

**UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN CRISTÓBAL  
DE HUAMANGA**

**ESCUELA DE POSGRADO**

**UNIDAD DE POSGRADO DE LA FACULTAD DE  
INGENIERÍA QUÍMICA Y METALURGIA**



**TESIS:**

**Grupos funcionales y componentes volátiles del aceite esencial de  
frutos de molle (*Schinus molle* L), que se generan en la extracción  
por arrastre de vapor**

Para optar el Grado Académico de:

**MAESTRO EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA QUÍMICA,  
MENCIÓN EN INGENIERÍA EN GESTIÓN Y DESARROLLO  
DE LOS RECURSOS NATURALES**

PRESENTADO POR:

**Bach. Jesus Javier PANIAGUA SEGOVIA**

ASESOR:

**Mtro. Abrahán Fernando TREJO ESPINOZA**

**AYACUCHO - PERÚ**

**2025**

## **DEDICATORIA**

A la memoria de mamá Juanita y mi hermano Oscar. A mi padre Abraham y mis hermanos María, José, Juan, Yuri. A mi esposa Inés y mi pequeña Quyllur Juana.

## **AGRADECIMIENTOS**

A la Escuela de Post grado, sección de posgrado de la Facultad de Ingeniería Química y Metalurgia, de la Universidad Nacional de San Cristóbal de Huamanga.

Al Vicerrectorado de Investigación de la UNSCH, por la subvención de financiamiento de esta tesis de postgrado con recursos de FOCAM.

A mi familia, mis padres y hermanos que estuvieron al tanto del desarrollo de la tesis.

A mi asesor, M.Q. Ing. Abrahán Fernando TREJO ESPINOZA, mi agradecimiento por su apoyo en el desarrollo de este trabajo de investigación.

A mis colegas de la UNSCH, Facultad de Ingeniería Química y Metalurgia, por el apoyo y las recomendaciones para la finalización de este trabajo de investigación.

Al Dr. Francisco Aquino y Frank Silva del Instituto de Química de la Universidad Federal de Uberlândia, Uberlândia - Brasil por su apoyo en las determinaciones en cromatografía de gases acoplado a espectrofotómetro de masa.

## RESUMEN

El objetivo de esta investigación fue identificar los grupos funcionales y componentes volátiles mayoritarios del aceite esencial de frutos de molle (*Schinus molle* L) que se obtienen en la extracción por arrastre con vapor a diferentes temperaturas y tiempos de extracción. Los frutos maduros de molle fueron recolectados en Iguain – Huanta – Ayacucho - Perú; las alícuotas (AE y AF) de aceites esenciales fueron extraídos por arrastre con vapor a temperaturas de 90,3 °C (AE) y 81,3 °C (AF) con tiempos de extracción de 30, 60, 90, 120, 180, 240, 300, 360 min respectivamente; la identificación de los grupos funcionales y los componentes mayoritarios en las alícuotas de aceites esenciales se realizaron utilizando el FTIR-ATR y el GC – MS. En la evaluación del porcentaje de extracción del aceite esencial los frutos de molle, tanto a 90,3 °C y 81.3 °C, el 88 % de aceite esencial fueron extraídos durante los primeros 120 min; mediante FTIR-ATR se han determinado que en las alícuotas predominan los grupos funcionales alqueno, alcano, éster, alqueno conjugado, alqueno cíclico, alcoholes, éter; mediante GC-MS se han determinado que en las alícuotas predominan el  $\alpha$ -Pino, Sabineno,  $\beta$ -Pino,  $\alpha$ -Felandreno, Limoneno, Metil caprilato, Cariofileno, Bicyclogermaceno,  $\beta$ -Cadineno; en los primeros 120 min de extracción predominan altos porcentajes de  $\alpha$ -Felandreno,  $\beta$ -Pino y Limoneno y a partir de los 240 min de extracción predominan el Bicyclogermaceno,  $\beta$ -Cadineno, Cariofileno y  $\alpha$ -Felandreno tanto en la alícuotas AE y AF; las alícuota de aceite esencial con alto porcentaje en alfa-felandreno, puede conferir efectos antitumorales, actividad biopesticida, repelente y conservación de alimentos demostrados en otras investigaciones. Existe variación de propiedades físicas y químicas del aceite esencial de frutos de molle durante los distintos de tiempos de extracción por arrastre con vapor en Ayacucho.

**Palabras clave:** aceite esencial, molle, FTIR-ATR, GC-MS, destilación por arrastre con vapor.

## ABSTRACT

The objective of this research was to identify the functional groups and major volatile components of the essential oil of molle fruits (*Schinus molle* L) obtained by steam extraction at different temperatures and extraction times. Ripe molle fruits were collected in Iguain – Huanta – Ayacucho - Peru; aliquots (EA and AF) of essential oils were extracted by steam extraction at temperatures of 90.3 °C (EA) and 81.3 °C (AF) with extraction times of 30, 60, 90, 120, 180, 240, 300, 360 min respectively; the identification of the functional groups and major components in the aliquots of essential oils was performed using FTIR-ATR and GC – MS. In the evaluation of the percentage of essential oil extraction from the molle fruits, both at 90.3 ° C and 81.3 ° C, 88 % of the essential oil was extracted during the first 120 min; by FTIR-ATR it has been determined that the functional groups alkene, alkane, ester, conjugated alkene, cyclic alkene, alcohols, ether predominate in the aliquots; by GC-MS it has been determined that  $\alpha$ -Pinene, Sabinene,  $\beta$ -Pinene,  $\alpha$ -Phellandrene, Limonene, Methyl caprylate, Caryophyllene, Bicyclogermacene,  $\beta$ -Cadinene predominate in the aliquots; In the first 120 min of extraction, high percentages of  $\alpha$ -Phellandrene,  $\beta$ -Pinene and Limonene predominate, and from 240 min of extraction, Bicyclogermacene,  $\beta$ -Cadinene, Caryophyllene and  $\alpha$ -Phellandrene predominate in both the AE and AF aliquots; the essential oil aliquots with a high percentage of alpha-phellandrene can confer antitumor effects, biopesticidal activity, repellent and food preservation demonstrated in other research. There is variation in the physical and chemical properties of the essential oil of molle fruits during different times of steam extraction in Ayacucho.

**Keywords:** essential oil, molle, FTIR-ATR, GC-MS, steam distillation.

## INDICE

<b>CAPÍTULO I</b> .....	1
<b>ASPECTOS GENERALES</b> .....	1
<b>1.1. INTRODUCCIÓN</b> .....	1
<b>1.2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA</b> .....	2
1.2.1. Identificación del problema .....	2
1.2.2. Descripción del problema.....	2
1.2.3 Formulación del problema.....	3
<b>1.3. OBJETIVOS</b> .....	4
<b>1.4. IMPORTANCIA Y JUSTIFICACIÓN</b> .....	4
<b>1.5 HIPÓTESIS</b> .....	5
<b>1.6 VARIABLES E INDICADORES</b> .....	5
<b>CAPÍTULO II</b> .....	7
<b>REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA</b> .....	7
<b>2.1. ANTECEDENTES</b> .....	7
2.1.1. Nacional .....	7
2.1.2. Internacional .....	8
<b>2.2. BASES TEÓRICAS</b> .....	9
2.2.1. Molle ( <i>Schinus molle</i> L.).....	9
2.2.2. Aceite esencial .....	13
2.2.3 Aceite esencial de molle ( <i>Schinus molle</i> L.).....	16
2.2.4. Extracción de aceites esenciales .....	17
2.2.5 Espectroscopia Infrarroja – reflectancia total atenuada (FTIR-ATR) .....	20
<b>CAPÍTULO III</b> .....	26
<b>MATERIALES Y MÉTODOS</b> .....	26
<b>3.1. TIPO DE INVESTIGACIÓN.</b> .....	26
<b>3.2. NIVEL DE INVESTIGACIÓN.</b> .....	26
<b>3.3. MÉTODO.</b> .....	26
<b>3.4. POBLACIÓN Y MUESTRA.</b> .....	26
<b>3.5. DISEÑO EXPERIMENTAL.</b> .....	27
3.5.1. PROCEDENCIA DE FRUTOS DE MOLLE. ....	27
3.5.2 EXTRACCIÓN DEL ACEITE ESENCIAL DE FRUTOS DE MOLLE. ....	28

<b>3.5.3 CARACTERIZACIÓN DEL ACEITE ESENCIAL DE FRUTOS DE MOLLE.</b>	31
.....	
<b>3.6 MATERIALES E INSTRUMENTOS</b> .....	35
<b>3.6.1 Materiales de laboratorio</b> .....	35
<b>3.6.2 Reactivos químicos</b> .....	36
<b>3.6.3 Instrumentos y equipos</b> .....	36
<b>3.7 LUGAR Y AMBIENTES DE EJECUCIÓN</b> .....	36
<b>3.8 ANÁLISIS ESTADÍSTICO</b> .....	36
<b>CAPITULO VI</b> .....	37
<b>RESULTADOS Y DISCUSIONES</b> .....	37
<b>4.1 EXTRACCIÓN DE ACEITES ESENCIALES DE FRUTOS DE MOLLE (SCHINUS MOLLE L)</b> .....	37
<b>4.1.1 Porcentaje de extracción de aceite esencial de frutos de molle</b> .....	39
<b>4.1.2 Análisis de varianza (ANOVA) extracción de aceite esencial de frutos de molle</b> .....	41
<b>4.2 ÍNDICE DE REFRACCIÓN DE ACEITE ESENCIAL DE FRUTOS DE MOLLE</b> .....	41
<b>4.2.1. Análisis de varianza (ANOVA) de índice de refracción de aceite esencial de frutos de molle, extraídos a 90,3 y 81,3 °C, a diferentes tiempos</b> .....	43
.....	
<b>4.3 DENSIDAD DE ACEITE ESENCIAL DE FRUTOS DE MOLLE</b> .....	43
<b>4.3.1. Análisis de varianza (ANOVA) de índice de refracción de aceite esencial de frutos de molle, extraídos a 90,3 y 81,3 °C, a diferentes tiempos</b> .....	45
.....	
<b>4.4 ESPECTROS INFRARROJO DE ACEITE ESENCIAL DE FRUTOS DE MOLLE.</b>	45
.....	
<b>4.4.1 Grupos funcionales de aceite esencial de frutos de molle</b> .....	48
<b>4.4.2 Absorbancias de los distintos grupos funcionales aceite esencial de frutos de molle</b> .....	50
<b>4.4.3 Comportamiento de los grupos funcionales en los diferentes tiempos de extracción</b> .....	51
<b>4.4.4 Análisis de varianza (ANOVA) de grupos funcionales extraídos a 90,3 y 81,3 °C</b> .....	54
.....	
<b>4.5 IDENTIFICACIÓN DE COMPONENTES MAYORITARIOS EVALUANDO LAS BANDAS ESPECTRALES IRTF-ATR</b> .....	56
<b>4.5.1. Evaluación de componentes mayoritarios, identificados con IRTF-ATR en el proceso de extracción de aceite esencial a 90,3 °C</b> .....	57
<b>4.5.2. Evaluación de componentes mayoritarios, identificados con IRTF-ATR en el proceso de extracción de aceite esencial a 81,3 °C</b> .....	59

4.5.3. Análisis de varianza (ANOVA) de compuestos mayoritarios (IRTF-ATR) extraídos a 90,3 y 81,3 °C .....	62
<b>4.6 IDENTIFICACIÓN Y PORCENTAJE DE LOS COMPONENTES MAYORITARIOS EN ACEITE ESENCIAL DE FRUTOS DE <i>SCHINUS MOLLE</i> MEDIANTE GS-MS .....</b>	<b>63</b>
4.6.1 Evaluación de componentes mayoritarios, identificados con GC-MS en el proceso de extracción de aceite esencial a 90,3 y 81,3 °C .....	64
4.6.2 Actividades biológicas, aplicaciones farmacéuticas y alimentarias de aceites esenciales ricos en alfa-felandreno. ....	69
4.6.3 Análisis de varianza (ANOVA) de compuestos mayoritarios identificados con GC-MS en el proceso de extracción de aceite esencial a 90.3 y 81.3 °C .....	72
<b>CONCLUSIONES .....</b>	<b>74</b>
<b>RECOMENDACIONES .....</b>	<b>75</b>
<b>REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>76</b>
<b>ANEXO .....</b>	<b>84</b>

