FFyB-UNAP, presentado por los Bachilleres: **STHEFANY LUCERO CACHI RIOS** y **RAFAEL GONGORA FLORES**, para optar el Título Profesional de Químico(a) Farmacéutico(a) que otorga la Universidad de acuerdo a Ley y Estatuto.

El jurado calificador y dictaminador designado mediante **Resolución Decanal N°030-2021-FFyB-UNAP**, está integrada por:

Ing. REYNA GLADYS CARDENAS VDA. DE REATEGUI, Dra.	Presidente
Q.F. IVONNE NAVARRO DEL AGUILA, Mgr.	Miembro
Q.F. CARLOS ADOLFO CONTRERAS LICETTI, Mgr.	Miembro

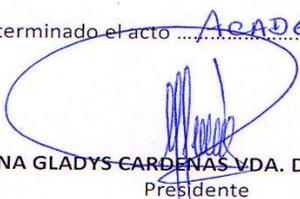
Luego de haber escuchado con atención y formulado las preguntas necesarias, las cuales fueron respondidas: Satisfactoriamente

El jurado después de las deliberaciones correspondientes, llegó a las siguientes conclusiones:

La sustentación pública y la tesis han sido APROBADAS con la calificación Muy Buena

Estando los bachilleres aptos para obtener el Título Profesional de Químico(a) Farmacéutico(a).

Siendo las 16:30 se dio por terminado el acto Académico

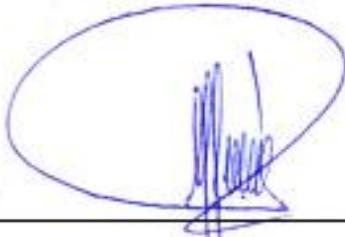

Ing. REYNA GLADYS CARDENAS VDA. DE REATEGUI, Dra.
Presidente


Q.F. IVONNE NAVARRO DEL AGUILA, Mgr.
Miembro


Q.F. CARLOS ADOLFO CONTRERAS LICETTI, Mgr.
Miembro


Ing. CLETO JARA HERRERA, MSc.
Asesor

JURADO Y ASESOR



Ing. REYNA GLADYS CARDENAS VDA. DE REATEGUI, Dra.

CIP: 28912

Presidente



Q.f. IVONNE NAVARRO DEL AGUILA, Mgr.

CQFP: 11601

Miembro



Q.f. CARLOS ADOLFO CONTRERAS LICETTI, Mgr.

CQFP: 04134

Miembro



Ing. CLETO JARA HERRERA Mgr.

CIP: 63042

Asesor

DEDICATORIA

A mi madre **Marleny Flores Llerena** por ser una persona muy importante en mi formación profesional, gracias por ser mi motor y motivo de superación, enormemente agradecido por ayudarme a lograr mi meta.

A mi Ángel, **Rafael Gongora López** por ser un padre cariñoso y aunque estuvo poco tiempo en mi vida me enseñó a que nunca debo darme por vencido.

Rafael

A mi madre **Olga Rios Meléndez** por enseñarme a luchar por mis metas y nunca darme por vencida gracias por ser mi guía y luz en mi camino.

A mi ángel **Alejandro Cachi Cabanillas** por enseñarme que todo en la vida se puede conseguir con sacrificio, hacerme soñadora y capaz de luchar por mis metas, sé que donde DIOS te puso debes sentirte orgulloso.

A mi hermana **Francisca Milagros Cachi Rios** por ser mi gran compañera de sueños y logros de quien siempre he recibido su desinteresado e incondicional apoyo.

Sthefany Lucero

AGRADECIMIENTOS

A nuestro asesor Ing. Cleto Jara Herrera, Mgr. y al Ing. Julio Arce Hidalgo, por brindarnos sus conocimientos, experiencias profesionales y laborales; además de comprensión, paciencia y sugerencias específicas.

A nuestra casa de estudios por inculcarnos valores y conocimientos, que siempre tendremos presente en nuestras vidas.

A todos nuestros docentes por ser parte importante de nuestra formación profesional; gracias por convertirnos en personas con principios éticos que elevan nuestra dimensión humana.

ÍNDICE GENERAL

	Pág.
PORTADA	i
ACTA DE SUSTENTACIÓN	ii
JURADO Y ASESOR	iii
DEDICATORIA	iv
AGRADECIMIENTOS	v
ÍNDICE GENERAL	vi
ÍNDICE DE TABLAS	vii
ÍNDICE DE FIGURAS	viii
RESUMEN	ix
ABSTRACT	x
INTRODUCCIÓN	1
CAPÍTULO I: MARCO TEÓRICO	3
1.1 Antecedentes	3
1.2 Bases teóricas	5
1.3 Definición de términos básicos	16
CAPÍTULO II: HIPÓTESIS Y VARIABLES	17
2.1 Formulación de la hipótesis	17
2.2 Variables y su operacionalización	17
CAPÍTULO III: METODOLOGÍA	19
3.1 Tipo y diseño	19
3.2 Diseño muestral	19
3.3 Procedimientos de recolección de datos	20
3.4 Procesamiento y análisis de los datos	21
3.5 Aspectos éticos	26
CAPÍTULO IV: RESULTADOS	27
CAPÍTULO V: DISCUSIÓN	33
CAPÍTULO VI: CONCLUSIONES	35
CAPÍTULO VII: RECOMENDACIONES	36
CAPÍTULO VIII: FUENTES DE INFORMACIÓN	37
ANEXOS	39

ÍNDICE DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1. Reacciones coloridas del aceite esencial de <i>T. erecta</i> L	27
Tabla 2. solubilidad del aceite esencial de <i>T. erecta</i> L. en mezcla alcohol - agua	27
Tabla 3. componentes del aceite esencial de hojas de <i>T. erecta</i> L	28
Tabla 4. Monoterpenos del aceite esencial de <i>T. erecta</i> L. y tiempo de retención	29
Tabla 5. Sesquiterpenos del aceite esencial de <i>T. erecta</i> L. y tiempo de retención	29
Tabla 6. Aromáticos del aceite esencial de <i>T. erecta</i> L y tiempo de retención	29
Tabla 7. Hidrocarburos alifáticos del aceite esencial de <i>T. erecta</i> L. y tiempo de retención	29
Tabla 8. Compuestos desconocidos del aceite esencial de <i>T. erecta</i> L. y tiempo de retención	30
Tabla 9. Componentes del aceite esencial de <i>T. erecta</i> L. y abundancia	30
Tabla 10. hidrocarburos alifáticos del aceite esencial de <i>T. erecta</i> L. y abundancia	30
Tabla 11. Componentes no identificados del aceite esencial de <i>T. erecta</i> L. y abundancia	31
Tabla 12. Componentes terpenoidales que le dan sabor a menta a las hojas de <i>T. erecta</i> L	31

ÍNDICE DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Esquema de extracción del aceite esencial con solventes	12
Figura 2. Flow sheet de bloques para la obtención del aceite esencial de <i>T. erecta</i> L.	21
Figura 3. Composición porcentual del aceite esencial de las hojas de <i>T. erecta</i> L.	32

RESUMEN

Tagetes erecta L. especie vegetal del bosque y sotobosque amazónico cuyas flores contiene carotenoides que son utilizados para dar coloración a la carne y huevos de las aves de corral, sin embargo, las hojas que contienen aceite esencial no han sido estudiadas, el propósito de este trabajo fue aislar y caracterizar el aceite esencial de las hojas de *T. erecta* L recolectada en la comunidad de Zungarococha, San Juan Bautista, Maynas, Loreto. La extracción del aceite esencial fue utilizando solventes. La caracterización fisicoquímica se realizó mediante la determinación de los parámetros fisicoquímicas y por análisis cromatográfico con espectrometría de masas el número de componentes. Las pruebas fisicoquímicas dieron como resultado lo siguiente: densidad 0,8132 g/cm³, Índice de refracción 1,468 y la prueba colorida positiva. Se determinaron 22 compuestos siendo los mayoritarios: Piperitona 28,98%, D-limoneno 13,79%, β -Linalool 8,95%, β -cis-Ocimeno 6,03%, Terpinoleno 5,42%, β -Feniletil acetato 3,94%, β -Cariofileno 3,11%, α -pineno 2,79% y Sabineno 2,01%. El aceite esencial de *T. erecta* Linn de la Región Loreto por contener un 28,98% de Piperitona que no está presente en ninguna de las especies del género *Tagetes* constituye un nuevo Quimiotipo.

Palabras clave: Aceite esencial, *Tagetes erecta* L, caracterización fisicoquímica, cromatográfico.

ABSTRACT

Tagetes erecta L. A plant species of the Amazon forest and understory whose flowers contain carotenoids that are used to give color to the meat and eggs of poultry, however, the leaves that contain essential oil have not been studied, the purpose of this The work was to isolate and characterize the essential oil from the leaves of *T. erecta* collected in the community of Zungarococha, San Juan Bautista, Maynas, Loreto. The extraction of the essential oil was using solvents. The physicochemical characterization was carried out by determining the physicochemical parameters and the number of components by chromatographic analysis with mass spectrometry. The physicochemical tests resulted in the following: density 0.8132 g/cm³, Refractive Index 1.468 and the positive color test. 22 compounds were determined, the majority being: Piperitone 28.98%, D-limonene 13.79%, β -Linalool 8.95%, β -cis-Ocimeno 6.03%, Terpinolene 5.42%, β -Phenylethyl acetate 3.94%, β -Caryophyllene 3.11%, α -pinene 2.79% and Sabinene 2.01%. The essential oil of *T. erecta* Linn from the Loreto region, because it contains 28.98% of Piperitone, which is not present in any of the species of the genus *Tagetes*, constitutes a new Chemotype.

Key words: Essential oil, *Tagetes erecta* L, physicochemical characterization, chromatographic.

INTRODUCCIÓN

En la Amazonía Peruana no se ha realizado un proceso de investigación Fitoquímica pionera en afán de encontrar especies vegetales con contenido de aceites esenciales, en este contexto se precisa realizar el estudio de *Tagetes erecta* L, (rosa sisa), cuyas hojas contienen aceite esencial, pero son desestimados a pesar de que ofrece mayor ventaja comparativa para ser usado en la industria de los aceites esenciales.

Soukoop en su obra vocabulario de los nombres vulgares y catálogo de los géneros hace un recuento de las especies vegetales en el que señala por primera vez a *T. erecta* L, (rosa sisa). Judd *et al*, menciona a *T. erecta* L, (rosa sisa) como una planta ornamental, que ha sido naturalizada y tienen una importante adaptación que poseen olores *sui-generis*, solo parcialmente son usados por otros fines tales como en la industria de los colorantes naturales cuyas flores aportan luteína una xantofila (grupo carotenoide) que se añade al alimento de aves para dar coloración a su carne y huevos (1, 2).

Existen estudios realizados por otros autores sobre el aceite esencial de *Tagetes erecta* L, en otras regiones del mundo, podemos citar a Baslas, RK. *et al*. (3) que aisló y caracterizó el aceite esencial de *T. erecta* L de la India, los principales componentes fueron el Linalool y limoneno, Alok, K. *et al*. (4) aisló aceite esencial de las flores y hojas de *Tagetes erecta* L del norte de la India, determino 43 componentes en las hojas y 45 componentes en las flores, Isiaka, A. *et al*. (5) también aisló aceite esencial de las hojas y flores de *T. erecta* L. de Suroeste de Nigeria determino 32 componentes en las hojas y 28 componentes en las flores. También existen estudios de otras especies del género *Tagetes*. Entre ellos tenemos a Díaz Cedillo, F. *et al*. Que aisló aceite esencial de *T. parryi* A. determinó 7 componentes y de *T. lacera* 6 componentes y Segovia, I. *et al*. Aisló, determinó sus componentes y realizó pruebas de actividad antibacteriana de *T. elliptica* Smith de la Región Ancash, pero no existe estudios de *T. erecta* L, en la Amazonía Peruana por lo que no se cuenta con información acerca de los componentes de esta especie.