## LISTA DE TABLAS

<b>Tabla 1</b> Resumen de las frecuencias de estiramiento IR .....	22
<b>Tabla 2</b> Bandas espectrales características determinadas con ATR-IR para algunos terpenos. ....	23
<b>Tabla 3</b> Bandas espectrales características determinadas con ATR-IR para algunos terpenos. ....	24
<b>Tabla 4</b> Diseño experimental para la extracción de aceites esenciales. ....	30
<b>Tabla 5</b> Datos de extracción de aceite esencial de frutos de molle a 90,3°C .....	37
<b>Tabla 6</b> Datos de extracción de aceite esencial de frutos de molle a 81,3°C .....	38
<b>Tabla 7</b> Análisis de varianza (ANOVA) de la cantidad (%) de aceite esencial de frutos de molle, extraídos a 90,3 y 81,3 °C, a diferentes tiempos. ....	41
<b>Tabla 8</b> Índice de Refracción (20°C) de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 90,3°C.....	42
<b>Tabla 9</b> Índice de Refracción (20°C) de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 81,3 °C.....	42
<b>Tabla 10</b> Análisis de varianza (ANOVA) de índice de refracción de aceite esencial de frutos de molle, extraídos a 90,3 y 81,3 °C, a diferentes tiempos. ....	43
<b>Tabla 11</b> Densidad (20°C) de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 90,3°C .	44
<b>Tabla 12</b> Densidad (20°C) de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 81,3°C ..	44
<b>Tabla 13</b> Análisis de varianza (ANOVA) de densidad (g/ml) de aceite esencial de frutos de molle, extraídos a 90,3 y 81,3 °C, a diferentes tiempos. ....	45
<b>Tabla 14</b> Grupos funcionales de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 90.3°C y 81.3 °C. ....	48
<b>Tabla 15</b> Absorbancia de grupos funcionales durante el tiempo de extracción a 90.3 °C (AE).....	51
<b>Tabla 16</b> Absorbancia de grupos funcionales durante el tiempo de extracción a 81,3 °C (AF).....	53
<b>Tabla 17</b> Análisis de varianza de grupos alqueno y alcano ( $\nu$ (CH <sub>2</sub> ) + $\nu$ (CH <sub>3</sub> ) en la extracción entre 90.3 (AE) y 81.3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).....	55
<b>Tabla 18</b> Análisis de varianza de grupo ester $\nu$ (C=O) en la extracción entre 90,3 (AE) y 81,3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min). ....	56
<b>Tabla 19</b> Análisis de varianza de grupo alqueno conjugado $\nu$ (C=C) en la extracción entre 90,3 (AE) y 81,3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min). ....	56
<b>Tabla 20</b> Numero de onda (cm <sup>-1</sup> ), típico de compuestos mayoritarios en el aceite esencial de frutos de molle. ....	57
<b>Tabla 21</b> Absorbancia de los picos espectrales correspondientes a $\alpha$ - Felandreno durante la extracción de aceite esencial a 90,3 °C (AE) .....	58
<b>Tabla 22</b> Comportamiento de $\alpha$ - Felandreno durante la extracción de aceite esencial a 81,3 °C (AF) .....	60
<b>Tabla 23</b> Análisis de varianza de grupos $\alpha$ - Felandreno en la extracción entre 90,3 (AE) y 81,3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min)..	62
<b>Tabla 24</b> Identificación y porcentaje de componentes mayoritarios de aceite esencial de frutos molle.....	63
<b>Tabla 25</b> Porcentaje de componentes mayoritarios de aceite esencial de frutos molle durante la extracción de aceite esencial a 90.3 °C (AE) .....	64

<b>Tabla 26</b> Concentración de componentes mayoritarios de aceite esencial de frutos molle durante la extracción de aceite esencial a 81,3 °C (AF).....	66
<b>Tabla 27</b> Análisis de varianza de grupos $\alpha$ - Felandreno en la extracción entre 90.3 (AE) y 81.3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).. <td>72</td>	72

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 1</b> Diagrama de un hidrodestilador.....	18
<b>Figura 2</b> Diagrama de un destilador por vapor (arrastre de vapor).....	19
<b>Figura 3</b> Resumen simplificado de las frecuencias de estiramientos IR.....	21
<b>Figura 4</b> Espectro IR del aceite esencial de Schinus areira. ....	24
<b>Figura 5</b> Ubicación de recolecta de frutos de molle ( Schinus molle L) .....	27
<b>Figura 6</b> Fotografía de frutos de molle ( <b>Schinus molle L</b> ).....	27
<b>Figura 7</b> Etapas para la extracción de aceite esencial de frutos de molle ( Schinus molle L) .....	28
<b>Figura 8</b> Planta piloto de extracción de aceites esenciales - Mod. UDC-2/EV, ELETTRONICA VENETA .....	29
<b>Figura 9</b> Refractómetro de ABBE 5 refractometer Bellingham + Stanley Ltd, modelo A11 .....	32
<b>Figura 10</b> Densímetro portátil METTLER TOLEDO modelo Densito 30PX .....	33
<b>Figura 11</b> Espectrómetro FT - IR Nicolet iS10 de Thermo Scientific .....	34
<b>Figura 12</b> Cromatógrafo de gases acoplado a masas Agilent, modelo 7890B .....	35
<b>Figura 13</b> Porcentaje de extracción de aceite esencial de frutos de molle a 90,3 °C a diferentes tiempos 30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min.....	39
<b>Figura 14</b> Porcentaje de extracción de aceite esencial de frutos de molle a 81,3 °C a diferentes tiempos 30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min.....	40
<b>Figura 15</b> Picos espectrales IRTF - ATR de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 90,3 °C, (AE), a diferentes tiempos (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min) .....	46
<b>Figura 16</b> Picos espectrales IRTF - ATR de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 81,3 °C, (AF) a diferentes tiempos (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min) .....	47
<b>Figura 17</b> Picos de espectros IRTF - ATR de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 30 min (AE1), A 90,3 °C.....	50
<b>Figura 18</b> Picos de espectros IRTF - ATR de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 30 min (AF1), A 81,3 °C.....	50
<b>Figura 19</b> Comportamiento de grupos funcionales del aceite esencial de frutos de molle durante el tiempo de extracción a 90,3 °C .....	52
<b>Figura 20</b> Comportamiento de grupos funcionales del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 81,3 °C .....	53
<b>Figura 21</b> Comportamiento de $\alpha$ - Felandreno del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 90,3 °C.....	58
<b>Figura 22</b> Comportamiento de $\alpha$ - Felandreno del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 81,3 °C.....	61
<b>Figura 23</b> Comportamiento de los componentes mayoritarios del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 90,3 °C (AE).....	65
<b>Figura 24</b> Comportamiento de los componentes mayoritarios del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 81,3 °C (AF) .....	67
<b>Figura 25</b> Comportamiento del $\alpha$ - Felandreno del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 81,3 °C y 90,3 °C .....	73

## CAPÍTULO I

### ASPECTOS GENERALES

#### 1.1. INTRODUCCIÓN

Los frutos del molle (*Schinus molle* L) han sido estudiadas en diversos países del mundo, los cuales presentan diversos grupos funcionales como alquenos, alcanos, ésteres, alquenos conjugados, alquenos cíclicos, alcoholes, éteres y aminas aromáticas, alcoholes secundarios, alcoholes primario y compuestos orgánicos tales como:  $\alpha$ -Pinoeno, Mirceno  $\alpha$ -Felandreno, o-Cimeno, Limoneno,  $\beta$ -Elemeno,  $\alpha$ -Gurjuneno, 4,8  $\beta$ -Epoxy cariofileno,  $\alpha$ -Humulona,  $\alpha$ -Muuroolona,  $\gamma$ -Cadineno,  $\delta$ -Cadinene, otros en trazas (Bendaoud et al., 2010) estos compuestos le proporcionan ciertas características farmacológicas, al aceite esencial de frutos de molle, como analgésico, antiséptico, antidepresivo, antibacteriano, para infecciones del tracto respiratorio y urinario, purgante digestivo y diurético (Belhoussaine et al., 2024).

La mayoría de las determinaciones de los componentes químicos del aceite esencial de frutos de molle se han realizado de aquellos obtenidos por hidrodestilación y sin fraccionamiento. En un estudio, Dos Santos Cavalcanti et al. (2015), evaluaron los aceites esenciales extraídos de la hidrodestilación de hojas y frutos de *Schinus molle* L. y *Schinus terebinthifolius* Raddi provenientes de Brasil, así como su composición química y cinética de extracción, para esta propuesta, se realizó una extracción de 6 h y alícuotas colectadas en diferentes tiempos de secuenciación (0.5, 1, 2, 4 y 6 h) que permitieron calcular el contenido acumulado (% p/p) y verificar el perfil químico los aceites esenciales de los frutos estudiados.

En el presente estudio se evalúa el porcentaje de extracción a 81,3 y 90,3 °C y el perfil químico del aceite esencial a diferentes temperaturas y tiempos de extracción con frutos de molle provenientes de Ayacucho – Perú, con ello se da a conocer los grupos funcionales y componentes en cada fracción de temperatura y tiempo de extracción.

Para la determinación se utilizará los picos espectrales resultados de IRTF -ATR y espectros GC-MS.

## 1.2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

### 1.2.1. Identificación del problema

En la actualidad el comercio de aceites esenciales es una actividad que genera divisas en los lugares donde se practica esta industria extractiva. A nivel mundial la extracción de aceites esenciales da importancia a diversas partes de las plantas aromáticas entre ellas flores, hojas, tallos, raíces, frutos y otros. En nuestro país el comercio de aceites esenciales también se está incrementado en los últimos años. En la región Ayacucho se ha observado un incremento en la producción de aceite esencial de frutos de molle (*Schinus molle* L) para el mercado interno y externo, ello ha generado que algunas instituciones y pequeñas empresas se dediquen a la extracción del aceite esencial de frutos de molle y hojas de eucalipto.

Los aceites esenciales son sustancias volátiles químicamente complejas, mayormente líquidas a medio ambiente, que les confieren el aroma característico a algunas plantas, estos aromas se pueden extraer por hidrodestilación, arrastre con vapor de agua, entre otras.

El aceite esencial de molle tiene diversos componentes volátiles como:  $\alpha$  y  $\beta$ -felandreno,  $\alpha$ -bergamontranseno,  $\alpha$  y  $\delta$ -cadineno, bourboneno, carvacrol, canfeno,  $\beta$ -cariofileno,  $\gamma$ -cubebeno,  $\gamma$ -copaeno, butirato de geraniol, *p*-cimeno,  $\alpha$  y  $\beta$ -pineno,  $\alpha$ -terpineol,  $\alpha$  y  $\gamma$ -muuroleno,  $\gamma$ -terpineno, etc, pero como componentes volátiles mayoritarios presenta el limoneno, pineno, y felandreno. Los mayores usos que se dan a los aceites esenciales son en la aromaterapia, perfumería, farmacología, cosmética.

### 1.2.2. Descripción del problema

Los componentes volátiles de los aceites esenciales se han identificado y cuantificado con técnicas y metodologías analíticas como la cromatografía de gases (GC), y GC/MS, siendo estos análisis complejos en su operación. También se tiene una metodología analítica simple, de respuestas rápidas y de fácil operación, como la Espectrofotometría Infrarroja con Transformada de Fourier (TFIR) con Reflectancia Total Atenuada (ATR), que permite identificar grupos funcionales y componentes volátiles rápidamente.