Si no se realiza el trabajo de esta especie que crece en la Amazonía Peruana, no se puede conocer los componentes que posee, ni la naturaleza de esos metabolitos que permitiría el aprovechamiento de esta especie con fines de obtener aceite esencial e indicar su mayor ventaja de uso ya sea en la industria farmacéutica, cosmética, perfumista o alimentaria. Además, no se puede indicar si esta especie es un nuevo quimiotipo en relación a las especies estudiadas en otras partes del mundo, ya que una especie, aunque sean las mismas cuando crecen en diferentes latitudes producen diferentes metabolitos, característica que se conoce con el nombre de quimiotipo (raza química).

En base a estas consideraciones, el objetivo fue aislar aceite esencial de las hojas de *T. erecta* L. y determinar las propiedades fisicoquímicas, también se encontró el número de componentes y la naturaleza químicas de cada uno esos componentes comparados con el resultado de otros estudios. Nos indica que *T. erecta* L. de la Amazonía Peruana es un nuevo quimiotipo (raza química).

Formulación del problema

¿Es posible realizar el análisis de las hojas de *Tagetes erecta* L, por cromatografía HRGC-MS?

.

CAPÍTULO I: MARCO TEÓRICO

1.1 Antecedentes

Baslas, RK. et al. (1981), en su artículo “Chemical Examination of Essential Oil From The Leaves of *Tagetes erecta* Linn, aisló de las hojas aceite esencial por arrastre de vapor y analizó sus componentes, con técnicas de espectrometría infrarroja, cromatografía de capa fina (TLC) y cromatografía de gases que le permitió determinar los componentes siguientes: d- limoneno 19,67%, α - pineno 1,36 %, β - pineno 0,80%, Dipentano 0,67%, Ocimeno 7,61%, β -Felantreno 4,97%, Linalool 26,80%, Mentol 0,93%, Tagetona 3,39%, también, usando técnicas combinadas tales como espectrometría infrarroja, resonancia magnética nuclear, cromatografía de capa fina (TLC) y cromatografía de gases encontró la presencia de Geraniol 0,86 %, Nonanol 1,34%, usando espectrometría infrarrojo, refractometria, cromatografía de capa fina y cromatografía de gases, encontró la presencia de Linalool acetato (3,56%) (3).

Alok, K. et al. (2004), en su artículo “Composition of the Essential Oils of the Leaves and Flowers of *Tagetes erecta* L.”, extrajo aceite esencial por hidrodestilación en un aparato tipo Clevenger de las hojas y flores de *T. erecta* L. de norte de India y analizado en un cromatógrafo de gases y espectrometría de masa. En el aceite de las hojas determinaron 43 componentes los principales fueron: pipiritone 52,4%, terpinoleno 11,2%, limoneno 7,6%, piperitenone 5%, (Z)-myroxide 4,2%, índole 2,3% α -terpineol 1,8% y (E)-tagetone 1,8% y en el aceite de flores determinaron 45 componentes los principales fueron: pipiritone 28,5%, piperitenone 11,0%, (Z)-myroxide 7,9%, piperitenone oxide 7,2%, β -caryophyllene 7,1%, limonene 6,9%; terpinoleno 4,7%, dihydrotagetone 3,1%, (Z)- β -ocimene 2,8%, linalool 1,9% y germacrene D 1,5%. El autor señala que la alta concentración de pipiritone en el aceite de las hojas, *T. erecta* L sería una fuente alternativa para perfumería (4).

Isiaka, A. et al. (2006), publicaron un artículo bajo el nombre de The Essential Oil from the Leaves and Flowers of “African Marigold,” *Tagetes erecta* L. aislaron aceite esencial por separado de las hojas frescas y flores por hidrodestilación en un aparato tipo Clevenger de *T. erecta* L. de suroeste de Nigeria y analizado en un cromatógrafo de gases y espectrometría de masa. En el aceite de las hojas determinaron 32 componentes, 11 monoterpenos hidrocarbonados 15,6% y los principales fueron (E)- β -ocimene 6,7% y limonene 4,1%, 13 monoterpenos oxigenados 75,2% los principales fueron piperitone 50,7%, piperitenone 13,2%, camphor 4,7% y 1,8-cineole 2,0%, 6 sesquiterpenos hidrocarbonados 2,2% el principal es el β -caryophyllene 1,6% y 2 hidrocarburos alifáticos 0,8%. Y en el aceite de flores determinaron 28 componentes, 6 monoterpenos hidrocarbonados 20,2% los principales fueron α -pinene 11,7% y sabinene 5,6%, 13 monoterpenos oxigenados 61,1% los principales fueron 1,8-cineole 23,1%, α -terpineol 10,7%, piperitone 8,0% y piperitenone 4,0%, 7 sesquiterpenos hidrocarbonados 11,4% los principales fueron β -caryophyllene 3,3%, alloaromadendrene 2,3% y α -longipinene 2,0% y 2 hidrocarburos alifáticos 0,8% (5).

Segovia, I. et al. (2010), en su tesis “Composición Química del aceite de *Tagetes* elíptica Smith “chincho” y actividad antioxidante, anti-bacteriana y anti fúngica”, aisló aceite esencial de las hojas recolectadas a orillas del río santa en Huaraz por arrastre de vapor de agua, y determinó por cromatografía de gases y espectrometría de masas (GC/EM) los componentes siguientes : 2- metil-1-butil acetato, 2(10)-pineno, [1S,5S)-(-), α – pineno, 4 – etil – 4 metil – 1 – hexano, 1 – Pentanol 5 – (ciclopropil metileno), 3-t-butil-6-metil-2H-pirano, Verbenona, ácido ciclopropanocarboxílico 2-metil-2,6-di-t-butil-4-metilfeniléster forbolico, Ambrosin, butanimida, metoxicitronelol, Isocariofileno, α -cadineno, cadino-3,9 dieno, α -cadinol (6).

Díaz, F. et al. (2012), en su artículo “Composición del aceite esencial de *Tagetes parryi* A, aisló por hidrodestilación de las partes aéreas de la planta, procedente del Estado de San Luis de Potosí, México, el aceite esencial y usando CG- MS, encontró 7 componentes: canfeno 9,6% ,3, 6, 6-trimetil-2-norpinanol 9.10%, Anisol 6,0%, 4-

isopropil-1-metil-2-ciclohexenol 5,0%, Cineol 4,8%, eugenol 1,4% y α -terpineol 1,2% (7).

Díaz, F. *et al.* (2012), también estudió la especie *Tagetes lacera* bajo el Título, “Composición del aceite esencial de *Tagetes lacera*” planta endémica de la baja california sur, donde señala que aisló por hidrodestilación empleando la parte aérea de esta planta, e identificándolos por CG-EM encontró los compuestos siguientes: E-Tagetona (26,2%), crisantenona (2,8 %). Verbenona (22,1%), α -Thujeno (20,5%), β -pineno (3,1%), y α - pineno (1,9%), como aromas más significativos que representan el 73,8% de abundancia (8).

1.2 Bases teóricas

1.2.1 Especie en estudio *Tagetes erecta* Linn “rosa sisa”

Identificación Taxonómica.

Reino:	Plantae
División:	Magnoliophyta
Clase:	Magnoliopsida
Orden:	Asterales
Familia:	Asteráceae
Genero:	<i>Tagetes</i>
Especie:	<i>Tagetes erecta</i> Linn
Nombre Vulgar:	rosa sisa, aya sisa



Descripción botánica: Planta herbácea de hojas opuestas dividida en foliolos, las hojas superiores algunas veces alternas, disectadas con venación palmada. Flores bisexuales densamente agregadas en un número indeterminado de cabezas que están rodeadas por una envoltura de brácteas simetría radial o bilateral, sépalos altamente modificados, con 5 pétalos connatos formando un corola radial, tubular y bilateral con 2 labios, usualmente con 2 pétalos en el labio superior y 3 pétalos en el labio inferior

o formando una corola bilateral carente de un labio y el labio inferior elongado, las anteras son usualmente connatos 2 carpelos connatos, ovario ínfero con placentación basal, 2 estilos ramificados, un óvulo por ovario, el fruto es un aquenio coronado por un cáliz alternante. En las hojas verdes contiene aceite esencial y en la flor luteína (2).

Distribución y ecología: Es una planta cosmopolita se encuentra especialmente en regiones templadas o tropicales, pero también abunda en suelos secos, no es un género muy abundante, pero crece en comunidad cuando se hacen plantaciones (2).

Usos e información etnobotánica: *T. erecta* se usan para incorporar en el alimento de aves de corral para dar coloración al huevo y carne por la presencia de un pro-carotenoide conocido como luteína. En la Amazonia esta planta es usada como ornamental, pero también para el tratamiento del “síndrome del mal aire” en niños entre 1 a 4 años.

1.2.2. Sustancias aromáticas

Los aceites esenciales son sustancias volátiles olorosas que se encuentran en los órganos vegetales y se caracterizan por ser sensibles al órgano del olfato, en seres humanos, mamíferos y pájaros debido a que en las fosas nasales existen receptores que captan las moléculas olorosas (10,11). El olfato y gusto son nuestros sentidos más antiguos probablemente desarrollados en organismos muy primitivos como un artefacto para obtener información acerca de los cambios químicos medio ambientales (10,12).

Pájaros diurnos, animales acuáticos confían en lo que captan con el sentido del oído, para el hombre y los monos el órgano de la visión es fundamental, pero otras especies como los insectos usan las antenas y el gusto, como sentidos químicos; a través de las cuales, obtienen información acerca del mundo en el cual viven, siendo el olfato una importante fuente de información sin que eso suponga que en la naturaleza se haya desarrollado un importante y sofisticado sistema, para el análisis de las sustancias químicas que se difunden en el medio ambiente (10,12).

Los organismos vivientes usan los sentidos químicos como un medio de comunicación, que se capta y se va acumulando en la memoria como un recurso involuntario que se codifica y luego aparece como componente de la herencia olfativa (10). La volatilidad, de los aceites esenciales constituye un factor importante en la comunicación química, cuanto más volátil es una sustancia tiene mayor capacidad de difusión en esto reside la facilidad para que los insectos cumplan su papel en la polinización y en la dispersión del polen como un hecho indispensable, una forma de afirmación de la vida vegetal y animal, los olores tienden a difundirse por anemotaxia positiva suele decirse que las moléculas olorosas se difunden sin ser detenidas durante su viaje sorteando los flujos turbulentos de las nubes porque lo hacen con una elevada energía cinética superior a la energía potencial de una barrera infranqueable que es superada mediante el denominado “Efecto Túnel” de la mecánica cuántica (11,12).

1.2.3. Propiedades del aceite esencial

A todo aceite esencial le caracterizan 3 propiedades sobresalientes y son las siguientes (10).

Carácter: dado por los compuestos aromáticos de mayor volatilidad son estos los que se distinguen con mayor nitidez por ser de naturaleza monoterpenoidal, tienen menor peso molecular poseen estructuras C_{10} , y tienen mayor presión de vapor.

Intensidad: dada también por los componentes más volátiles que tienen mayor presión de vapor y se manifiesta como la fuerza con la que trasciende el aroma en el medio para que pueda ser percibida fácilmente por el olfato o por las antenas del insecto, también esta propiedad es propia de los Monoterpenos.

Persistencia: es la capacidad de permanecer mayor tiempo en el medio donde se ha esparcido y en la que los sesquiterpenos moléculas de estructuras C_{15} que acompañan a los monoterpenos intervienen como sustancias fijadoras del aroma de las sustancias más volátiles.