En las extracciones de aceite esencial, tradicionalmente solo se controla el tiempo total de extracción y en algunos casos la temperatura de extracción. Los productores de aceite esencial, durante el proceso de extracción de aceite esencial de frutos de molle por destilación por arrastre de vapor a 91 °C, sólo controlan el tiempo de extracción, dando fin a este proceso, entre 4 a 6 horas y desconocen los grupos funcionales o los componentes volátiles que se obtienen en estos periodos de extracción en el destilado. En el proceso se observa que en los primeros 90 minutos de extracción, el aceite esencial destilado es de color traslucido, olor astringente y rendimiento alto, a partir de los 90 minutos la coloración del aceite esencial se torna un color amarillo pajizo y un olor menos astringente y rendimiento menor en relación a los periodos de extracción inicial; a partir de 180 minutos de extracción del aceite esencial se acentúa color el amarillo pajizo en el destilado. Por otro lado se desconoce las características del aceite esencial extraído a menor temperatura como a 80°C, que puede ser una localidad a más altitud. Estos cambios en el olor y la coloración en los distintos periodos de extracción de aceite esencial de semillas de molle indican que hay variación en los componentes en el destilado y se desconocen los grupos funcionales y componentes volátiles obtenidos.

### **1.2.3 Formulación del problema**

#### ***Problema principal***

¿Qué grupos funcionales y componentes volátiles mayoritarios del aceite esencial de frutos de molle (*Schinus molle* L) se obtienen en la extracción por arrastre con vapor en Ayacucho?

#### ***Problemas específicos***

1. ¿Cuál es el porcentaje de extracción, densidad, índice de refracción de aceite esencial de frutos de molle (*Schinus molle* L) extraídos, a diferentes temperaturas y tiempos, por arrastre con vapor en Ayacucho?
2. ¿Qué grupos funcionales y componentes volátiles mayoritarios del aceite esencial de frutos de molle (*Schinus molle* L) pueden identificarse mediante FTIR-ATR, extraídos a diferentes temperaturas y tiempos por arrastre con vapor en Ayacucho?
3. ¿Qué componentes volátiles mayoritarios del aceite esencial de frutos de molle (*Schinus molle* L) pueden identificarse con GC-MS, extraídos a diferentes temperaturas y tiempos por arrastre con vapor en Ayacucho?

### **1.3. OBJETIVOS**

#### ***Objetivo general***

Identificar los grupos funcionales y componentes volátiles mayoritarios del aceite esencial de frutos de molle (*Schinus molle* L) que se obtienen en la extracción por arrastre con vapor en Ayacucho.

#### ***Objetivos específicos***

1. Evaluar el porcentaje de extracción, densidad, índice de refracción de aceite esencial de frutos de molle (*Schinus molle* L) extraídos, a diferentes temperaturas y tiempos, por arrastre con vapor en Ayacucho.
2. Identificar los grupos funcionales y componentes volátiles mayoritarios del aceite esencial de frutos de molle (*Schinus molle* L) mediante con FTIR-ATR extraídos a diferentes temperaturas y tiempos por arrastre con vapor en Ayacucho.
3. Identificar los componentes volátiles mayoritarios del aceite esencial de frutos de molle (*Schinus molle* L) mediante con GC – MS, extraídos a diferentes temperaturas y tiempos por arrastre con vapor en Ayacucho.

### **1.4. IMPORTANCIA Y JUSTIFICACIÓN**

En estos últimos años del Perú ha producido y exportado aceite esencial de molle por un valor de \$ 1 000 000 aproximadamente, gran parte de este aceite fue producido en Ayacucho, el cual ha generado un ingreso extra a los participantes de la cadena del molle, entre campesinos, intermediarios, plantas de extracción, y exportadores.

El aceite esencial de frutos de molle actualmente se exporta como aceite esencial bruto. Si se conoce los componentes del aceite esencial durante la extracción, podemos retirar algunos componentes volátiles mayoritarios, el cual podría mejorar los aromas, estabilidad y consecuentemente mejorar el costo de los aceites.

La identificación de compuestos volátiles mayoritarios del aceite esencial de semillas de molle durante su extracción, permitirá darles a conocer al productor que compuestos volátiles están extrayendo cada 30 minutos durante la destilación. Con esta información pueden separar adecuadamente aceites esenciales de molle con más contenido de felandreno, limoneno, pineno u otro, el cual les permitiría presentar al mercado externo e interno aceites esenciales de molle con distinta composición. Asimismo, la información

resultante, permitirá al productor de aceite esencial de molle conocer que componentes mayoritarios extrae en cada periodo a una temperatura establecida, el cual le permitirá presentar aceites esenciales de mejor calidad, estabilidad y competitivo.

## 1.5 HIPÓTESIS.

### Hipótesis General

El aceite esencial de frutos de *Schinus molle* L. obtenido por arrastre con vapor en Ayacucho presenta un perfil característico de grupos funcionales y compuestos volátiles mayoritarios que pueden ser identificados mediante técnicas analíticas específicas.

### Hipótesis específicas

- La evaluación del porcentaje de extracción permite determinar hasta que tiempo de extracción es conveniente realizar la destilación por arrastre con vapor.
- El FTIR-ATR permite identificar alcoholes, ésteres, éteres, alquenos, y  $\alpha$ -felandreno, limoneno,  $\beta$ -pineno, en el aceite esencial de frutos de molle (*Schinus molle* L) extraídos a diferentes temperaturas y tiempos por arrastre con vapor en Ayacucho.
- El GC - MS permite identificar  $\alpha$ -felandreno, limoneno,  $\beta$ -pineno, en el aceite esencial de frutos de molle (*Schinus molle* L) extraídos a diferentes temperaturas y tiempos por arrastre con vapor en Ayacucho.

## 1.6 VARIABLES E INDICADORES

### Variable Independiente

**X1:** Frutos de molle.

**X2:** parámetros de extracción.

### Indicadores:

**X1:** Temperatura de extracción

**X2:** Tiempo de extracción.

## **Variable Dependiente**

**Y:** Presencia de grupos funcionales y componentes volátiles mayoritarios en el aceite esencial.

### **Indicadores:**

**Y1:** Absorbancia de picos espectrales con FITR - ATR.

**Y2:** Tiempo de adquisición y recuentos de intensidad con GC-MS.

## CAPÍTULO II

### REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA

#### 2.1. ANTECEDENTES

##### 2.1.1. Nacional

Gamarra (2010) en la tesis titulada “Obtención de sustancias aromáticas por fraccionamiento del aceite esencial del molle (*Schinus molle L.*) y usos”, manifiesta que:

Evaluó las condiciones de contenido de aceite esencial dentro de las semillas de *Schinus molle L.* proveniente de la región Ancash, comparándolas a dos estados de madures, en estado de madurez verde y en estado de madurez óptimo. Los análisis de cromatografía de gases dan como resultado la presencia de Sabineno,  $\alpha$ -Felandreno, Terpineno, Canfeno, Cadineno, Limoneno y otros como componentes mayoritarios en las semillas de molle maduros.

Llanos (2012) en la tesis titulada “Extracción y caracterización del aceite esencial de molle (*Schinus molle L.*)” manifiesta que:

Las características físico-químicas del aceite esencial provenientes de Los Palos es: índice de refracción (1,478), densidad (0,846 g/cm<sup>3</sup>), densidad relativa (0,847), punto de congelación (-35°C), índice de acidez (6,023 mg KOH/g) e índice de éster (17,008); y el aceite esencial provenientes de Tarata fueron: índice de refracción (1,477), densidad (0,831 g/cm<sup>3</sup>), densidad relativa (0,832), punto de congelación (-35°C), índice de acidez (12,718 mg KOH/g) e índice de éster (23,148). Ambos aceites se analizaron por cromatografía de gases con detector FID, identificándose los monoterpenos: limoneno,  $\alpha$ -pineno,  $\beta$ -pineno,  $\beta$ -mirceno, y  $\alpha$ -felandreno.

Moncada (2014) en la tesis titulada “Determinación de la composición y actividad antimicrobiana del aceite esencial de *Schinus molle L.* (molle) de Arequipa y Moquegua

contra *Klebsiella pneumoniae*, *Pseudomona aeruginosa* y *Staphylococcus aureus*” manifiesta que:

La composición química del aceite esencial de frutos de *Schinus molle* L. proveniente de Arequipa y Moquegua, utilizando un cromatógrafo de gases acoplado a espectro de masas (GC-MS), en base a los porcentajes de área, como componentes mayoritarios, para ambos aceites esenciales se tiene :  $\alpha$ -pineno,  $\beta$ -pineno,  $\beta$ -mirceno,  $\alpha$ -felandreno y Silvestreno; siendo  $\beta$ -mirceno predominante para la localidad de Arequipa y  $\alpha$ -felandreno en la localidad de Moquegua.

Angulo (2015) en la tesis titulada “Extracción y caracterización de aceite esencial del *Schinus Molle* Linneo por medio de fluidos supercríticos” manifiesta que:

Extrajo aceite esencial de frutos de molle proveniente de la provincia de Huancayo, departamento de Junín, por medio de fluidos supercríticos. Utilizando un cromatógrafo de gases acoplado a espectro de masas (GC-MS), en base a los porcentajes de área, como componentes mayoritarios, determinó: Sabineno, Terpinol, Acido Palmítico,  $\alpha$ -felandreno y otros.

### **2.1.2. Internacional**

Alnawari et al.,(2018) desarrollaron la investigación “Caracterización química de los aceites esenciales de *Schinus molle* L. del norte de Chipre”. Donde realizaron el análisis de los aceites esenciales hidrodestilados de hojas y frutos secos de *Schinus molle* L. recolectados en dos localidades de Lefkoşa (Nicosia), Chipre del Norte, analizaron mediante GC-FID y GC / MS, e identificaron como los componentes principales de  $\alpha$ -felandreno (31,5 -31,6%), (26,7-36,3%), limoneno (10,1-11,4%), (12,5-13,5%) y  $\beta$ -felandreno (9,9-10,9%), (10,3-12,2%) respectivamente. Además, el mirceno fue un constituyente principal identificado solo en frutos (18,5-19,9%), mientras que el biciclogermacreno fue el componente principal caracterizado en los aceites de hojas (12-11,1%).

Dos Santos Cavalcanti et al., (2015) desarrollaron la investigación “Composición de volátiles y cinética de extracción de hojas y frutos de *Schinus terebinthifolius* y *Schinus molle*”. Donde evaluaron los aceites esenciales extraídos de *Schinus molle* L. y *Schinus terebinthifolius* Raddi, Anacardiaceae, por hidrodestilación de hojas y frutos, así como su composición química y cinética de extracción. Para este estudio se realizaron

extracciones de 6 h y recolectaron alícuotas en diferentes tiempos secuenciales (0.5, 1, 2, 4 y 6 h) que permitieron calcular el contenido acumulado (% p / p) y verificar el perfil químico del aceite esencial. Determinaron cariofileno (35,2%), pineno (28,1%) y germacreno D (15,5%) representan los componentes principales del aceite esencial de hojas secas de *S. terebinthifolius*, así como, -pineno (44,9%), germacreno D (17,6%) y - pineno (15,1%) en el fruto. El cubenol (27,1%), el óxido de cariofileno (15,3%) y el espatulenol (12,4%) representan los componentes principales del aceite esencial de hojas secas de *S. molle*, y -pineno (36,3%) -pineno (20,3%), germacreno D (12,1%) y Pathulenol en el fruto. La cinética de extracción de aceite esencial mostró una distribución hiperbólica; el contenido de monoterpenos presentó una disminución exponencial en función del tiempo y el sesquiterpeno mostró un crecimiento exponencial. Se observó una extracción de monoterpenos más rápida que la extracción de sesquiterpenos, sin embargo, ambos presentaron una distribución exponencial creciente.