1.2.4. Localización de los aceites esenciales en los órganos vegetales

Los aceites esenciales se encuentran en las plantas casi exclusivamente en el gran grupo de las fanerógamas es decir plantas que poseen flores y semillas actualmente conocidos como las Magnoliophytas pertenecientes a los órdenes: Magnoliales, Laurales, Rutales, Asterales y Lamiales (11,12).

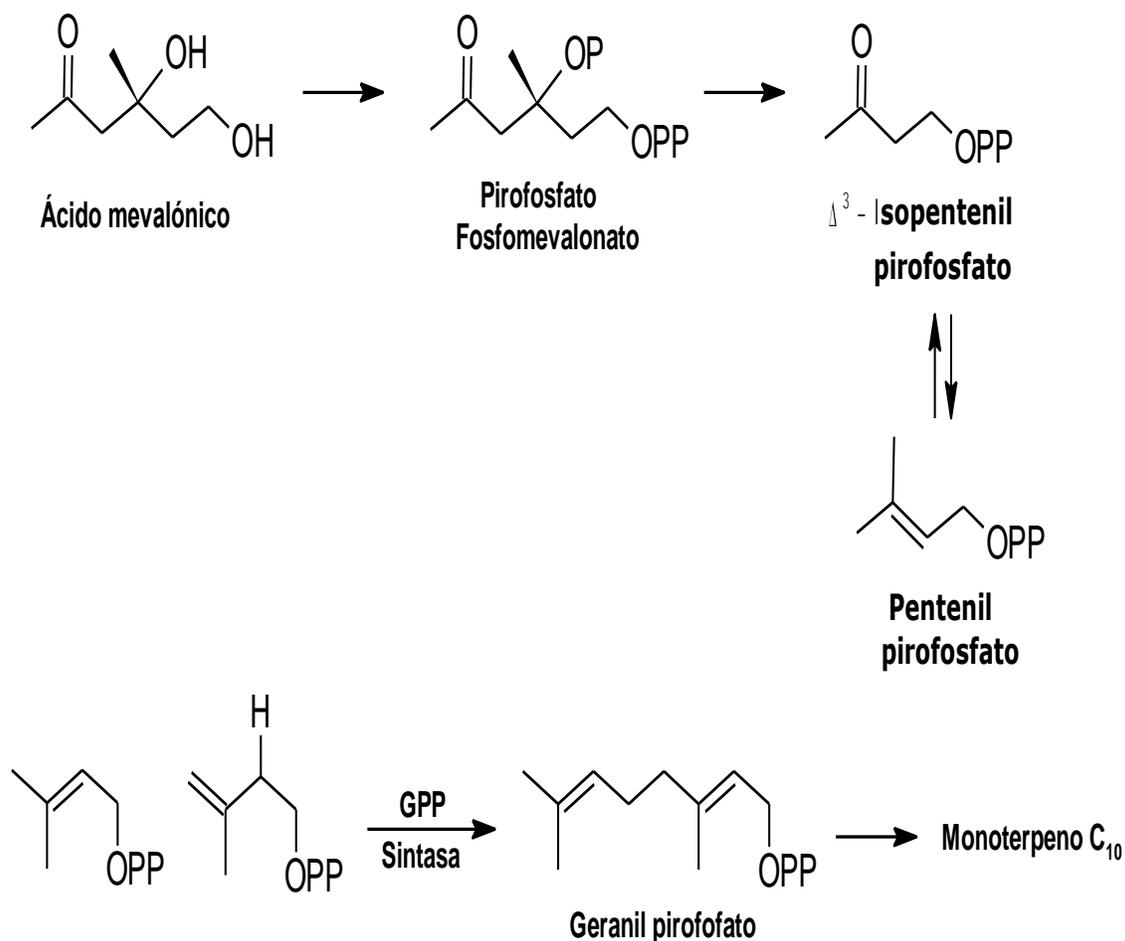
Los aceites esenciales pueden encontrarse en todos los órganos vegetales por ejemplo flores (Bergamota, Nardo y Rosas), en hojas (Toronjil, laurel y eucalipto), en raíces (vetiver), rizomas (jengibre), leños (palo de rosa), corteza (canela), frutos (anís, clavo), semillas (nuez moscada) (11).

Cuantitativamente el contenido de aceite esencial en las plantas es muy bajo, normalmente inferiores al 1% pero también hay quienes tienen porcentajes más elevados como los botones florales del clavo que poseen el 15% del peso de la muestra en forma excepcional, pero en la mayoría de las plantas nunca varía el contenido entre 1-3 % y más bien hay valores relativamente bajísimos de (0,001%) (11), que poseen olores excepcionalmente gratos y que por esta razón son requeridos, caso de las orquídeas y los lotos, cuyos aromas por encontrarse en cantidades mínimas se trata de sintetizarlas.

1.2.5 Biogénesis de los aceites esenciales

A. Biogénesis de los Monoterpenos

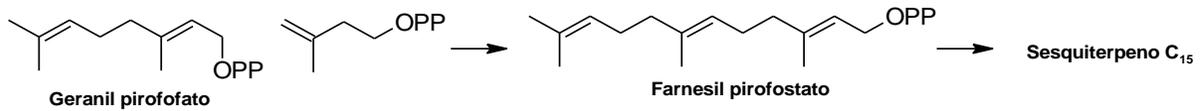
El ácido mevalónico por reacción con el pirofosfato forma el pirofosfato fosfomevalonato, que por rearrreglo molecular se transforma en pirofosfato de isopentenilo y por isomerización en pentenil pirofosfato de acuerdo con la reacción siguiente: $P_2O_7H_4$



El pentenil pirofosfato y el Δ^3 – isopentenil pirofosfato por acción del geranil pirofosfato sintasa forman el geranil pirofosfato que al perder el OPP se transforma en monoterpeno.

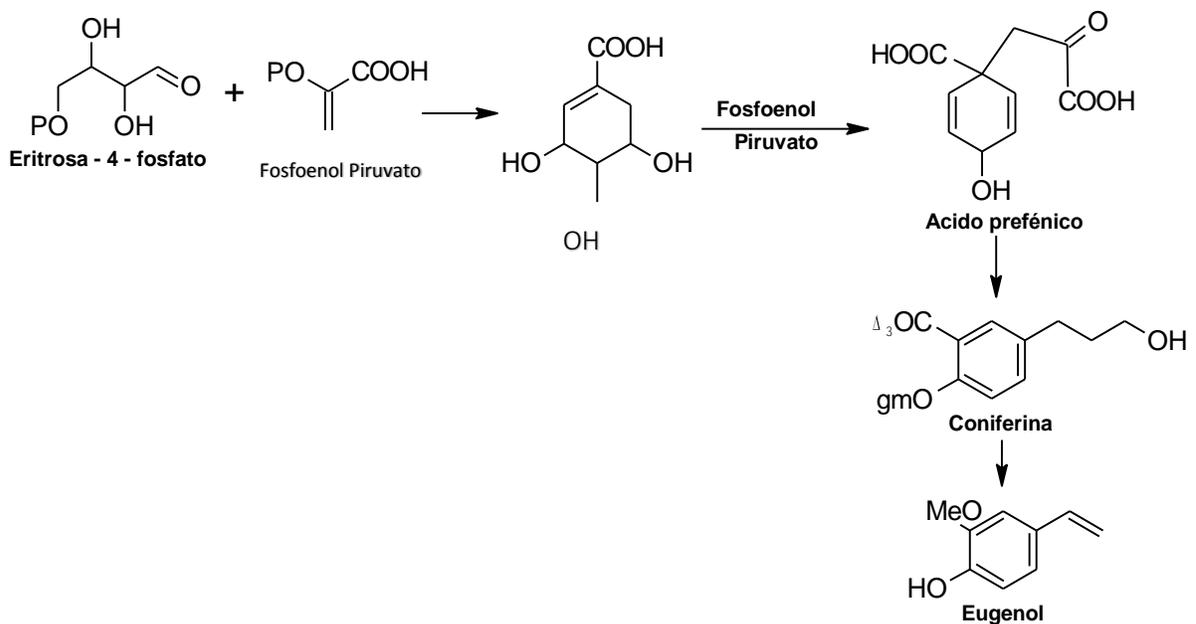
B. Biogénesis de sesquiterpenos

Luego el monoterpeno geranil pirofosfato por interacción con el isopentenil pirofosfato da lugar al sesquiterpeno C₁₅



C. Biogénesis del aceite esencial vía shikimato

El ácido shikímico por reacciones sucesivas forma el ácido prefénico, este ácido también por reacciones sucesivas forma los derivados fenólicos del modo siguiente (8):



1.2.6. Métodos de obtención del aceite esencial

Por arrastre de vapor: El método tiene tres variantes: según la textura y fragilidad de la materia prima, la primera posibilidad consiste en sumergir directamente el material vegetal intacto o pulverizado en agua hasta ebullición (100°C), los principios volátiles son arrastrados y después de condensarse el destilado al pasar por el refrigerante se separa por decantación (11).

La segunda posibilidad está referido a los productos que pueden alterarse por ebullición prolongada en este caso se sumerge en agua la materia prima, los compuestos volátiles son arrastrado por el vapor producido por un generador que se inyecta directamente en el medio donde se halla la materia prima con este vapor se separa el aceite esencial que asciende al refrigerante (11).

El tercer caso es aquel que la materia prima es sometida directamente a la acción de una corriente de vapor sin maceración previa, el agua saturada de aceite esencial, que se recupera en el destilado se reenvía al destilador (primer caso) al final de la operación el agua aromatizada o re- extraída puede ser reutilizado como solvente (11).

Por expresión: Se aplica en pericarpios frescos de cítricos, que se escarifican y cuando se rompen las cavidades secretoras el aceite esencial fluye y se recupera manual o mecánicamente, existen diferentes variantes en la aplicación de este principio: por ejemplo rallando las pieles en corriente de agua y separándolo de la fase acuosa por centrifugación, otro procedimiento es el de aplastamiento de los frutos enteros entre dos rodillos cilíndricos metálicos (prensa),seguido de eliminación de los desechos sólidos y separación del aceite esencial contenido en el zumo donde sobrenada, se separa por centrifugación el aceite esencial es posible recuperar una nueva porción de aceite esencial, por arrastre de vapor de agua de los materiales sólidos residuales(11).

Extracción con solventes: Pybus, D. *et al.* Propuso un método muy funcional para obtener el aceite esencial tratando el material vegetal según el esquema siguiente (ver fig. 1)

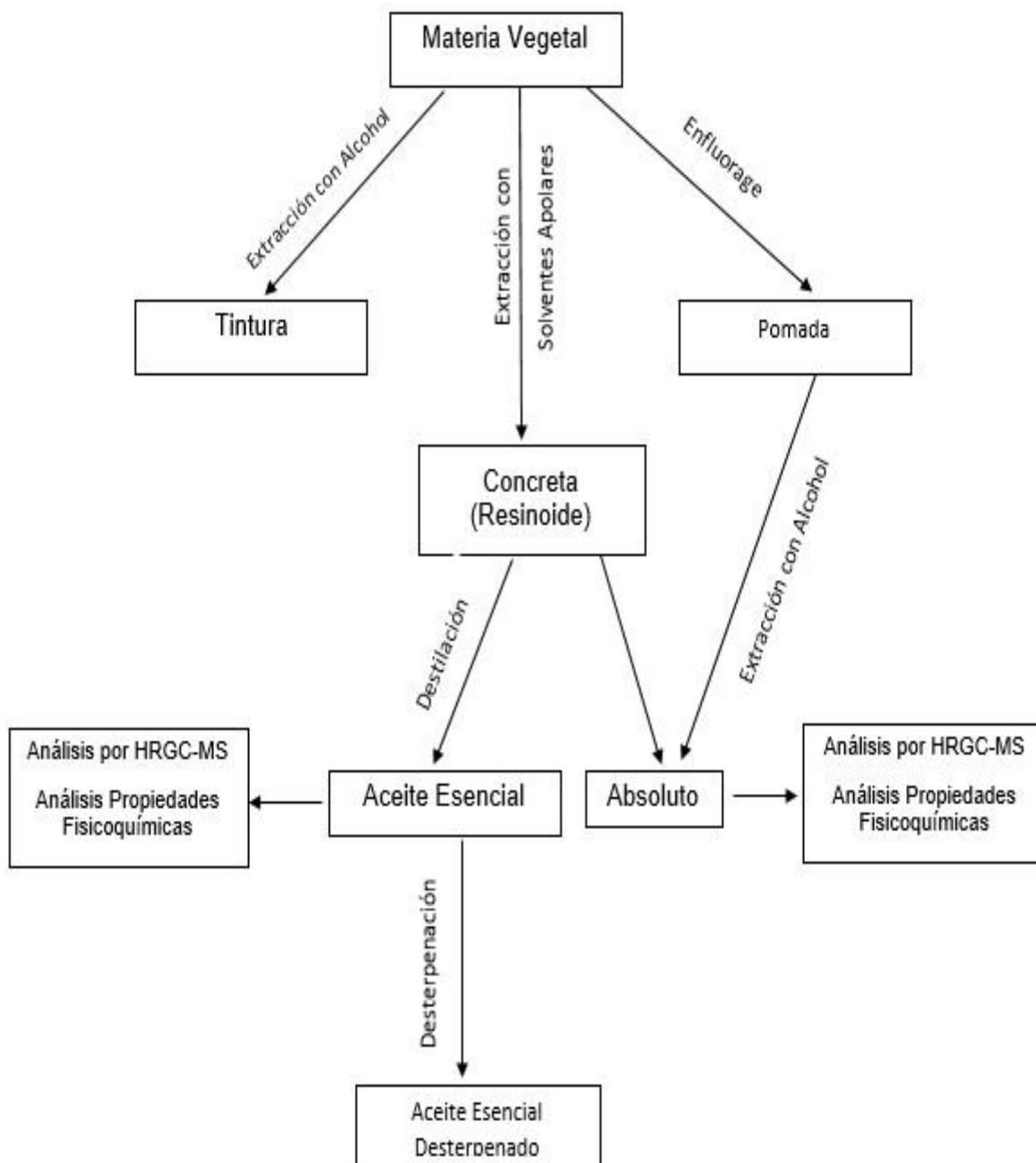


Figura 1. Esquema de extracción del aceite esencial con solventes

Fuente: The chemistry of Fragrances de Pybus D. y Sell CH.

De acuerdo con la Fig.1 en este esquema, solo hay una línea de extracción exclusiva con solventes polares, como solvente el etanol para obtener tinturas, opción aplicada a la esperma de la ballena y cachalote que produce un terpeno conocido como Ambreina que lo genera en su tracto intestinal (10). Pero las concretas (resinoide) y pomadas se obtienen con solventes de baja polaridad que luego se extraen con alcohol y se destila para obtener la esencia absoluta (Absoluto) pero cuando se elige un solvente de extracción del aceite esencial este debe cumplir los requisitos siguientes:(11).

Poder de disolución, temperatura de ebullición, poder de penetración del solvente, facilidad de reciclaje y característica del órgano vegetal. Los solventes de extracción apolar más utilizados son: pentano, hexano y éter de petróleo.

1.2.7. Extracción con gases licuados. Método de los fluidos súper críticos

Un caso particular de este método es la utilización del dióxido de carbono líquido o en estado súper crítico, el inconveniente es el costo de las instalaciones, pero el método ofrece ciertas ventajas tales como: inocuidad, no inflamabilidad, la temperatura de manipulación es baja y hay recuperación del solvente (11).

1.2.8. Medición de parámetros fisicoquímicos

Densidad: Se determinará por el método picnométrico que es el de mayor precisión en relación con el método de la balanza de Westphal, para la cual se debe calibrar el picnómetro de Weld, que se halla calibrado a 20° C, y recalibrarlo en función de la temperatura del laboratorio donde se realizará el experimento, con este propósito se introduce agua destilada libre de gases, en el interior del picnómetro, conociendo la temperatura del agua a nivel del laboratorio se busca su densidad a esa temperatura en el Handbook of Chemistry and Physics CRC- Press USA en la pág. F-10 de este manual con la densidad del agua a la temperatura experimental es posible poder determinar indirectamente el volumen del picnómetro (13). La densidad del aceite esencial es un indicador importante si este es menor de 0,9 es fácil predecir que contiene un alto porcentaje de hidrocarburos terpénicos, pero si es mayor de 0,9 se

debe a la presencia de compuestos oxigenados alifáticos (9). Y si es mayor de 1 es porque contiene aceites esenciales de naturaleza fenólica.

Índice de refracción: Se mide en un refractómetro ABBE, en los modelos disponibles los rangos son $n = 1,30 - 1,71$ y de $1,45 - 1,84$. La reproducibilidad de las lecturas individuales tiene un error cuyo valor es muy pequeño de 0,0002 conocida como índice refractivo.

El valor del índice de refracción en el instrumento se lee directamente, la fuente de luz que se emplea es una luz blanca de sodio el equipo posee dos prismas de visión directa, llamado prismas de Amici, una arriba del otro frente al objetivo telescópico, que se construye de variedades diferentes de vidrio y están diseñados para no desviar el rango de la luz correspondiente a la línea D de la luz del sodio.

Con un refractómetro ABBE de precisión se obtiene una reproductibilidad mejorada y puede aprovecharse los rangos entre $1,30 - 1,50$; $1,40 - 1,70$ y $1,33 - 1,64$. Si el índice de refracción de un aceite esencial es menor de 1,47 se puede predecir la presencia de un alto porcentaje de hidrocarburos terpénicos o de componentes alifáticos, si a la vez la densidad es mayor de 0,9 y el índice de refracción menor de 1,47 es posible que en el aceite esencial haya presencia de compuestos oxigenados alifáticos.

La densidad es inversa del índice de refracción por eso existe una importante correlación entre ambos parámetros.

Solubilidad: Se usa para medir la miscibilidad del aceite esencial en soluciones de alcohol, es útil para averiguar el contenido de sustancias oxigenadas alifáticas en el aceite esencial para lo cual se preparan soluciones etanólicas de 95%, 90%, 80%, 70%, 60%, 50% en peso, para esta determinación se pone 1 ml de esencia en una probeta de 10 ml y graduado en 0,1 ml, y en un tapón de cierre hermético se añade lentamente en porciones pequeñas soluciones etanólicas de la concentración adecuada, después de cada adición se sacude la mezcla (11).

Reacciones coloridas: Para averiguar si el aceite esencial contiene componentes de estructuras alcohólica se mezcla unas gotas de aceite esencial, 8 gotas de disulfuro de carbono y 100 mg de KOH triturado. La mezcla se agita 5 minutos, en caso positivo

aparece una coloración o un precipitado amarillo debido a los xantatos; si no hay reductores se añade 2 gotitas de molibdato de amonio al 1%, cuidadosamente se acidula la mezcla con H_2SO_4 1M, se enfría en baño de Hielo, luego se agrega 4 gotitas de cloroformo, se agita la mezcla y se deja estratificar, debe observarse si la capa clorofórmica muestra color violeta en este caso es por la presencia de alcoholes. Los aldehídos y las cetonas forman un precipitado amarillo o rojo, cuando a una gota del aceite esencial se le agrega 2 gotas de etanol y una gota de solución de 2,4-dinitrofenilhidrazina, los precipitados rojos indican carbonilos aromáticos, los anaranjados carbonilos α , β insaturados y los amarillos carbonilos saturados (9).

1.2.9. Determinación de los compuestos del aceite esencial

Análisis de los componentes por cromatografía HRGC-MS: La cromatografía de gases está especialmente indicada en el análisis cualitativo y cuantitativo de los aceites esenciales, para la identificación de los componentes del aceite esencial utilizamos cromatografía de gas líquido que está basado en el reparto del analito entre una fase móvil gaseosa y una fase líquida movilizada sobre la superficie de un sólido inerte adherido en las paredes del tubo capilar. El instrumento consta de un tanque de gas portador, una cámara de inyección de la muestra, un horno, con temperatura controlada por rampas hasta $300^\circ C$ una columna de gran longitud enrollada en forma de espiral, dentro del horno un detector de espectrometría de masas de los compuestos que se separan en la columna, un sistema de datos y el aparato de registro de los resultados (14).

Una vez separado los componentes, actúa el detector de espectrometría de masa ajustable a cualquier especie con una sensibilidad de detección de 0,25-100 pg. (Picogramos), técnica cromatográfica que se conoce como HRGC-MS (14).

El espectrómetro de masas que acompaña al cromatografo es un potente detector de alta sensibilidad, basado en la ionización de las moléculas y en la fragmentación de las moléculas según su relación masa/carga (m/z) en un sistema que funciona al vacío, los iones que llegan al detector producen una señal eléctrica ampliada, por un

transductor, a su vez la señal es procesada y registrada en un ordenador dando lugar al correspondiente espectro de masas que es una representación gráfica.

Esta técnica puede aplicarse tanto en análisis cualitativa como cuantitativa de una muestra siendo la combinación de cromatografía de gases y espectrometría de masas la más potente y de alta precisión. En la que respeta al análisis cuantitativo, la intensidad iónica detectada se puede correlacionar con la cantidad de sustancias presentes en la muestra, para llevar a cabo una cuantificación de calidad es necesario disponer de patrones de referencia y realizar una buena separación cromatográfica.

Elección del equipo para el análisis de aceite esencial por cromatografía de gases acoplado a un espectrómetro de masas:

Obtenido el aceite esencial en forma de esencia absoluta 1ml será remitido al laboratorio de Investigación en Productos Naturales de la Universidad Peruana Cayetano Heredia (UPCH) de Lima, que cuenta con un sistema GC-MS, con analizador de triple cuadrúpolo (QQQ), compuesto de un cromatografo de gases marca Agilent Technologies 7890A y un detector de espectrometría de masas Agilent Technologies 5975C.

1.3 Definición de términos básicos

Aceite esencial: Es una sustancia aromática que está presente en los órganos vegetales, contienen sustancias químicas naturales que le dan su "esencia" (olor y sabor específicos) a las plantas.

Parámetros fisicoquímicos: Son variables que caracterizan a cada aceite esencial tales como densidad, índice de refracción, solubilidad, reacciones coloridas a través de las cuales se distingue el tipo de moléculas que posee un aceite esencial.

Cromatografía de gases HRGC-MS: Es un método de análisis de los aceites esenciales que da excelentes resultados por su rapidez y precisión, con este equipo se puede determinar el número de componentes presentes que el aceite esencial, la abundancia porcentual de cada uno de ellos, el tiempo de retención, que indica el momento en que se separa cada compuesto en la columna cromatográfica.

CAPÍTULO II: HIPÓTESIS Y VARIABLES

2.1 Formulación de la hipótesis

Las propiedades y los componentes que caracterizan al aceite esencial de las hojas de *T. erecta* L. pueden determinarse por pruebas fisicoquímicas y cromatografía de gases de alta resolución acoplado a un espectrómetro de masas HRGC- MS.