## **2.2. BASES TEÓRICAS**

### **2.2.1. Molle (*Schinus molle* L.)**

Respecto al molle Bautista (2018) señala que:

El “Molle” (*Schinus molle* L.) es una especie vegetal originaria de América del sur, del Perú, se extiende desde la región pre-cordillerana y cordillera de Chile, Perú, Bolivia, Argentina, Ecuador, Colombia distribuyéndose hacia el Norte en forma continuada alcanzando México, todo Centroamérica y parte de Texas y California, en los Estados Unidos. Se desarrolla en altitudes de hasta 3500 m sobre el nivel del mar. Pertenece a la familia de las Anacardiaceae, género *Schinus*, especie molle. Sus nombres comunes, por los cuales se lo conoce popularmente son molle, pirul, aguaribay, anacahuita, gualeguay, turbinto, falso pimentero o pimentero de América, molle de curtir, pimienta del Perú. El árbol del molle (*Schinus molle* L.); es un árbol perennifolio de rápido crecimiento, de altura comprendida entre los 4 y los 15 m presentando una copa redondeada, con ramas colgantes, hojas de color verde intenso divididas en folíolos lisos, poseedoras de una savia lechosa. Los frutos son drupas de tono rojo lustroso distribuidas en racimos colgantes de 5 - 9 mm de diámetro, cada fruto conteniendo 1-2 semillas.

### 2.2.1.1. Origen

En cuanto al origen y distribución del molle Schulte et al., (1992) manifiesta:

El área de origen y de mayor distribución comprende casi todo el Perú y Bolivia. La distribución vertical oscila según la latitud geográfica entre 2000 msnm en el norte, y 3000 msnm en los Andes centrales. En los valles interandinos, el Molle se encuentra entre los 1000 a 2900 m de altitud, extendiéndose hasta una altura de 3500 msnm e incluso hasta 3900 m de altitud, creciendo en las quebradas y pequeños valles laterales de las regiones andinas. Es una especie que resiste el frío pero no las heladas, se encuentra en zonas semi áridas y en los valles interandinos, donde es capaz de crecer en áreas bastante secas, con varios meses sin lluvia y con una precipitación de 250 a 600- (1000) mm año. En estas condiciones emite un sistema radicular abundante y profundo hasta 20m (-30m) de profundidad para buscar agua.

Asimismo, el molle está ampliamente distribuido en México, en Centroamérica y en el sur de California y oeste de Texas, en Estados Unidos. África oriental, Medio oriente, Israel. También es cultivado en la zona del Mediterráneo en el sur de Europa. (Hueck, K; 1978).

### 2.2.1.2 Descripción y característica de la planta

Respecto a la descripción y características del molle Schulte et al., (1992) describe:

**Tallo.** El tallo por lo general es torcido, aunque a veces es recto en su primera longitud, capaz de suministrar una troza maderable de 3 - 7 m, con un diámetro entre 30 - 80 cm; en ejemplares más viejos se pueden encontrar con diámetros entre 1 - 1,5 m. En algunos lugares de Cochabamba existen árboles de 35 - 40 años de edad presentando diámetros de 60 - 85 cm. El aspecto del tronco es resinoso, rugoso al tacto, presentando un crecimiento encorvado, que en su juventud tiene una forma cilíndrica, pero con el tiempo se vuelve nudoso e irregular. El tronco es sostenido por raíces que penetran en el suelo sin presentar daños laterales en el fuste. Por lo común los ejemplares de gran porte tienen el tronco enfermo causado por un hongo que produce la putrición roja. Durante los temporales se originan grandes heridas que son puente de entrada a infecciones fúngicas. En regiones de clima seco no existen estos problemas.

**Copa.** El Molle presenta una copa amplia, irregular de forma semi esferoidal a globosa, que puede ser muy ancha y abundante. El follaje se desprende fácilmente. Las ramas terminales son alargadas, péndulas y delgadas, las cuales son flexibles y persistentes, siendo sus ramas colgadas de 2 a 3 m sobre el suelo, muchas veces están cubiertas de una capa corchosa delgada. Las ramillas tiernas son de un color verde a gris-violeta (Schulte et al., 1992).

**Corteza.** La corteza es áspera más bien escamosa, con protuberancias redondeadas y grietas de 2 a 3 mm con tendencia a desprenderse en placas rígidas de color pardo oscuro, ligeramente grisácea, a veces rojiza. En la juventud de color verduzco-pardo hasta beige-rojo, lisa y lustrosa, que con el tiempo se vuelve dura, áspera y agrietada, con espesor aproximado de 6 a 8 mm. La corteza se desprende del tronco en escamas alargadas en forma de excrecencia. En la vejez se vuelve de color gris- pardo a gris. Exuda una resina lechosa y pegajosa que toma un color blanco brillante cuando se seca y es ligeramente purgante, además de calmar el dolor de muelas (Schulte et al., 1992).

**Raíces.** Debido a la formación y ramificación temprana e intensa de las raíces, se desarrolla muy pronto una raíz extensa. Un ejemplar observado en la Provincia Tapacarí en el departamento de Cochabamba/Bolivia, de una talla de 2 m, ya tenía raíces de más de 15 m de largo. Las raíces leñosas penetran hasta grandes profundidades y se ramifican fuertemente. Provistos de una cofia pilloriza muy resistente, pueden penetrar incluso en suelos rocosos o muy compactos (Schulte et al., 1992).

**Hojas.** El molle tiene hojas de 15 - 25 cm de largo, incluyendo el peciolo son perennes, compuestos, pinnados, alternos, glabros, aromáticos, peciolo de 2-5 cm de largo, raquis lineal-aplanado, de 8-16 cm de largo. Foliolos de 7-25 pares, o de 10 a 39 foliolos por hoja, sésiles, opuestos, subopuestos o alternos de 1,5-4 cm de largo y 3-10 mm de ancho, coriáceos, subcoriáceos o membranosos, glabros, lanceolados, linear-lanceolados, con la base cuneada u obtusa, ápice a menudo curvo, acuminado margen liso o aserrado en la juventud . La cara dorsal de las hojas de color verde claro a oscuro, brillante y durante una parte del año pegajosa, cara ventral más clara. Cuando se estrujan las características, intensa hojas despiden y penetrante una fragancia muy (Schulte et al., 1992).

**Flores.** La inflorescencia es una panícula de 10-20 cm de largo, en la axila de las hojas apicales; bráctea basal ovalada, ciliada; pedúnculos delgados, cortos. Flor masculina: cáliz con 5 sépalos orbiculares, de 0,5 mm de largo, ciliadas en el margen; 5 pétalos oblongos, obtusos, glabros, de 1,3-2 mm . de largo, blanco-verdosos; estambres 10, 5 alternos con los pétalos, generalmente iguales o poco más largos que ellos, y 5 opuestos, la mitad o dos tercios del largo de los pétalos; anteras globosas, pequeñas; disco 10-lobulado, en forma de copa; ovario rudimentario (no funcional ). Con flores hermafroditas con 10 estambres que no alcanzan mas allá de la mitad de los pétalos; disco plano, lobulado; ovario subgloboso, tricarpelar, unilocular, con un solo, óvulo suspendido cerca de la parte superior del lóculo; estilo bifido y estigma globoso. En el Departamento de Cochabamba/Bolivia se encontró en los valles de las provincias como Tapacari, Ayopaya y Arce p.ej. que los árboles de molle florecen en general a partir de septiembre (Schulte et al., 1992).

**Frutos.** El fruto es una drupa globosa, de 4-6 mm de diámetro, exocarpio delgado, de color rosado a rojizo, papiráceo, brillante, que se separa en la madurez del mesocarpio, delgado y resinoso; endocarpio duro, leñoso. Las semillas son redondas de 3-5 mm de diámetro, de color castaño claro, resinosas y aromáticas. La fructificación se da entre marzo y abril. La época de madurez o de recolección en Bolivia y Perú es principalmente entre mayo y julio. En Tapacari (Cochabamba) fueron encontrados frutos maduros desde junio hasta octubre (Schulte et al., 1992).

### 2.2.1.3. Clasificación morfológica (taxonomía)

#### **Clasificación botánica**

Reino	: Plantae
División	: Fanerógama Magnoliophyta
Clase	: Magnoliopsida (dicotiledónea)
Orden	: Sapindales
Familia	: Anacardiaceae
Género	: Schinus
Especie	: Molle

"Árbol del Perú", "piru", "pirwi" (MEXICO); "Aguaribay", "Pimiento", "Terebinto" (ARGENTINA) "Molle", "Molli", "Arbol de Pimienta" (ECUADOR);

"Mulli", "Molle", "Muelle", "Lentisco", "Turbinto" (PERÚ); "Molle", "Mulli" (Kechua), (Ay-mara), (BOLIVIA); "Muelle" (CHILE); "Aroeira", "Balsamo sanalotodo", "Molle", "Muelle", "Mulli", "Pimenteira", "Pimentera", "Pimiento", "Pimiento de California", "Piru", "Terebinto" (COLOMBIA); "Muelle" (CHILE); "Molle", "Molli" (ECUADOR); (Solis Quispe, 2018); (Lazo Ramos & Tupayachi Holgado, 2015); (Schulte et al., 1992).

#### **2.2.1.4. Caracterización química proximal del fruto de molle (*schinus molle* L.)**

Existen diversos trabajos de investigación donde se ha determinado la caracterización química de frutos de molle. Tal es así se tiene la composición química proximal de bayas (frutos) y hojas de molle provenientes del distrito de Mollebaya de la región Arequipa - Peru, los cuales resultaron: Proteínas 6,55%; Grasas 9,85%; Humedad 14,16%; Cenizas 4,90%; Fibra bruta 28,31% y Carbohidratos 36,3% (Lazo Ramos & Tupayachi Holgado, 2015).

Frutos de molle provenientes del centro poblado menor de Los Palos y del distrito de Tarata de la región Tacna dieron como resultado la siguiente composición química proximal de frutos: Humedad 18,158% (Los Palos)- 21,875% (Tarata); Cenizas 3,785% - 3,353%; Proteínas 5,280% - 5,560% respectivamente (LLanos, 2012).

Frutos de molle provenientes de la Huaraz, dieron como resultado la siguiente composición químico proximal: Humedad 16,60%; Grasas 14,18%; Proteínas 9,42%; Cenizas 6,36%; Fibras 14,89% (Gamarra, 2010).

Carbohidratos 37,12% ± 0,22; Grasas 22,11% ± 0,16; Proteínas 12,13% ± 0,02; Cenizas% 17,13 ± 0,16 (Feriani et al., 2020).

#### **2.2.2. Aceite esencial**

Los aceites esenciales, son productos que resultan del metabolismo de las plantas, constituidos por mezclas complejas de compuestos orgánicos volátiles, responsable de aroma de plantas, que se obtienen por destilación con arrastre de vapor o presión y tienen uso amplio en la industria de alimentos, farmacéutica, cosmética y otros (Vila Casanovas, 2019), (Pino, 2015).

Los aceites esenciales incluyen monoterpenos, sesquiterpenos, fenilpropanos y compuestos alifáticos de bajo peso molecular (alcanos, alcoholes, aldehídos, cetonas, ésteres y ácidos) (Martínez, 2020).

Los monoterpenos, sesquiterpenos son derivados biosintéticamente de geranilpirofosfato (GPP) y farnesilpirofosfato (FPP) respectivamente Martínez (2020) manifiesta que:

Los terpenos tienen la biogénesis a partir de la ruta clásica del ácido mevalónico que ocurre en el citosol (mevalonil fosfato) de las células vegetales y da origen a terpenoides C<sub>15n</sub> (n =impar), mientras que la ruta del metileritritol fosfato ocurre en los plastidios y da origen especialmente a terpenoides C<sub>10n</sub>. El ácido mevalónico es el precursor de las dos unidades básicas que dan origen a los terpenoides: Isopentenilpirofosfato (IPP) y  $\gamma$ ,  $\gamma$ -dimetilalilpirofosfato (DMAPP). Se condensan dos moléculas de 5 átomos de carbono (IPP y DMAPP) para dar origen a Geranilpirofosfato una molécula de 10 átomos de carbono, el cual es el precursor inmediato de todos los monoterpenos naturales. La condensación de geranilpirofosfato con una nueva unidad IPP da origen al farnesilpirofosfato, el cual es el precursor de todos los sesquiterpenos naturales. Los fenilpropanos se originan biogénicamente a partir del ácido shikímico.

Los monoterpenos naturales más comunes son: Nerol, geraniol, citronelal, limoneno, car-3-eno, alcohol fenchilico, fenchona, thuyona, alfa-pineno, alcanfor y otros. Los sesquiterpenos naturales más comunes son: farnesol, nerolidol, gama-bisaholeno, alfa-cadineno, beta-selineno, cariofileno, carotol, ácido abscísico y otros. Los fenilpropanos naturales más comunes son: alcohol hidrocínamicico, alcohol coniferilico, cinamaldehído, anis – cetona, eugenol, isoeugenol, safrol, isosafrol, isomiristicina, miristicina, coniferina, apiol, elemicina, anetol (Martínez, 2020).

#### **2.2.2.1. Ensayos para la identificación de aceites esenciales.**

Debido a la complejidad de grupos funcionales presentes como compuestos monoterpénicos y sesquiterpénicos de un aceite esencial, no hay una prueba concreta para su identificación. Sin embargo, existen algunos métodos experimentales que permiten identificar algunos de estos por su coloración con algunos reactivos, su absorción de luz UV de 254 nm y su R<sub>f</sub> en cromatografía de capa fina. Otros reactivos provechosos para detectar monoterpenos y sesquiterpenos son el anisaldehído-ácido sulfúrico, la vainillina-ácido sulfúrico y el ácido fosfomolibdico. A partir de la base de datos de cromatografía de gases y espectrofotómetro de masas se pueden identificar los monoterpenos y sesquiterpenos presentes en los aceites esenciales, y en caso de

dudas de tal identificación se recurre al uso del Infrarrojo, Ultravioleta y Resonancia Magnética Nuclear (Martínez, 2020).

### ***Espectroscopia infrarroja***

Respecto a la espectroscopia infrarroja Martínez (2020) menciona:

Con los espectros del infrarrojo se puede identificar la presencia de grupos hidroxilo, carbonilo, anillos aromáticos, enlaces dobles C=C cis y trans, entre otros. Por ejemplo, en el espectro infrarrojo del 3p-menten-7-al ubicado en el aceite de comino. La banda intensa en 1725 cm<sup>-1</sup> señala un grupo carbonilo no conjugado. La banda en 2710 cm<sup>-1</sup> se asigna a la tensión C-H de un protón aldehídico. El doblete centrado en 1375 cm<sup>-1</sup> señala un grupo isopropilo, y la banda de intensidad media en 817 cm<sup>-1</sup> indica un enlace doble trisustituído. En el caso de los fenilpropanos, que son sustancias con anillo aromático, sus espectros infrarrojos muestran las señales propias de estos compuestos y aportan información sobre el tipo de sustitución del anillo aromático además de los grupos funcionales presentes en la molécula. En el espectro IR del eugenol se muestra, entre otras bandas, en 3500 (ancha) perteneciente al grupo hidroxilo, 1510 característica de aromáticos, y tres bandas en 990, 920 y 938 cm<sup>-1</sup> características de un grupo vinilo mono sustituido. El espectro IR del cinamaldehído presenta bandas en 3330 (débil), 3050, 2820, 2750, 1660 (intensa, debida al grupo carbonilo), 975, 740 y 695 cm<sup>-1</sup> entre otras.

### ***Espectrometría de Masas***

Para conocer la composición, tanto cualitativo y cuantitativamente, de los aceites esenciales, es común utilizar técnicas de cromatografía de gases y espectrometría de masas. Estos equipos proporcionan acceso a bases de datos que contienen los espectros de masas de varios componentes existentes, por lo que el análisis es automatizado y exacto. Recientemente, con la aplicación de métodos quimiométricos, se puede extraer más información de los datos experimentales. Con estos métodos, es posible detectar e identificar más componentes en una mezcla, especialmente cuando las señales se superponen (Martínez, 2020).

### 2.2.3 Aceite esencial de molle (*Schinus molle* L.)

#### 2.2.3.1. Composición de aceites esenciales de frutos de *Schinus molle* L

Se tiene varias investigaciones de la composición de aceite esenciales de frutos de molle a nivel del Perú, tal es así, que los frutos de molle provenientes de Ancaes, tuvieron la siguiente composición: Sabieno 12,94%  $\alpha$ -Felandreno 31,15%,  $\beta$ -Felandreno 0,19%, Limoneno 0,10%, Terpineno 21,81%, Canfeno 4,36%, Cadineno 4,36%, 3-ciclo Hexeno 9,16%, 1,4,6 Hepta-trieno 7,70% (Gamarra, 2010).

Por otro lado, se tiene la composición de frutos de molle provenientes del distrito de Lucre, provincia Quispicanchis y departamento del Cusco, fueron los siguientes: Triciclono  $1,7 \pm 0,1\%$ ,  $\alpha$ -Pineno  $5,2 \pm 0,4\%$ , Camfeno  $8,4 \pm 0,7\%$ , Sabineno  $0,8 \pm 0,0\%$ ,  $\beta$ -Pineno  $3,2 \pm 0,2\%$ , Mirceno  $0,9 \pm 0,1\%$ , 3-Octanol Tr,  $\alpha$ -Felandreno  $18,2 \pm 0,5\%$ , *p*-Cimeno  $4,4 \pm 0,3\%$ , Limoneno  $9,4 \pm 0,8\%$ ,  $\beta$ -Felandreno  $6,5 \pm 0,5\%$ , 1,8-Cineol Tr, (E)- $\beta$ -Ocimeno Tr,  $\gamma$ -Terpineno Tr, Terpinoleno  $0,1 \pm 0,0$ , Linalol Tr, Nonanal Tr,  $\beta$ -Tuyona  $0,9 \pm 0,1\%$ , *cis*-2-*p*-Menten-1-ol\* Tr, Mentona  $0,4 \pm 0,0\%$ , iso-Mentona  $0,2 \pm 0,0\%$ , Borneol  $0,1 \pm 0,0\%$ , Terpinen-4-ol  $0,3 \pm 0,0\%$ , Criptona\*  $0,1 \pm 0,0\%$ , Pulegona  $0,4 \pm 0,0\%$ , Carvona Tr, Piperitona  $0,1 \pm 0,0\%$ , Bornil acetato Tr, Timol Tr,  $\alpha$ -Copaeno  $0,2 \pm 0,0\%$ ,  $\beta$ -Elemeno  $0,4 \pm 0,0\%$ ,  $\alpha$ -Gurjuneno  $3,1 \pm 0,3\%$ , (*Z*)-Cariofileno  $4,9 \pm 0,4\%$ ,  $\alpha$ -Humuleno  $2,2 \pm 0,1\%$ , allo-Aromadendreno  $1,2 \pm 0,1\%$ , *trans*-Cadina-1(6),4-dieno\*  $0,1 \pm 0,0\%$ ,  $\gamma$ -Muuroleno  $0,4 \pm 0,0\%$ , Germacreno D  $0,4 \pm 0,0\%$ ,  $\beta$ -Selineno  $0,1 \pm 0,0\%$ ,  $\gamma$ -Amorfenol  $0,4 \pm 0,0\%$ , Viridifloreol  $0,5 \pm 0,0\%$ , Bicyclogermacreno  $4,9 \pm 0,3\%$ ,  $\gamma$ -Cadineno  $0,2 \pm 0,0\%$ ,  $\delta$ -Cadineno  $3,8 \pm 0,2\%$ , *trans*-Cadina-1(2),4-dieno\*  $0,1 \pm 0,0\%$ ,  $\alpha$ -Cadineno\*  $0,1 \pm 0,0\%$ , Elemol  $0,5 \pm 0,0\%$ , (E)-2-Tridecenal  $1,5 \pm 0,1\%$ , Germacreno D-4-ol  $5,1 \pm 0,4\%$ , Spatuleno  $1,5 \pm 0,1\%$ , Glenol Tr, Viridiflorol  $1,4 \pm 0,1\%$ , 1,10-di-epi-Cubenol  $0,5 \pm 0,0\%$ , 10-epi- $\gamma$ -Eudesmol  $0,5 \pm 0,0\%$ , epi- $\alpha$ -Cadinol  $1,8 \pm 0,1\%$ ,  $\alpha$ -Murolol  $0,4 \pm 0,0\%$ ,  $\alpha$ -Cadinol  $2,3 \pm 0,2$ . (Solis Quispe, 2018), en cursiva se puede observar los componentes volátiles mayoritarios frutos de molle.

En frutos de molle recolectados en Arteaga, Coahuila, México, se han determinado que los componentes mayoritarios fueron los siguientes:  $\alpha$ -Pineno 2,6%, Mirceno 5,1%,  $\alpha$ -Felandreno 41,3%, *o*-Cimeno 8,5%, Limoneno 38,5% (Hidrocarburos monoterpénicos). Monoterpenos oxigenados, ausencia.  $\beta$ -Elemeno 0,2%,  $\alpha$ -Gurjuneno 0,2%, 4,8  $\beta$ -Epoxy cariofileno 0,6%,  $\alpha$ -Humulona 0,2%,  $\alpha$ -Muurolona 0,2%,  $\gamma$ -Cadineno 0,1% ,  $\delta$ -Cadinene 0,7% (Hidrocarburos sesquiterpénicos) y otros en trazas (Guerra-Boone et al., 2013).

Según Viturro et al.(2010) el aceite esencial de las hojas de molle presenta como componentes mayoritarios el  $\alpha$ -felandreno, mirceno,  $\beta$ -felandreno,  $\beta$ -cariofileno, D-limoneno y *p*-cimeno. Mientras en el aceite esencial de los frutos de molle, los componentes mayoritarios son  $\beta$ -espatuleno,  $\alpha$ - y  $\beta$ -felandreno,  $\beta$ -limoneno, silvestreno mirceno, pineno,  $\alpha$  carvacrol,  $\beta$  perillaldehído y otros.

#### **2.2.3.2. Terpenos presentes en aceite esencial de *Schinus molle* L.**

El aceite esencial de frutos de *Schinus molle* presenta mayormente compuestos terpénicos en su composición tales como: Hidrocarburos monoterpénicos 96%, Monoterpenos oxigenados 0%, Hidrocarburos sesquiterpénicos 2,2%, sesquiterpenos oxigenados 0,2%, Otros 1.4% (Guerra-Boone et al., 2013). Otras investigaciones presentan la siguiente composición: Hidrocarburos monoterpénicos 79,69%, Monoterpenos oxigenados 11,75%, Hidrocarburos sesquiterpénicos 3,69%, sesquiterpenos oxigenados 1,83%, Otros 1,59% (Bendaoud et al., 2010).

#### **2.2.4. Extracción de aceites esenciales**

Respecto a la extracción de aceites esenciales Pino, (2015) manifiesta:

Los aceites esenciales pueden ser obtenidos de las semillas, raíces, flores, hojas, cortezas y cáscaras de las frutas por procesos destilativos o mecánicos. Estos son procesos muy simples, pero en particular, la destilación sufre de varios inconvenientes: degradación térmica, hidrólisis y solubilización en agua que pueden alterar el olor y sabor de muchos aceites esenciales extraídos por esta técnica. La obtención de los aceites esenciales puede ser con fines analíticos o comerciales, lo que definirá la escala del procedimiento a utilizar. Es evidente que para fines analíticos se requiere mucho menos material vegetal y garantizar que el aceite esencial obtenido represente, lo más genuinamente posible, la composición original en el material vegetal; mientras que para fines industriales se requiere de una cantidad de material vegetal abundante y de un proceso tecnológico que garanticen una buena rentabilidad económica.