2.2 Variables y su operacionalización

2.2.1. Variable independiente:

- Hoja de *Tagetes erecta* L. (rosa sisa)

2.2.2. Variable Dependiente:

- Aceite esencial

Operacionalización de variables

Variable de estudio	Definición conceptual	Tipo de variable Por su naturaleza	Indicador	Escala de medición	Medio de verificación
<p>Propiedades fisicoquímicas del aceite esencial.</p> <p>Componentes del aceite esencial de hoja de <i>Tagetes erecta</i> L.</p>	<p>El aceite esencial obtenido de hojas de <i>Tagetes erecta</i> L. Presenta determinadas propiedades fisicoquímicas, que lo caracterizan como único.</p> <p>La composición del aceite esencial de hojas de <i>Tagetes erecta</i> L. Determinada por cromatografía de gases de alta resolución HRGC-MS, presenta parámetros únicos que lo identifican</p>	<p>Cuantitativa</p> <p>Cuantitativa</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Densidad • Índice de refracción • Solubilidad • Reacciones coloridas • Número de componentes • Abundancia • Tiempo de retención 	<p>g/cm³</p> <p>Número ordinal</p> <p>porcentaje coloración</p> <ul style="list-style-type: none"> • Número ordinal • Porcentaje • Índice de Kovats minutos 	<p>Valores de los parámetros fisicoquímicos</p> <p>Cromatograma</p>

CAPÍTULO III: METODOLOGÍA

3.1 Tipo y diseño

El tipo de investigación descriptiva, diseño no experimental y transversal, porque los variables de estudio no se manipulan, los datos se recolectan en un solo momento mediante experimentos en el laboratorio según Hernández Sampieri Roberto *et al.* (15), los sujetos de estudio no se toman en forma aleatoria, ya que todas las hojas contienen los mismos componentes además las mediciones en laboratorio de química se realizan con equipos de alta precisión y exactitud.

En este diseño no experimental y transversal, la experimentación que fueron realizados en el laboratorio, constituye un algorítmico de operaciones básicas que permitieron la transformación de la materia prima (hojas) en una secuencia ordenada, hasta la obtención del producto final y el análisis de los componentes del aceite esencial.

3.2 Diseño muestral

Cuantitativa: porque se recopiló y analizaron los datos obtenidos de distintas fuentes con intervención del investigador, el aceite esencial de la especie *Tagetes erecta* L, proveniente del Centro Poblado Nina Rumi.

Área de estudio: Laboratorio de la Facultad de Ingeniería Química de la Universidad Nacional de la Amazonia Peruana (UNAP), ubicada en la calle pevas 5^{ta} cuadra de la ciudad de Iquitos, capital del departamento de Loreto.

Población vegetal: Estuvo constituido por hojas de la especie *Tagetes erecta* L, que crece con profusión (abundancia) en la zona de Zungarococha distrito de San Juan Bautista, Provincia de Maynas, Región Loreto.

Muestra vegetal: 10 kilogramos de hoja frescas de *Tagetes erecta* L, que se hallaba formando una comunidad vegetal.

Los criterios de inclusión consideraron recolectar hojas de mayor tamaño y turgencia de plantas que no estaban en floración. Se excluyeron hojas secas y/o atacadas por insectos.

3.3 Procedimientos de recolección de datos

A. Colecta de muestras vegetales: Las muestras vegetales se recolectaron en el centro poblado de Nina Rumi – Rio Nanay, distrito de San Juan Bautista, Región Loreto, tomando datos georreferenciados (3°50'30.52" S 73°22'51.29" O) y una Altitud de 120 msnm, del lugar donde fueron ubicadas.

Se tomaron fotografías para documentar el estudio, luego se recolectaron las hojas cortándolas con tijeras podadoras. Y se depositaron en una bolsa de color negro para luego transportarlo hasta el laboratorio de la Facultad de Ingeniería Química de la Universidad Nacional de la Amazonia Peruana (UNAP).

B. Preparación y limpieza de muestras Vegetales: Se limpiaron las hojas, y se procedió a lavar con agua destilada para luego secar sobre papel de filtro y aire acondicionado a una temperatura de 17°C, simultáneamente se procedió a seleccionar las hojas para la elaboración de la exsicata para su posterior identificación y certificación.

C. Certificación de la especie vegetal: El especialista del Herbarium Amazonense de la Universidad Nacional de la Amazonia peruana (UNAP), certificó la especie vegetal y entregó una constancia con su respectivo código de identificación, siguiendo los criterios taxonómicos de Arthur Cronquist.

3.4 Procesamiento y análisis de los datos

Las etapas del procesamiento de la muestra para la obtención del aceite esencial de las hojas de *T. erecta* Linn. Se muestra en el siguiente diagrama de bloques.

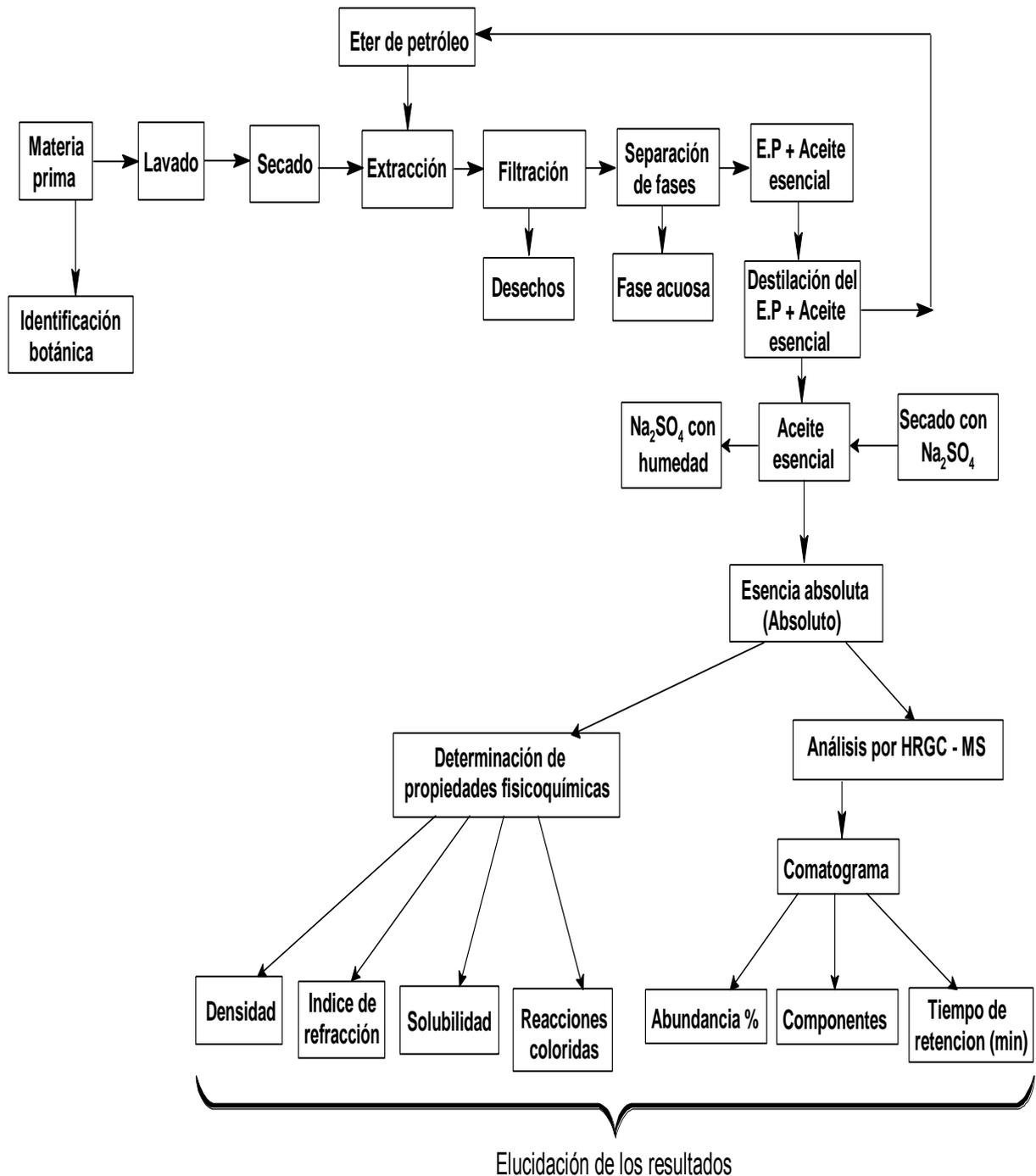


Figura 2. Flow sheet de bloques para la obtención del aceite esencial de *T. erecta* L.

Preparación de los extractos vegetales: Las hojas frescas se remojo con agua destilada y pasado por un colador, seguidamente se secó esparciendo sobre papel de filtro en ambiente de aire acondicionado a 17°C por 8 horas. Se pesó 10 kg de hojas en balanza analítica OHAUS en tandas de 100g. ½ kg de hojas se depositaron en 20 balones de vidrio de 2L de capacidad con tapa.

Se agregó en cada balón 700 ml de éter de petróleo y se dejó macerar por 48 h con agitación intermitente. Se armó una batería de búchner que consistió de las partes siguientes: 1 embudo de búchner, 1 matraz de kitasato de 2 litros de capacidad y una bomba de vacío; al embudo de búchner se le adaptó en el pistilo un tapón de caucho para acoplarlo a la boca del matraz de kitasato con el que se le hizo un cierre hermético, en la tubuladura lateral de matraz de kitasato, se incorporó una manguera de plástico duro e indeformable que se adosó al tubo de succión de la bomba de vacío. Para empezar la filtración previamente se colocó un papel de filtro whatmann circular en la placa agujerada del embudo de búchner. La filtración se realizó por tandas hasta agotar el contenido de los 20 balones cuando se accionó la bomba de vacío, empezó a pasar el filtrado con rapidez al matraz de kitasato, el filtrado era una mezcla de éter de petróleo que absorbe el aceite esencial más agua procedente de las hojas frescas denominada agua de constitución.

El filtrado se llevó a una pera de decantación en el que se separó en 2 fases abriendo la llave, se descargó el agua y se retuvo la fase etérica que forma una sola fase lipofílica con el aceite esencial. (Conocida como concreta), para el secado se utilizó sulfato de sodio anhidro para quitar el exceso de humedad de la fase lipofílica.

Se filtró la fase lipofílica con bomba de vacío para que la operación sea rápida y sin pérdida de concreta se descartó el sulfato de sodio que absorbió la humedad y la fase lipofílica se extrajo con alcohol etílico para quitar el aceite esencial contenido en la fase etérica. La mezcla alcohol etílico aceite esencial se destiló en rotavapor a temperatura de 30°C y presión reducida (Ley de Gay Lussac) para quitar el alcohol y se obtuvo la esencia absoluta.

Rendimiento del aceite esencial: Para determinar el rendimiento de aceite esencial de las hojas de *T. erecta* L, se procedió al pesado de la materia prima recolectada en una Balanza antes de someter a la extracción, luego se midió el volumen del aceite obtenido después de procesar toda la materia prima, con la densidad que se obtuvo se determinó el peso del aceite aplicando la fórmula de la densidad, después se usó la relación peso del aceite esencial entre el peso de la muestra multiplicado por cien, con la que se determinó el rendimiento del aceite esencial (los cálculos se encuentran en el anexo).

Determinación de la densidad: Para determinar la densidad se procedió de modo siguiente: se tomó un picnómetro de Weld de 5 cm³ (capacidad calibración de fábrica a 20°C), como en el laboratorio se trabaja a una temperatura de 32°C fue preciso recalibrar a esta temperatura, para lo cual se lavó con agua destilada y se secó a 110°C en una estufa, luego se pesó en la Balanza Analítica OHAUSS obteniendo el peso del picnómetro vacío, se llenó con agua destilada libre de gas y se pesó nuevamente, obteniendo el segundo peso, agua más el del picnómetro, por diferencia de estos pesos se halla el peso del agua.

la densidad de agua se busca a la temperatura experimental de laboratorio 32°C en el Handbook of Chemistry Physics en la página F-10 cuyo valor es 0,99567 g/cm³; con estos datos, aplicando la fórmula de la densidad se halla el volumen del agua que a su vez es el volumen del picnómetro.