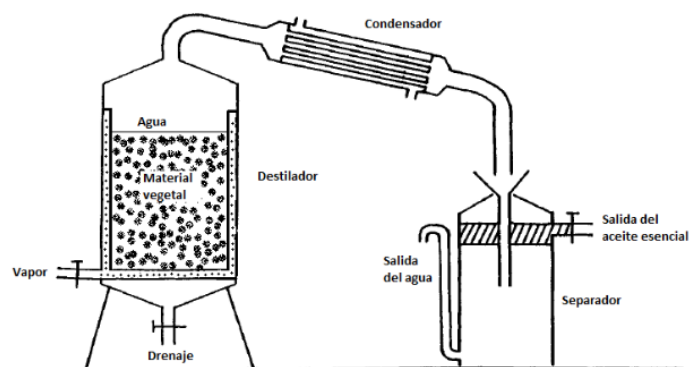
Varios métodos de extracción han sido desarrollados para obtener aceites esenciales de plantas tales como:

- Hidrodestilación
- Destilación con vapor
- Extracción con solventes
- Ultrasonido
- Microondas
- Calentamiento óhmico
- Fluidos supercríticos
- Campo de pulsos eléctricos

Los métodos tradicionales (convencionales) utilizados para la extracción son la hidrodestilación, destilación por vapor (arrastre por vapor) y extracción por solventes, aplicados en escala comercial. También se cuenta tecnologías novedosas de extracción como los ultrasonido, microondas, calentamiento óhmico, fluidos supercríticos y campo de pulsos eléctricos, conocidos también como métodos no convencionales, desarrollados como alternativas a métodos tradicionales. (Roohinejad et al., 2017). A continuación, se muestran los diagramas de equipos que se usan en la hidrodestilación y destilación con vapor de aceites esenciales.

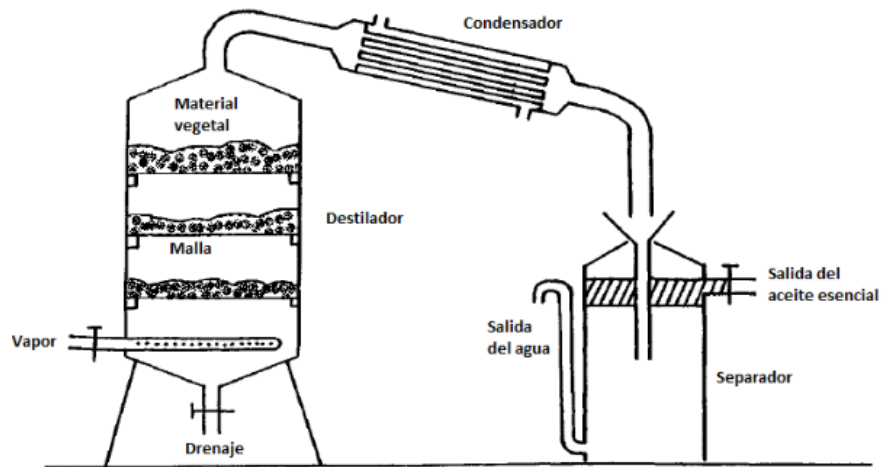
**Figura 1**

*Diagrama de un hidrodestilador*



**Figura 2**

*Diagrama de un destilador por vapor (arrastre de vapor)*



#### **2.2.4.1. Destilación al vapor (Destilación por arrastre de vapor)**

La destilación por vapor (SD) es uno de los métodos clásicos aplicados para la extracción de aceite esencial (AE). También se encuentra entre los métodos más adecuados para obtener AE de alta calidad. Durante las últimas décadas, SD ha extraído generalmente grandes cantidades de AE de hierbas y especias para uso comercial. SD es adecuado para extraer componentes sensibles al calor (por ejemplo, volátiles) y purificarlos mediante la aplicación de vapor. (Roohinejad et al., 2017)

Como en una destilación al vapor intervienen altas temperaturas, no se puede evitar la alteración química en los compuestos de interés. Varios factores determinan la calidad final de los AE destilados al vapor a partir de hierbas y especias. Uno de ellos está relacionado con el material vegetal en sí, como las variaciones entre especies, partes de la planta, condiciones de estrés, estaciones y áreas de cosecha. También es importante un control cuidadoso del tiempo y la temperatura de la destilación al vapor. Se demostró que la SD realizada durante solo 20 minutos permitió un máximo en los rendimientos de EO de menta (1,89 % de rendimiento de aceite), limoncillo (0,163 % de rendimiento de aceite) y palmarosa (0,182 % de rendimiento de aceite), y SD prolongado (hasta 160 y 240 min) no demostró aumentar aún más el rendimiento de AE. El tiempo óptimo de la SD para garantizar una extracción eficiente de aceite varió entre diferentes materiales vegetales. Está claro que el tiempo de la SD afecta en gran medida el rendimiento y la composición del aceite y los rendimientos máximos logrados para cada componente químico individual en los EO dependen en gran medida de sus propiedades de estabilidad térmica. El rendimiento de los componentes de EO de bajo punto de

ebullición siempre es mayor con un tiempo de SD más corto y se degrada con un tiempo de SD prolongado, mientras que se observa una tendencia inversa para los constituyentes de alto punto de ebullición. (Roohinejad et al., 2017)

### **2.2.5 Espectroscopia Infrarroja – reflectancia total atenuada (FTIR-ATR)**

Respecto a la espectroscopia infrarroja – reflectancia total atenuada (FTIR-ATR) Zahir et al., (2017) manifiesta:

La espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier, (FTIR), acoplada a un accesorio de reflectancia total atenuada (ATR) es una técnica que tiene sus bases en las vibraciones moleculares, ofrece diversas ventajas en el análisis, como rapidez, el uso de pequeñas cantidades de muestras y solventes, y registra diversas longitudes de onda simultáneamente; esta técnica nos permite obtener información cualitativa sobre compuestos moleculares, y datos cuantificables de la relación entre la intensidad de las bandas y la concentración de componentes principales y secundarios en el aceite.

La técnica de la transformada de Fourier aprovecha la tecnología moderna de almacenamiento y procesamiento de grandes cantidades de datos mediante un ordenador. Esta técnica se ha impuesto como método estándar (Hesse et al., 2005).

Según Hesse et al., (2005) respecto al funcionamiento de una espectroscopia infrarroja manifiesta:

El principio básico es el registro simultáneo de todas las frecuencias del espectro infrarrojo (IR) por parte del detector, que hace superfluo el gran consumo de tiempo que se invierte en el barrido. Esto se consigue si la luz policromática de la fuente luminosa IR, con la misma intensidad y banda de frecuencias, se transforma en todo momento por medio de un interferómetro, en un interferograma, que no es una función de la frecuencia, sino del tiempo (es decir, transformación del dominio de frecuencias al dominio tiempos). Después del paso de la radiación “preparada” a través de la muestra, se vuelve a convertir el interferograma en un espectro mediante una operación matemática, la transformación de Fourier (es decir, se vuelve al dominio de frecuencias) (Hesse et al., 2005).

Respecto a la La reflectancia total atenuada (ATR) Subramanian & Rodríguez Saona,

(2008) manifiesta:

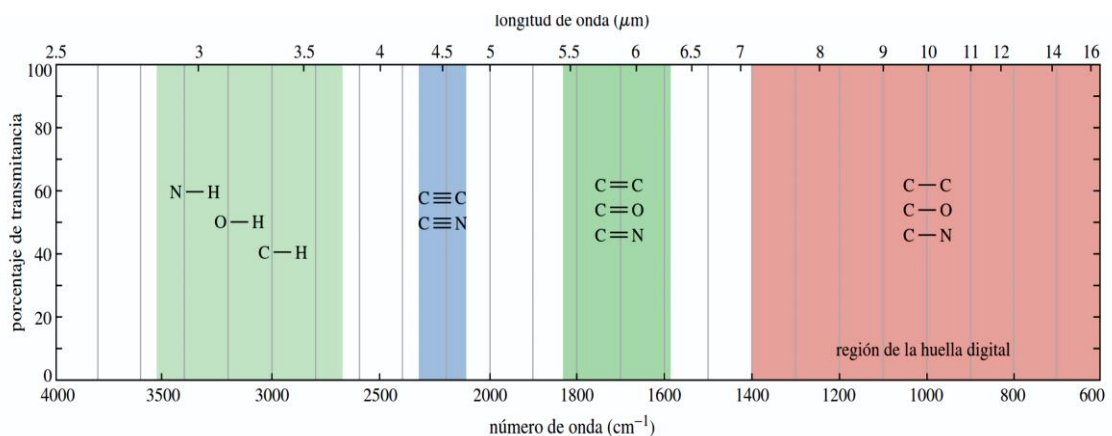
Es una de las técnicas comúnmente empleada. Cuando un rayo infrarrojo viaja desde un medio de alto índice de refracción a un medio de bajo índice de refracción (muestra), cierta cantidad de luz se refleja nuevamente al medio de bajo índice, En un ángulo de incidencia particular, casi todas las ondas de luz se reflejan hacia atrás. Este fenómeno se llama reflexión interna total. En esta condición, cierta cantidad de la energía de la luz escapa del cristal y se extiende una pequeña distancia (0.1 - 5  $\mu\text{m}$ ) más allá de la superficie en forma de olas. Esta ola invisible se llama ola evanescente. La intensidad de la luz reflejada se reduce en este punto. Este fenómeno se llama reflectancia total atenuada. Cuando la muestra se aplica sobre el cristal, la cantidad de radiación infrarrojo que penetra más allá del cristal es absorbida por la muestra. Esta absorbancia se traduce al espectro infrarrojo de la muestra. Sin embargo, esta técnica está limitada por la homogeneidad de la muestra características bien definidas.

### 2.2.5.1 Resumen simplificado de las frecuencias de estiramientos IR

La figura 3 muestra el resumen simplificado de las frecuencias de estiramientos IR

**Figura 3**

*Resumen simplificado de las frecuencias de estiramientos IR.*

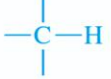
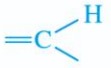

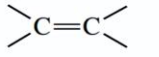
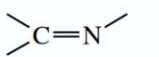
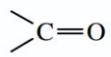


Tomado de Wade & Simek (2017).

## 2.2.5.2 Resumen de las frecuencias de estiramiento IR

**Tabla 1**

*Resumen de las frecuencias de estiramiento IR*

Frecuencia (cm <sup>-1</sup> )	Grupo funcional	Comentarios
3300	alcohol O—H amina, amida N—H alquino ≡C—H	siempre ancha puede ser ancha, pronunciada o ancha con bandas siempre pronunciada, por lo regular intensa
3000	alcano  alqueno  ácido O—H	justo debajo de 3000 cm <sup>-1</sup> justo arriba de 3000 cm <sup>-1</sup> muy ancha
2200	alquino —C≡C— nitrilo —C≡N	justo debajo de 2200 cm <sup>-1</sup> justo arriba de 2200 cm <sup>-1</sup>
1710 (muy intensa)	carbonilo 	cetonas, ácidos alrededor de 1710 cm <sup>-1</sup> aldehídos a alrededor de 1725 cm <sup>-1</sup> ésteres mayores a y alrededor de 1735 cm <sup>-1</sup> la conjugación disminuye la frecuencia amidas menores y a alrededor de 1650 cm <sup>-1</sup>
1660	alqueno  imina  amida 	la conjugación disminuye la frecuencia C=C aromático a alrededor de 1600 cm <sup>-1</sup> más intensa que la del C=C más intensa que la del C=C (vea arriba)

Los éteres, ésteres y alcoholes también muestran el estiramiento del C—O entre 1000 y 1200 cm<sup>-1</sup>.

Tomado de Wade & Simek (2017)

Las bandas espectrales características determinadas con ATR-IR para algunos terpenos se enumeran en la Tabla siguiente con su asignación. Además de la identificación de los componentes del aceite esencial según ATR-IR.

**Tabla 2***Bandas espectrales características determinadas con ATR-IR para algunos terpenos.*

Terpenes	Compuestos	ATR-IR (cm-1)	Grupo funcional
Monoterpenos acíclicos			
	p -Cymeno	1515	
		813	$\omega$ (C-H)
	Limoneno		
		1644	$\nu$ (ethylene C=C)
		886	$\omega$ (C-H)
	Terpinenol	1050	$\delta$ (C-C-OH)
		924	$w$ (CH <sub>2</sub> )
		887	$w$ (C-H)
	$\alpha$ -Terpineno	823	$\omega$ (C-H)
	$\gamma$ -Terpineno	947	$\omega$ (CH <sub>2</sub> )
		781	$\omega$ (C-H)
Monoterpenos biciclicos			
	$\alpha$ -Pineno	1658	$\nu$ ( C=C )
		886	$\omega$ (CH 2)
		787	$\omega$ (C-H)
	$\beta$ -Pineno	1640	$\nu$ ( C=C )
		873	$\omega$ (CH 2)
	Sabineno	1653	$\nu$ ( C=C )
		861	$\omega$ (CH 2)
Sesquiterpenos			
	$\alpha$ -Bisabolol	1437	$\delta$ (CH <sub>2</sub> )
		1375	$\delta_{sym}$ (CH <sub>3</sub> )
		828	$\omega$ (CH 2)
		780	$\omega$ (C-H)
	$\beta$ -Cariofileno	1635	$\nu$ ( C=C )
		1447	$\delta$ (CH <sub>2</sub> )
		1369	$\delta_{sym}$ (CH <sub>3</sub> )
		887	$\omega$ (CH 2)
		877	$\omega$ (CH 2)

*Nota.* Tomado de Schulz & Baranska (2007).

**Tabla 3**

*Bandas espectrales características determinadas con ATR-IR para algunos terpenos.*

Terpenes	Compuestos	ATR-IR (cm-1)	Grupo funcional
	Felandreno	1462 (m) 1382 (m) 1364 (m) 808 (m) 786 (m) 721 (m)	d(CH <sub>2</sub> ) + d(CH <sub>2</sub> )   δ(CH) δ(ring)
Monoterpenos acíclicos	Limoneno	1644 (m) 1435 (m) 1378 (m) 886 (s) 800 (m) 544 (m)	v(C=C) d(CH <sub>2</sub> ) + d(CH <sub>2</sub> ) ω(H-C-H) + δ(C skeleton) + v(C=CH) δ(CH) δ(ring)

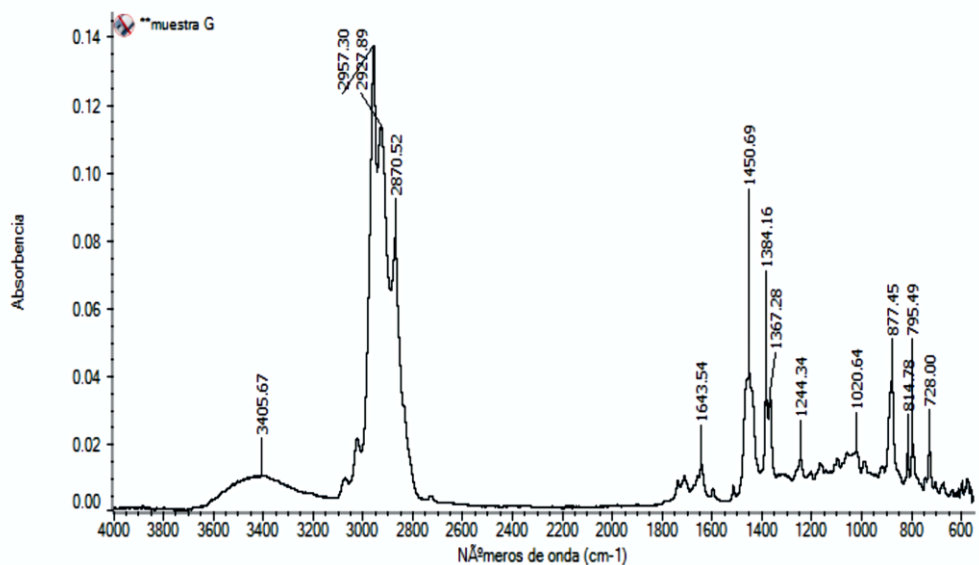
*Nota.* Datos tomados de Schulz & Baranska (2021).

### 2.2.5.4 Barridos espectrales de aceite esencial de Schinus

Diversas investigaciones sobre la especie Schinus han presentado los barridos espectrales de aceite esencial de schinus las cuales se presentan a continuación.

**Figura 4**

*Espectro IR del aceite esencial de Schinus areira.*



*Nota.* Tomado de Solis Quispe (2018).

La Fig. 4, muestra bandas de absorción características del espectro IR del aceite esencial de *Schinus areira* con los siguientes grupos funcionales: La banda de absorción a 1367,28 cm<sup>-1</sup> (1365 - 1370) característica de isopropil 1450,69 cm<sup>-1</sup> y 1384,16 cm<sup>-1</sup> del grupo metil. 1643,54 cm<sup>-1</sup> (1680 – 1600) característica del doble enlace carbono – carbono (C=C). Absorciones a 2870,52 cm<sup>-1</sup>, 2927,89 cm<sup>-1</sup> y 2957,30 cm<sup>-1</sup> (2960 – 2850) menores a 3000 cm<sup>-1</sup>, característicos de hidrógenos enlazados a carbonos sp<sup>3</sup>, hidrogeno enlazado a un enlace simple carbono – carbono (-CH<sub>2</sub>- y -CH<sub>3</sub>). Absorción a 3405,67 cm<sup>-1</sup> (3650 - 3200) del grupo alcohol (-OH). También se provee moléculas que en su estructura poseen grupos: metil (1450,69 cm<sup>-1</sup> y 1384,16 cm<sup>-1</sup>), metil y metileno (2870,52 cm<sup>-1</sup>, 2927,89 cm<sup>-1</sup> y 2957,30 cm<sup>-1</sup>), isopropil (1367,28 cm<sup>-1</sup>), alqueno (1643,54 cm<sup>-1</sup>) y alcohol (3405,67 cm<sup>-1</sup>); los que corresponden a terpenos saturados e insaturados con grupo funcional alcohol y no se observa presencia de compuestos aromáticos (Solis Quispe, 2018).

## **CAPÍTULO III**

### **MATERIALES Y MÉTODOS**

#### **3.1. TIPO DE INVESTIGACIÓN.**

El presente estudio reúne las condiciones metodológicas de una investigación básica, tiene un enfoque cuantitativo, se basa en establecer la identificación de grupos funcionales y componentes volátiles mayoritarios a diferentes tiempos y temperaturas de extracción de aceite esencial de frutos de molle a 548 mmHg. El tipo de investigación aplicado a este estudio es correlacionado porque permitirá:

Realizar un análisis de varianza, con el fin de evaluar el comportamiento de una de las variables en función de las otras y medir el grado de relación entre las mismas.

#### **3.2. NIVEL DE INVESTIGACIÓN.**

De acuerdo a la naturaleza del estudio de la investigación, reúne por su nivel las características de un estudio descriptivo y correlacional.

#### **3.3. MÉTODO.**

La investigación demanda aplicar experimentos, análisis estadísticos de los resultados del estudio.

#### **3.4. POBLACIÓN Y MUESTRA.**

Los frutos de molle (***Schinus molle L***) provienen de centro poblado de Allcohuillca y la muestra se obtuvo con un muestreo por conveniencia.

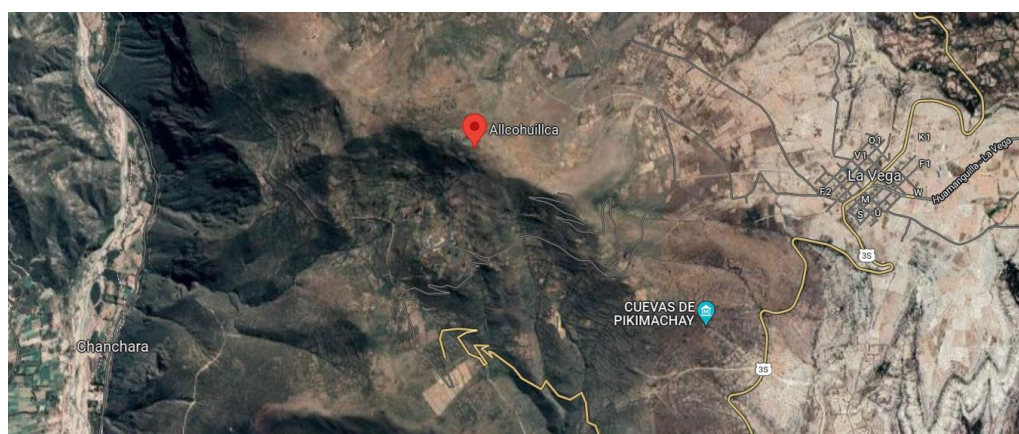
### 3.5. DISEÑO EXPERIMENTAL.

#### 3.5.1. PROCEDENCIA DE FRUTOS DE MOLLE.

Los frutos de molle (***Schinus molle L***) fueron recolectados, en estado maduro, por ciertos pobladores del centro poblado de Allcohuilca, distrito de Iguaín, provincia de Huanta, región Ayacucho, Perú. La ubicación se muestra en figura 5.

**Figura 5**

*Ubicación de recolecta de frutos de molle ( ***Schinus molle L*** )*



**Figura 6**

*Fotografía de frutos de molle ( ***Schinus molle L*** )*

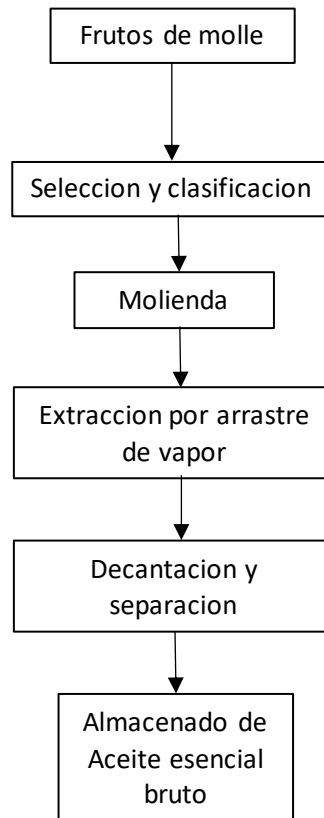


### 3.5.2 EXTRACCIÓN DEL ACEITE ESENCIAL DE FRUTOS DE MOLLE.

Para la extracción del aceite esencial de frutos de molle se siguió las siguientes etapas:

**Figura 7**

*Etapas para la extracción de aceite esencial de frutos de molle ( Schinus molle L)*



**Recepción.** Se recibieron los frutos de molle, envasados en sacos de polietileno, descascarillados provenientes de Allcchuillca y se procedió a evaluar la cantidad y calidad de la materia prima organolépticamente.

**Selección y clasificación.** Se procedió a separar los frutos de molle que presenten deterioro o daños físicos, inmaduros, se realizó en forma manual. Asimismo, se separaron los palillos y piedrecillas presentes en la muestra.

**Molienda.** Los frutos de molle seleccionados se llevaron a un molino de disco, se seleccionó la granulometría adecuada en forma manual, la molienda tuvo por objeto reducir el tamaño de los frutos del molle, con la finalidad de ampliar el área de contacto entre los aceite y el vapor de agua y obtener rendimientos óptimos de aceite esencial.

**Extracción del aceite esencial.** La extracción del aceite esencial de molle se realizó por destilación con arrastre por vapor, para el cual se hizo uso del equipo de extracción del aceite esencial - Planta piloto de extracción de aceites esenciales - Mod. UDC-2/EV de ELETTRONICA VENETA, que incluye un generador de vapor, tanque extractor, condensador y distintos instrumentos de control de temperatura, presión y caudal.

### Figura 8

*Planta piloto de extracción de aceites esenciales - Mod. UDC-2/EV, ELETTRONICA VENETA*



Los frutos de molle molidos se colocaron en el tanque extractor, se inyectó vapor de generador de vapor con una presión de 0,5 bar, se controlaron y registraron las temperaturas de tanque de extracción (T1), ingreso de agua al condensador (T2), salida de agua del condensador (T3), y temperatura de salida del aceite esencial (T4). Asimismo, se controló el flujo de agua al condensador, la cantidad de aceite esencial extraído en cada tiempo de extracción. El vapor de agua arrastro el aceite esencial del tanque extractor al condensador en un tiempo promedio de 15 min, a partir de la 1 gota de aceite esencial se controló los tiempos de extracción de aceite esencial de frutos de molle. El aceite esencial y agua condensados formaron 2 fases, los cuales se separaron con el dispositivo de separación que incluye el equipo.