Se descartó el agua del picnómetro, se secó nuevamente a 110°C en estufa, por una hora, se enfrió y se introdujo el aceite esencial, se pesó y se obtuvo el peso del picnómetro más el del aceite, por diferencia de peso con el del picnómetro vacío se halla el peso del aceite y por último aplicando nuevamente la fórmula de la densidad se halla la densidad del aceite (los cálculos se encuentran en el anexo).

Determinación del Índice de Refracción: Se determinó directamente en el refractómetro ABBE, una vez preparado el equipo se extendió una gota del aceite esencial con una pipeta de Pasteur sobre el prisma P₂, se cubrió el prisma P₂ con P₁

se enfocó en la luz de sodio y se dio lectura en el aparato que registró un valor de índice de refracción del aceite.

Reacciones Coloridas: Se realizó para determinar si el aceite esencial poseía componentes alcohólicos, se depositó en un tubo de prueba bien seco 4 gotas de aceite esencial y 8 gotas de disulfuro de carbono (S_2C) y se añadió 100 mg de hidróxido de potasio triturado, se agitó la mezcla por 5 minutos, se añadió 2 gotas de molibdato de amonio al 10% y cuidadosamente se aciduló la mezcla con ácido sulfúrico 1M se enfrió en baño de hielo y se agregó 4 gotas de cloroformo se agitó la mezcla se puso en reposo hasta que se formaron 2 fases, al observar la fase clorofórmica en la parte inferior del tubo apareció un color violeta lo que indica que en el aceite esencial hay presencia de sustancias con estructuras alcohólicas.

Para probar si el aceite esencial contenía sustancias de naturaleza aldehídica o cetónica se puso en un tubo de prueba 2 gotas de aceite esencial se agregaron 3 gotas de etanol y una gota de una solución de 2,4- dinitrofenilhidrazina como indicador, se formó un precipitado amarillo que advirtió la presencia de grupo carbonilo saturado.

Determinación de la solubilidad: Se determinó en soluciones etanólicas al 95%, 90%, 80%, 70%, 60%, 50% en peso esto quiere decir que se preparó soluciones alcohol-agua donde el agua se halla en proporciones de 5%,10%,20%,30%,40% y 50 % se tomó 1 ml de esencia en una probeta de 10 ml con tapón donde cada raya vale 0,1 ml, se añadió en pequeñas porciones con pipeta de Pasteur la solución etanol-agua a las concentraciones ya señaladas, se sacudió la mezcla después de cada adición, cuando se disolvió el aceite esencial se anotó el número de volúmenes requeridos hasta que completó los 10 ml de la probeta.

Cuando se agregó a la solución alcohol-agua el aceite esencial hasta que se saturó la solución se observó la opalescencia, que indica el límite de solubilidad del aceite esencial, encontramos que a la relación 60% de alcohol, 40% de agua la solución opalescencia, esto quiere decir que hay en el aceite esencial presencia de compuestos oxigenados.

Análisis mediante cromatografía de gases de alta resolución acoplado a un espectrómetro de masas HRGC-MS: Se llevó a cabo en el Laboratorio de Productos Naturales de la Universidad Peruana Cayetano Heredia de Lima (UPCH). En un equipo cromatográfico Agilent Technologies 7890A, que posee un detector de espectrometría de masa Agilent Technologies 5975C. Este equipo consta de una columna J&W 122-1545.67659 BB – 5MS325°C que tiene 60 metros de longitud por 250 mm de diámetro exterior y 0.25 mm de diámetro interior con una rampa de temperatura escalonada que empieza en 40°C y sube 5°C por minuto hasta 180°C, sigue subiendo la temperatura, pero esta vez a 2.5°C por minuto hasta 200°C manteniéndose por 5 minutos y finalmente 10°C hasta 300°C por 3 minutos.

20 microlitros de aceite esencial se disolvió en 1 ml de diclorometano y un microlitro de esta solución se inyectó en el cromatografo de gases, el tiempo de corrida de la muestra tuvo una duración de 42 minutos, se usó Helio como gas portador regulado a un caudal de 1ml/min, la columna cromatografica que está en el interior de un horno se calienta por rampas es decir regulada en forma escalonada empezando con una temperatura de 40°C sube 5°C cada minuto hasta 180°C, luego sube 25°C por minuto hasta llegar a 200°C, manteniéndose a esta temperatura por 2 minutos y finalmente ascendiendo 10°C por minuto hasta completar 300°C.

El equipo detector de los componentes existentes en el aceite esencial tiene un transductor que amplía la imagen, y un integrador que calienta el área de los picos que representa cada componente que luego se registró e imprimió en un Cromatograma, donde en el eje de las ordenadas aparece la abundancia porcentual de cada componente y en el eje de las abscisas el tiempo de retención TR (min), se observó que el primer compuesto se separó a 12,10 min y el ultimo a 25.91 minutos, estos componentes pasaron al detector de espectrometría de masas donde se fragmentaron, luego se recompusieron siguiendo el modelo Mc Lafferty, en el cromatograma se observó que estos componentes poseen estructuras de hidrocarburos alifáticos terpenoidales C₁₀ y C₁₅ e hidrocarburos de estructuras C₂₀ de naturaleza desconocida.

Se pesó con balanza analítica OHAUS se usó balones de boca esmerilada para la maceración de las hojas con éter de petróleo se precisa de peras de decantación para

separar la fase etérica, de la fase acuosa luego de la fase etérica por destilación obtener la concreta y extrayendo la concreta con alcohol se obtuvo la esencia absoluta.

Determinación de parámetros fisicoquímicos: Se determinó los parámetros fisicoquímicos siguientes: Densidad usando picnómetro de Weld, previamente calibrado a la temperatura del laboratorio y no con la calibración de fábrica a 20°C, se hizo la medición del Índice de refracción utilizando el refractómetro ABBE.

Reactivos utilizados Para las pruebas coloridas se aplicaron reactivos cromagénicos en un tubo de prueba, a 4 gotas del aceite esencial se vertió 8 gotas de disulfuro de carbono, hidróxido de potasio, molibdato de amonio, ácido sulfúrico, cloroformo, 2,4-dinitrofenilhidrazina, ácido fosfórico, metanol, reactivo de schiff, hidroxilamina y cloruro férrico.

Equipo utilizado para la Identificación de componentes: Para identificar los componentes del aceite esencial se utilizó el equipo de cromatografía de gases de alta resolución acoplado a un espectrómetro de masas de marca Agilent Technologies 7890A con un detector de espectrometría de masas Agilent Technologies 5975C del Laboratorio de Productos Naturales de la Universidad Peruana Cayetano Heredia de Lima.

Constituyentes químicos de la muestra vegetal: El equipo registro en un cromatograma el número de constituyentes del aceite esencial, la abundancia porcentual de cada uno de ellos, el tiempo de retención o índice de kovats, el tipo de moléculas, familia química, con el que se elucidó las propiedades y aplicaciones adecuadas que posee el aceite esencial, que permitió deducir su mayor capacidad de uso, y las ventajas comparativas que posee.

3.5 Aspectos éticos

La especie de *T. erecta* L. no es amenazada en su dinámica de crecimiento y propagación, porque la muestra que se extrajo por sistema de poda corresponde al órgano foliar que se renuevan permanentemente en su desarrollo normal.

CAPÍTULO IV: RESULTADOS

4.1 Rendimiento del aceite esencial

Rendimiento del aceite esencial de *T. erecta* L. la materia prima con que se trabajó fue de 10 000 g de hojas de *Tagetes erecta* L, de los cuales obtuvimos 10 g de Aceite esencial, con un rendimiento de 0,1%

4.2 Características fisicoquímicas

La densidad del aceite esencial de hojas de *Tagetes erecta* L, es 0,8132 g/cm³ y el Índice de refracción es 1,468

Tabla 1. Reacciones coloridas del aceite esencial de *T. erecta* L.

Materia prima	Presencia de	
	Alcoholes	Aldehídos y cetonas
Aceite esencial de <i>Tagetes erecta</i> L.	Aparición de color violeta (+)	Aparición de color amarillo (+)

Tabla 2. Solubilidad del aceite esencial de *T. erecta* L. En mezcla alcohol – agua

Mezcla porcentual (%) alcohol – agua	Solubilidad
[95: 5]	+
[90: 10]	+
[80: 20]	+
[70: 30]	+
[60: 40]	-

Cuando se agregó aceite esencial a la solución alcohol-agua hasta que se sature, se observa que la solución se pone opalescente, que indica el límite de solubilidad del aceite esencial, encontramos que a la relación 60% de alcohol, 40% de agua la solución se hace opalescente, esto quiere decir que hay en el aceite esencial presencia de compuestos oxigenados.

4.3 Análisis por cromatografía de gases de alta resolución con detector de espectrometría de masas

Tabla 3. Componentes del aceite esencial de hojas de *T. erecta* L.

Número	Nombre del compuesto (NIST08.L)	T _R (min)	% en la muestra (Áreas relativas)
1	Nonano	12,10	1,11
2	α-Pineno	13,36	2,79
3	Sabineno	14,62	2,01
4	β-Pineno	14,86	0,86
5	Decano	15,31	0,76
6	3-Careno	15,79	1,35
7	D-Limoneno	16,45	13,79
8	β-cis-Ocimeno	16,84	6,03
9	Terpinoleno	18,24	5,42
10	β-Linalool	18,54	8,95
11	Desconocido (C ₁₀ H ₁₄ O ₂)	19,77	8,15
12	Desconocido (C ₁₀ H ₁₆ O)	21,23	1,25
13	α-Cimen-8-ol	21,46	1,10
14	β-Fenil etil acetato	23,30	3,94
15	Piperitona	23,47	28,98
16	Desconocido C ₈ H ₇ N	24,63	1,71
17	Verbenona	25,90	0,57
18	3-Terpinolenono	25,91	0,79
19	β-Cariofileno	28,21	3,11
20	Pentadecano	29,83	0,94
21	Espatulenol	32,63	1,22
22	Desconocido (C ₂₀ H ₄₀ O)	39,57	5,17

El Cromatograma registró un total de 22 componentes entre los cuales aparecen 11 Monoterpenos aromáticos, 2 componentes sesquiterpénicos, 2 componentes

aromáticos de estructura fenólica, 3 hidrocarburos alifáticos y 4 componentes desconocidos.

Tabla 4. Monoterpenos del aceite esencial de *T. erecta* L. y tiempo de retención

Nº	Monoterpenos	Tiempo de retención (min)
1	α -pineno	13,36
2	Sabineno	14,62
3	β -pineno	14,68
4	3-careno	15,79
5	D-limoneno	16,45
6	β -cis-ocimeno	16,84
7	Terpinoleno	18,24
8	β -Linalool	18,58
9	Piperitona	23,47
10	Verbenona	25,90
11	3-terpinoleno	25,91

Tabla 5. Sesquiterpenos del aceite esencial de *T. erecta* L. y tiempo de retención

Nº	Sesquiterpenos	Tiempo de retención (min)
1	β -Cariofileno	28,31
2	Espatulenol	32,63

Tabla 6. Aromáticos del aceite esencial de *T. erecta* L y tiempo de retención

Nº	Aromáticos	Tiempo de retención (min)
1	α -cimen-8-ol	21,46
2	β -fenil etil acetato	23,30

Tabla 7. Hidrocarburos alifáticos del aceite esencial de *T. erecta* L. y tiempo de retención

Nº	Hidrocarburos alifáticos	Tiempo de retención (min)
1	Nonano	12,10
2	Decano	15,31
3	Pentadecano	29,83

Tabla 8. Compuestos desconocidos del aceite esencial de *T. erecta* L. y tiempo de retención

Nº	Compuestos desconocidos	Tiempo de retención (min)
1	C ₁₀ H ₁₄ O ₂	19,77
2	C ₁₀ H ₁₆ O	21,23
3	C ₈ H ₇ N	24,62
4	C ₂₀ H ₄₀ O	39,57

Tabla 9. Componentes del aceite esencial de *T. erecta* L. y abundancia

Nº	Compuestos aromáticos	Abundancia (%)
1	Piperitona monoterpeno monocíclico	28,98
2	D-limoneno monoterpeno monocíclico	13,79
3	β-linolol monoterpeno alicíclico	8,95
4	β-cis-ocimeno monoterpeno alicíclico	6,03
5	Terpinoleno monoterpeno monocíclico	5,42
6	β-fenil etil acetato monoterpeno monocíclico	3,94
7	β-cariofileno sesquiterpeno bicíclico	3,11
8	α-pineno monoterpeno bicíclico	2,79
9	Sabineno monoterpeno bicíclico	2,01
10	3-careno monoterpeno bicíclico	1,35
11	Espatulenol sesquiterpeno tricíclico	1,22
12	α-cimeno-8-ol-aromático fenílico monocíclico	1,10
13	β-pineno monoterpeno bicíclico	0,85
14	3-terpinoleno monoterpeno monocíclico	0,79
15	Verbenona sesquiterpeno bicíclico	0,57
Total		80,91

Tabla 10. Hidrocarburos alifáticos del aceite esencial de *T. erecta* L. y abundancia

Nº	Hidrocarburos alifáticos	Abundancia (%)
1	Nonato C ₉ H ₂₀	1,11
2	Pentadecano C ₁₅ H ₃₂	0,94
3	Decano C ₁₀ H ₂₂	0,76
Total		2,81

Tabla 11. Componentes no identificados del aceite esencial de *T. erecta* L. y Abundancia

Nº	Hidrocarburos alifáticos	Abundancia (%)
1	C ₁₀ H ₁₄ O ₂	8,15
2	C ₂₀ H ₄₀ O	5,17
3	C ₈ H ₇ N	1,71
4	C ₁₀ H ₁₆ O	1,25
Total		16,28

Tabla 12. Componentes terpenoidales con sabor a menta a las hojas de *T. erecta* L

Nº	Componentes terpenoidales	Abundancia (%)
1	Piperitona	28,98
2	D-limoneno	13,79
3	β-Linalool	8,95
4	β-cis-ocimeno	6,03
5	Terpinoleno	5,42
Total		63,17

Quimiotipo: Por el alto porcentaje de Piperitona monoterpeneo de estructura cetónica que solo le es propio a *T. erecta* L, de la Región Loreto, este componente constituye un nuevo Quimiotipo o raza química porque no se ha reportado en estudios de esta planta en otras partes del mundo a pesar de pertenecer al género y especie, debido a su ostensible variación intra-específica más bien Piperitona está presente en Mirtáceas como *Eucaliptus dives* (Eucalipto Africano) y en el género *Thymus* familia Lamiaceae ambas especies vegetales inexistentes no existen en la Amazonia Peruana. Piperitona resulta ser un componente aromático adecuado para su utilización como fuente de obtención del mentol y del timol por síntesis catalítica para usos farmacológicos y cosmetológicos

Reconocimiento de componentes de naturaleza alcohólica y cetónica: Las pruebas coloridas que se aplicaron para la identificación de alcoholes y cetonas dieron resultados positivos y fueron corroborados plenamente con los resultados del análisis por cromatografía de gases de alta resolución acoplado a un espectrómetro de masas, mediante este análisis se evidenció la presencia de 3

alcoholes: β -Linalool, α -Cimen-8-ol, Epatulenol y de 3 cetonas: Terpinoleno, Piperitona, Verbenona, lo que indica que la medición de los parámetros fisicoquímicos gozan de certidumbre.



Fuente: Elaboración propia

Figura 3. Composición porcentual del aceite esencial de las hojas de *T. erecta* L.

CAPÍTULO V: DISCUSIÓN

Estableciendo una comparación entre el aceite esencial de *T. erecta* Linn de la India aislado por arrastre de vapor por Baslas, RK. *et al.* bajo el Título Chemical Essential Oil from the Leaves of *Tagetes erecta* Linn (3) frente al aceite esencial de *T. erecta* L, de la Región Loreto se encontró marcada diferencia entre los componentes de ambos aceites esenciales a pesar de pertenecer al mismo género y especie vegetal, pues mientras Baslas, RK. *et al.* Solo encontró 11 componentes, en *Tagetes erecta* L, de la amazonia se encontró 22 componentes.

De los 11 componentes del aceite esencial de *Tagetes erecta* L, reportado por Baslas, RK. *et al.* Solo 4 componentes coinciden con los del aceite esencial de la Región Loreto, pero con diferente abundancia porcentual que son consecuentemente debido a los mecanismos quimiotaxonómicos condicionados por los factores ambientales y del suelo.

7 componentes restantes del aceite esencial de *T. erecta* Linn de la India no son coincidentes con los componentes del aceite esencial de *T. erecta* Linn de la Región Loreto-Perú. Tales son: Dipenteno, β -felandreno, Geraniol, Mentol, Tagetona, Nonanol y Linalilacetato.

10 componentes presentes en el aceite esencial de *T. erecta* Linn de la Región Loreto son inexistentes en el aceite esencial de *T. erecta* L, estudiado por Baslas, RK. *et al* (3). Por otro lado, se puede observar en el estudio de Baslas, RK. *et al.* Que el componente de mayor abundancia es Linalool con 26,80%, mientras en *T. erecta* L de la Región Loreto-Perú el componente de mayor abundancia es Piperitona con 28,98% de abundancia.

En consecuencia, hay una clara variación intra-especifica entre los componentes de los aceites esenciales de una misma planta que crecen en lugares diferentes del planeta con suelos diferentes, climas diferentes, mares, ríos y estaciones diferentes, etc.

Si continuamos estableciendo variaciones con otras especies de *Tagetes*, observaremos que *T. elliptica* Smith de la serranía peruana, estudiado por Segovia, I. *et al.* bajo el Título: Composición Química del Aceite Esencial de *Tagetes elliptica*

“Chincho” actividad anti-oxidante, anti-bacteriana, anti-fúngica (6), el aceite esencial analizado por CG/EM reportó 16 componentes, donde solo 2 de estos componentes son idénticos al del aceite esencial de *T. erecta* L, de la región Loreto el α -Pino y Verbenona, los otros 14 son diferentes, pero además en la especie *T. Ellíptica* se observa la presencia de un componente el FORBOL con 34,15% de abundancia, esta sustancia es un Tigliano tetracíclico ($C_{20}H_{28}O_6$) de naturaleza diterpenoidal presente en Euforbiáceas y que posee propiedades anti-cancerígenas para el Cáncer de piel pero sus esteres son contrariamente cancerígenos.

Díaz Cedillo publicó en su estudio de *Tagetes parryi*, trabajando con una muestra de esta planta recogida en el estado de San Luis de Potosí y aplicando CG/EM encontró 7 componentes: Canfeno (9,6%), 3, 6,6 Trimetil-2-nor pro-pinonol (9,10%), Anisol (6,0%), 4-isopropil-1-metil-2-Ciclohexanol (5,0%), 1,8- Cineol (Eucaliptol) (4,8%), Eugenol (1,4%), α -terpineol (1,2%), ninguno de estos componentes coincide con los que posee el aceite esencial de la Región Loreto- Perú.

Finalmente el mismo autor Díaz Cedillo estudiando el aceite esencial de la parte aérea de la planta de *Tagetes lacera*, por análisis CG/EM, encontró 6 componentes que son lo siguiente: E-Tagetona (26,2%), Crisantenona (24,8%), Verbenona (22,1%), α -Thugeno (20,5%), β -pino (3,1%) y α -pino (1,9%), 3 de estos componentes α -pino, β -pino y Verbenona aunque con diferente abundancia coinciden con los componentes del aceite esencial de la Región Loreto, Biogénicamente hay limitado número de componentes en esta muestra por la alta abundancia de E-tagetona, Crisantenona y Verbenona cuya suma representan el 93,6% de abundancia siendo poco significativo la abundancia de α y β – pino que juntos suman 5%.

CAPÍTULO VI: CONCLUSIONES

Después de haber establecido las comparaciones minuciosas de los componentes del aceite esencial de *T. erecta* L, procedente de Loreto-Perú con *T. erecta* L, procedente de la India. no cabe duda que existe una ostensible variación intra-específica entre los componentes de una misma planta que crecen en diferentes partes del mundo debido a que son determinantes las condiciones climáticas, estaciones, el suelo, la altitud, los cuerpos de agua y tipos de vegetación.

Es mayor aun tal variación cuando se trata de especies diferentes tales como: *T. elíptica* Smith “Chincho” de la Sierra del Perú estudiado por Segovia, I. *et al.* (6), *T. parryi* del Estado de San Luis de Potosí México estudiado por Díaz, F. *et al.* (7) y *T. lacera* de la Baja California Sur de México estudiado por el mismo autor (8).

Es pertinente señalar que el aceite esencial de *T. erecta* Linn de la Región Loreto-Perú por mostrar un 28,98% de Piperitona que no está presente en ninguna de las especies citadas constituye un nuevo quimiotipo (raza química) que puede denominarse quimiotipo Piperitona de Loreto-Perú, un monoterpeno cetónico aislado del aceite esencial de otras especies vegetales como: *Cymbopogon*, *Andropogon* ambos de la familia Poaceae, pero también aislado de *Menta Spp*, familia Lamiaceae, en forma levógira de *Picea sitchensis* Familia Pinaceae, de *Eucaliptus dives* de la familia Myrtaceae y de *Peppermint* (menta) Familia Lamiaceae, familias diversas de plantas que no tienen un tronco biogenético común con Asteráceae, siendo este compuesto aromático de amplia presencia en otras familias.

El *Eucaliptus dives* de África es la principal materia prima para obtener Piperitona materia prima para sintetizar mentol y timol. Piperitona de forma levogire tiene olor a menta y se usa como dentífrico, como tal la mayor ventaja comparativa y mayor capacidad de uso, es que sirve como materia prima de la industrias farmacéutica, cosmética y licorera, mediante una síntesis catalítica es posible obtener mentol y timol (12).

CAPÍTULO VII: RECOMENDACIONES

Que la Facultad de Agronomía de la UNAP, realice cultivo de *T. erecta* Linn en forma permanente por ser planta de crecimiento rápido de fácil propagación y cultivo que no requiere especial cuidado a fin de que las hojas sean utilizadas por los profesionales químicos farmacéuticos de la Facultad de Farmacia y Bioquímica para la obtención del aceite esencial.

con propósitos farmacológicos, cosmetológicos y en la licorería pero simultáneamente el procesamiento de la flor debe ser una línea de actividad productiva por la facultad de Industrias Alimentarias para ser usado como colorante carotenoide por su alto contenido de luteína como aditivo en la elaboración del queso, mantequilla, yogurt además la Facultad de Agronomía debe utilizar la flores pulverizados para adicionar a los alimentos balanceados de las aves de corral y de cerdos para dar coloración viva a las carnes y a los huevos para darle una mejor presentación fresca, turgencia y aporte de sustancias antioxidantes.

CAPÍTULO VIII: FUENTES DE INFORMACIÓN

1. Soukup J. Vocabulario de los Nombres Vulgares de la Flora Peruana Catálogo de Géneros. Editorial Salesianos 1970 Lima-Perú
2. Judd Campbell, Kellogg, Stevens, Donoghue. Plant Systematics. A. Phylogenetic Approach. Second Edition Ed. Sinauer Associates. Inc. Publisher Sunderland Massachusetts. USA. 2002. Pag. 478-480
3. Baslas RK, Kurner Singh Ashock. Journal of the Indian Chemical Society. India vol. LVIII. Número 1, 1981. Pag. 104
4. Alok Krishna, Sushil Kumar, Gopal R. Mallavarapu & Srinivasaiyer Ramesh, Composition of the Essential Oils of the Leaves and Flowers of *Tagetes erecta* L., Journal of Essential Oil Research, 2004, 16:6, 520-522, DOI:10.1080/10412905.2004.9698786, <http://dx.doi.org/10.1080/10412905.2004.9698786>
5. Isiaka A. Ogunwande & Nureni O. Olawore, The Essential Oil from the Leaves and Flowers of "African Marigold," *Tagetes erecta* L., Journal of Essential Oil Research 2006, 18:4, 366-368, DOI: 10.1080/10412905.2006.9699115: <http://dx.doi.org/10.1080/10412905.2006.9699115>
6. Segovia B, Ingrid K, Suarez de la Cruz, Lucybel castrol, Américo J, Suarez C, Silvia Ruiz Q, Julio R. Composición Química del Aceite Esencial de *Tagetes elliptica*, Smith "chincho Actividad antioxidante, antibacteriana y anti fúngica. Lima-Perú, Revista Ciencia e Investigación. Facultad de Farmacia y Bioquímica UNMSM 2010 13(12) Pág. 81-86
7. Díaz Cedillo Francisco, Cerrato Cruz Miguel. Composición del aceite esencial de *Tagetes parryi*. México. Revista de Fitotecnia Mexicana.2012. vol. 34 (2) pág. 145-148.
8. Díaz Cedillo Francisco, Serrato Cruz Miguel, Arce Montoya Mario, León de la Cruz José, Composición del aceite esencial de *Tagetes lacera*, Planta endémica de la Baja California sur, México. Revista Mexicana de la Biodiversidad México 2012. vol 83 pag. 543-547.
9. Domínguez Xorge. Métodos de Investigación Fitoquímica. Editorial Limusa. México 1979. Pág. 68.

10. Pybus D, Sell ch, The chemistry of Fragrances. Editorial Royal Society of Chemistry UK.1999. Pag.21.
11. Bruneton Jaen. Elementos de Fitoquímica y Farmacognosia. Editorial Acribia S.A. España 2001. pág. 238.
12. Laszlo Pierre, Riviera Sylvie. Perfume Arte y Ciencia. Editorial OMEGA. España 2001. Pág. 20-21.
13. Handbook of Chemistry and Physics. 66 Edición. Florida. Editorial CRC-Press, Inc.1985. Pág F-10.
14. Skoog, West, Holler, Crouch. Fundamentos de Química Analítica. Editorial Thompson. VIII Edición. USA. Pág. 959.
15. Hernández Sampieri Roberto, Fernández Collado Carlos, Baptista Lucia María del Pilar. Metodología de la Investigación. Editorial. Mc Graw Hill. 2010. Pg. 145.

ANEXOS

Anexo 1. Constancia de clasificación botánica



UNAP

Centro de Investigación de
Recursos Naturales
Herbarium Amazonense - AMAZ

INSTITUCION CIENTIFICA NACIONAL DEPOSITARIA DE MATERIAL BIOLÓGICO
CODIGO DE AUTORTIZACION AUT-ICND-2017-005

CONSTANCIA

EL COORDINADOR DEL HERBARIUM AMAZONENSE, AMAZ-CIRNA, DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA AMAZONIA PERUANA

HACE CONSTAR:

Que, la muestra botánica presentada por **Sthefany Lucero Cachi Ríos y Rafael Góngora Flores**, Bachilleres de la Escuela Profesional de Farmacia y Bioquímica, Facultad de Farmacia y Bioquímica, de la Universidad Nacional de la Amazonia Peruana, pertenece a la tesis titulado: "CARACTERIZACION FISICOQUÍMICA Y CROMATOGRAFÍA DEL ACEITE ESENCIAL DE HOJAS DE *Tagetes erecta* L."; fue verificado y determinado en este Herbarium Amazonense (AMAZ), del Centro de Investigación de Recursos Naturales (CIRNA), de la Universidad Nacional de la Amazonia Peruana (UNAP), como a continuación se indica:

Código AMAZ	Nombre científico	Familia	Nombre vulgar
012143	<i>Tagetes erecta</i> L.	Asteraceae	"rosa sisa"

Se expide la presente constancia a las interesadas, para los fines que estimen conveniente.

Atentamente,

Iquitos, 08 de setiembre, 2020

Blgo. Richard J. Huaranca Acosta M.Sc.
Coordinador del Herbarium AMAZ
CIRNA-UNAP



Anexo 2. Constancia de análisis del aceite esencial. Hojas de datos, cromatografía y cromatograma



UNIVERSIDAD PERUANA
CAYETANO HEREDIA

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN EN PRODUCTOS NATURALES

Informe de resultados

Solicitante: Ing. Julio Arce, UNAP
Muestra: 2 muestras de aceites esenciales con códigos: "X.m.JARA" y "Te-Sc-RG".
Análisis: Composición química (compuestos volátiles y semivolátiles) de 2 aceites esenciales por Cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas.
Fecha de entrega de Resultados: 24 julio 2019

RESULTADOS

En las páginas 2 a 7 del presente informe.

Atentamente,

Dra. Rosario Rojas Durán

Unidad de Investigación en Productos Naturales
LID-Laboratorio 209
e-mail: rosario.rojas@upch.pe
<https://investigacion.cayetano.edu.pe/catalogo/productosnaturales/uiipn>
Teléfono: 51-1-3190000 Anexo 233227

Página 1 de 7

Av. Honorio Delgado 430, Lima 31 / Apartado Postal 4314
Central Telefónica: (511) 319-0000 2402 Secretaría Académica de
Facultad de Ciencias y Filosofía Alberto Cazorla Talleri

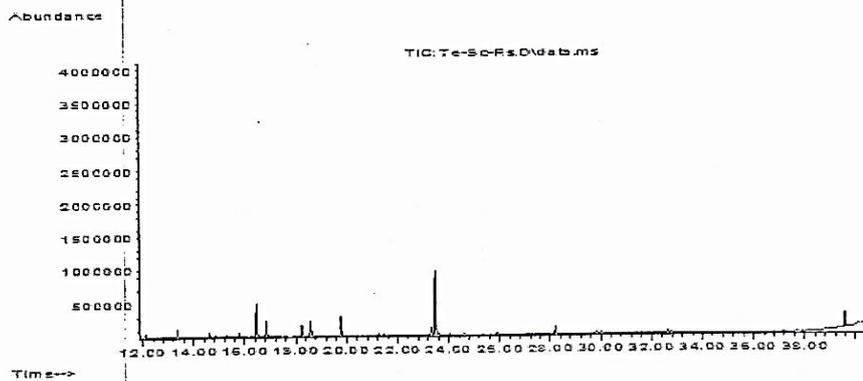
ACEITE ESENCIAL "Te-Sc-RG"

Se identificaron 22 compuestos que comprenden el 100% de la composición total del aceite esencial.

Número	Nombre del compuesto (NIST08.L)	t _R (min)	% en la muestra (áreas relativas)
1	Nonano	12.10	1.11
2	α-Pineno	13.36	2.79
3	Sabineno	14.62	2.01
4	β-Pineno	14.86	0.86
5	Decano	15.31	0.76
6	β-Careno	15.79	1.35
7	D-Limoneno	16.45	13.79
8	β-cís-Ocimeno	16.84	6.03
9	Terpinoleno	18.24	5.42
10	β-Linalool	18.58	8.95
11	Desconocido (C ₁₀ H ₁₄ O ₂)	19.77	8.15
12	Desconocido (C ₁₀ H ₁₆ O)	21.23	1.25
13	p-Cimen-8-ol	21.46	1.10
14	β-Fenil etil acetato	23.30	3.94
15	Piperitona	23.47	28.98
16	Desconocido (C ₈ H ₇ N)	24.62	1.71
17	Verbenona	25.90	0.57
18	β-Terpinolenono	25.91	0.79

19	β -Cariofileno	28.21	3.11
20	Pentadecano	29.83	0.94
21	Espatuleno	32.63	1.22
22	Desconocido (C ₂₀ H ₄₀ O)	39.57	5.17

Cromatograma GC-MS del aceite esencial "Te-Sc-RG"



Condiciones cromatográficas para los 2 aceites esenciales:

Equipo: Cromatógrafo de gases Agilent Technologies 7890A con detector espectrómetro de masas Agilent Technologies 5975C.

Columna: J&W 122-1545.67659 DB-5ms, 325 °C: 60 m x 250 µm x 0.25 µm

Rampa de temperatura: Empieza en 40 °C y sube a 5 °C/min hasta 180 °C; 2.5 °C/min hasta 200 °C manteniéndose por 2 min y finalmente 25 °C/min hasta 300 °C.

Tiempo de corrida: 42 min

Volumen de Inyección: 1 µL

Split: 30:1

Gas portador: He, 1 mL/min

Muestras:

Te-Sc-RG: 20 µL del aceite esencial fueron disueltos en 1 mL de diclorometano y se inyectó 1 µL de la solución en el cromatógrafo de gases.

X.m.JARA: 11 mg del aceite esencial fueron disueltos en 1 mL de diclorometano y se inyectó 1 µL de la solución en el cromatógrafo de gases.

Cálculo del rendimiento del aceite esencial de *T. erecta* L.

Volumen obtenido del aceite 12,3 cm³

Densidad del aceite 0,8132 g/cm³

Con estos datos se calcula la masa del aceite obtenido

$$\rho = \frac{m}{V} \rightarrow m = \rho \cdot V \rightarrow m = 0,8132 \cdot 12,30 = 10,00 \text{ g}$$

Para hallar el rendimiento se aplica la siguiente relación

$$\begin{aligned} \% \text{Rendimiento} &= \frac{\text{Peso del aceite esencial} \times 100}{\text{Peso materia prima}} = \frac{10,00 \text{ g} \times 100}{10,000 \text{ g}} = \frac{1000,0 \text{ g}}{10,000 \text{ g}} \\ &= 0,10 \% \end{aligned}$$

Las hojas de *T. erecta* L. contienen 0.10% de aceite esencial.

Cálculo para hallar la densidad del aceite

Peso de picnómetro vacío: 25, 1217 g (I)

Se llenó el picnómetro con agua destilada libre de gas y se pesó

Peso de picnómetro más agua: 30,1430 g (II)

Se sustrajo al (II) el valor de (I) para obtener la masa de agua.

$$II - I \rightarrow 30,1430 - 25,1217 = 5,0213 \text{ g}$$

Para los cálculos se aplicó la fórmula siguiente

$$\rho = \frac{m}{V} \text{ (A)}$$

En esta expresión se conoce la masa del agua: 5,0213 g.

Densidad de agua a 32°C es 0,99567 g/cm³

Despejando de (A) el volumen

$$\rho = \frac{m}{v} \rightarrow v = \frac{m}{\rho} = \frac{5,0213}{0,99567} = 5,043 \text{ cm}^3$$

El volumen obtenido es el volumen del agua, pero a su vez es el volumen de picnómetro a 30°C de temperatura experimental.

Peso del picnómetro + aceite esencia = 29,2225 g (III)

Se sustrae a III el valor de I para obtener el peso o masa de aceite esencial.

$$\text{masa del aceite esencial} = 29,2225 - 25,1217 = 4,1008 \text{ g}$$

Como el volumen de picnómetro también es equiparable con el volumen de aceite esencial, entonces se calcula la densidad del aceite esencial.

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{4,1008 \text{ g}}{5,0430 \text{ cm}^3} = 0,8132 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

Anexo 3. *Tagetes erecta* Linn. Caserío de Zungarococha



Anexo 4.- Procesamiento de las hojas de *Tagetes erecta* Linn.



Anexo 5.- Posición Geográfica.