*Diseño experimental*

Para la identificación de los grupos funcionales y componentes volátiles mayoritarios en el aceite esencial de frutos molle durante los diferentes tiempos de extracción, se planteó un *diseño experimental factorial* para el cual se tuvo las variables independientes: tiempo y temperatura de extracción, los tiempos de extracción fueron tomados como referencia del trabajo de investigación de (Dos Santos Cavalcanti et al., 2015), por lo que los tiempos de extracción fueron 30, 60, 90, 120, 180, 240, 300 y 360 minutos respectivamente y la variable temperatura fue 81,3 y 90,3 °C. Para una temperatura promedio de 90,3 °C el ensayo se realizó a 548 mmHg, para lograr una temperatura promedio de 81,3 °C el equipo de extracción se mantuvo a una presión de 150 mmHg. Las muestras de aceite esencial de molle extraídas fueron codificadas de acuerdo al diseño experimental (AE, AF). El diseño experimental para la extracción de aceites esenciales y su identificación de grupos funcionales y componentes volátiles mayoritarios es la siguiente:

**Tabla 4**

*Diseño experimental para la extracción de aceites esenciales.*

Temperatura °C	Tiempo (min)	Código	Grupos funcionales	Componentes mayoritarios
90,3	30	AE1		
	60	AE2		
	120	AE3		
	180	AE4		
	240	AE5		
	300	AE6		
	360	AE7		
81,3	30	AF1		
	60	AF2		
	120	AF3		
	180	AF4		
	240	AF5		
	300	AF6		
	360	AF7		

El *diseño experimental* para esta investigación es un diseño factorial 2 x 7, donde se tiene 2 temperaturas de extracción 81,3 y 90,3 °C y 7 tiempos 30, 60, 120, 180, 240, 300, 360 (min).

Donde los códigos tienen la siguiente característica:

AE1: Aceite esencial obtenido durante los primeros 30 minutos de destilación a 90,3 °C.

AE2: Aceite esencial obtenido entre 30 y 60 minutos de destilación a 90,3 °C.

AE3: Aceite esencial obtenido entre 60 y 120 minutos de destilación a 90,3 °C.  
AE4: Aceite esencial obtenido entre 120 y 180 minutos de destilación a 90,3 °C.  
AE5: Aceite esencial obtenido entre 180 y 240 minutos de destilación a 90,3 °C.  
AE6: Aceite esencial obtenido entre 240 y 300 minutos de destilación a 90,3 °C  
AE7: Aceite esencial obtenido entre 300 y 360 minutos de destilación a 90,3 °C  
AF1: Aceite esencial obtenido durante los primeros 30 minutos de destilación a 81,3 °C  
AF2: Aceite esencial obtenido entre 30 y 60 minutos de destilación a 81,3 °C.  
AF3: Aceite esencial obtenido entre 60 y 120 minutos de destilación a 81,3 °C.  
AF4: Aceite esencial obtenido entre 120 y 180 minutos de destilación a 81,3 °C.  
AF5: Aceite esencial obtenido entre 180 y 240 minutos de destilación a 81,3 °C.  
AF6: Aceite esencial obtenido entre 240 y 300 minutos de destilación a 81,3 °C  
AF7: Aceite esencial obtenido entre 300 y 360 minutos de destilación a 81,3 °C

**Almacenado.** A las fracciones de aceite esencial (AE, AF) se agregó Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> anhidro para la eliminación total de agua que pueda contener. Tras una filtración y separación de Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> las fracciones de aceite (muestras) se almacenaron en refrigeración (6.0 °C), en envases de vidrio ámbar y tapa hermética. Estas muestras refrigeradas se llevaron a análisis para la determinación de características físicas y determinación de grupos funcionales y componentes volátiles mayoritarios.

### **3.5.3 CARACTERIZACIÓN DEL ACEITE ESENCIAL DE FRUTOS DE MOLLE.**

Se realizaron los siguientes ensayos para caracterizar el aceite esencial de molle y así evaluar identificación de grupos funcionales y componentes volátiles mayoritarios durante la destilación.

- Índice de refracción, densidad
- Obtención de espectros con Espectrofotómetro Infrarrojo con Transformada de Fourier (FT-IR)
- Obtención de espectros con Cromatografía de gases acoplado a masa GC-MS

#### **3.5.3.1 Índice de refracción.**

La determinación índice de refracción de las muestras de aceite esencial de frutos de molle se realizó según la norma AOAC 920.141 y AOAC 921.08, utilizando un refractómetro de ABBE 5 refractometer Bellingham + Stanley Ltd, modelo A11, el cual cuenta con control termostático de temperatura con circulación de agua entre los prismas. El equipo tiene una precisión de 0,0005, para un intervalo dinámico de nD 20°C = 1,300 – 1,700. La lectura del índice de refracción se realizó con la observación de la

separación entre dos campos (claro y oscuro) centrado en el cruce de dos líneas cruzadas. La lectura en la escala se realizó manteniendo la temperatura a 20°C. La verificación del correcto funcionamiento del equipo se realizó previa determinación del índice de refracción de agua destilada según la norma AOAC 921.08.

**Figura 9**

*Refractómetro de ABBE 5 refractometer Bellingham + Stanley Ltd, modelo A11*



**3.5.3.2 Densidad.**

Para la determinación de densidad del aceite esencial de frutos de molle se recurrió al uso del densímetro portátil METTLER TOLEDO modelo Densito 30PX, el cual es un instrumento de medida portátil destinado a determinar la densidad de los líquidos, el aparato opera según el método de cuerpo vibrante, el cual consiste en un tubo de vidrio hueco que vibra a una determinada frecuencia y ésta cambia cuando el tubo se llena con la muestra. Dicha frecuencia se mide y los resultados se convierten automáticamente a densidad, los cuales, se visualizan en el visor con retroiluminación. Las mediciones de densidad (g/ml) se realizaron a una temperatura de 20°C. La calibración se realizó en forma automática de acuerdo al procedimiento que refiere el manual del equipo. La toma de muestra, de los aceites esencial de frutos de molle codificados, se realizó mediante la bomba de muestreo incorporado en el equipo. La resolución del equipo es de 0,0001 g/ml. Las mediciones se realizaron por triplicado.

## Figura 10

*Densímetro portátil METTLER TOLEDO modelo Densito 30PX*



### **3.5.3.3 Obtención de espectros infrarrojo con Espectrofotómetro Infrarrojo con Transformada de Fourier (FT-IR).**

Para la obtención de espectros infrarrojos, picos o bandas espectrales (Absorbancia vs número de onda  $\text{cm}^{-1}$ ), de las muestras (AE1, AE2, AE3, AE4, AE5, AE6, AE7, AF1, AF2, AF3, AF4, AF5, AF6, AF7) del aceite esencial de frutos de molle mediante FTIR se utilizó el Espectrómetro FT - IR Nicolet iS10 de Thermo Scientific, para su operación se siguió los lineamientos del manejo del equipo descritos en su manual. El FT - IR Nicolet iS10 que incluye un accesorio de muestreo con reconocimiento automático de Reflectancia Total Atenuada (ATR) Smart iTR – ATR de punta de diamante, que es una herramienta de muestreo que elimina la fase de preparación de las muestras. Se auto calibró el equipo con software Omnic, propio del equipo. Para la obtención de espectros no se requirió ningún tratamiento a las muestras de aceite esencial de molle, se colocó las muestras de aceite esencial en el portamuestra del equipo FTIR y los espectros infrarrojos fueron registrados en un rango de número de onda de 500 hasta 4000  $\text{cm}^{-1}$ . Los espectros IR obtenidos fueron procesados con el software Omnic 8.0, propio del equipo. El software Omnic 8.0 permitió obtener los picos espectrales para su comparación con la tabla de espectros de infrarrojos por intervalo de frecuencia, de Sigma Aldrich – Merk y determinar la presencia de los grupos funcionales en el aceite esencial de frutos de molle.

Para evaluar los grupos funcionales en los tiempos de extracción se recurrió a los datos de absorbancia de los picos espectrales obtenidos por el software Omnic 8.0 con la opción buscar picos.

Para la identificación de componentes mayoritarios del aceite esencial de aceite de frutos de molles se recurrió al software Omnic 8.0 con la opción buscar de compuestos.

Se evaluó las bandas trans de los conjugados y no conjugados entre 500 y 4000  $\text{cm}^{-1}$ , para el cual se siguió los siguientes pasos:

- Se cargó los espectros IR seleccionados luego ponerlos en modo absorbancia
- Con el menú en PROCESS se ejecutó NORMALIZE PEAK, lo que permite normalizar al espectro de 0 a 1 de absorbancia.
- Se ejecutó SIMPLE BASE LINE, permite estandariza al grupo de espectros con una misma línea base.
- Luego se cambió en el menú a ANALYZE y se ejecutó INTEGRATION WITH BASELINE para integrar las áreas bajo los picos.

**Figura 11**

*Espectrómetro FT - IR Nicolet iS10 de Thermo Scientific*



#### **3.5.3.4 Identificación y porcentaje de los componentes mayoritarios del aceite esencial de frutos de molle, mediante cromatografía de gases acoplado a masa (GC-MS)**

Los análisis para identificar y determinar el porcentaje de los componentes mayoritarios se realizaron en un cromatógrafo de gases acoplado a masa (GC-MS) modelo 7890B de Agilent Technologies (Figura 3.7). Columna cromatográfica capilar Agilent 19091S-433 HP-5ms (30 m x 250  $\mu\text{m}$  x 0,25  $\mu\text{m}$ ). Las condiciones cromatográficas utilizadas fueron: temperatura del inyector, 274  $^{\circ}\text{C}$ . El gas portador fue helio de alta pureza a un

caudal constante de 0,9 ml min<sup>-1</sup>. Se realizaron inyecciones de 1 µL. El modo de escaneo (MS) se escaneó desde m/z 35–550, con un umbral de conteo de 150 y un retraso del solvente de 3 min. El cuadrupolo se mantuvo a 150 °C con la fuente de iones a 280 °C. La temperatura inicial del horno se programó desde 60 °C, incrementándose a razón de 3 °C min<sup>-1</sup> hasta 246 °C, manteniendo esta temperatura durante 30 minutos. El software para el análisis de datos fue el Agilent Mass Hunter Unknowns Analysis 10.0. Por los altos costos que incurren los análisis en un GC-MS solo se analizaron las muestras AE30, AE60, AE120, AE240, AE360 y AF30, AF60, AF120, AF240, AF360. Antes del análisis de muestras se llevo a cabo la auto calibración del equipo.

### **Figura 12**

*Cromatógrafo de gases acoplado a masas Agilent, modelo 7890B*



## **3.6 MATERIALES E INSTRUMENTOS.**

### **3.6.1 Materiales de laboratorio.**

- Probeta graduada de 10ml, 50ml, 100ml, 250ml, 500 ml y 1000 ml
- Vasos precipitados
- Pipetas graduadas
- Peras de separación.
- Termómetro digital
- Soporte universal.
- Bureta

- Matraz erlermeyer
- Fiola
- Picnómetro
- Pipeta automática 50 – 200 ul
- Embudos de vidrio.

### **3.6.2 Reactivos químicos.**

- Sulfato de sodio anhidro
- Alcohol etílico al 96%.
- Hexano qp

### **3.6.3 Instrumentos y equipos.**

- ✓ Molino de discos.
- ✓ Balanza analítica.
- ✓ Planta piloto de extracción de aceites esenciales - Mod. UDC-2/EV, ELETTRONICA VENETA.
- ✓ Refractómetro de ABBE 5 refractometer Bellingham + Stanley Ltd, modelo A11.
- ✓ Densímetro portátil METTLER TOLEDO modelo Densito 30PX.
- ✓ Espectrofotómetro Infra Rojo (IR) Thermo Scientific – Smart ITR, Nicolet iS10
- ✓ Cromatógrafo de gases acoplado a masas Agilent, modelo 7890B

## **3.7 LUGAR Y AMBIENTES DE EJECUCIÓN**

Para la parte experimental, preparación de muestra, extracción de aceite esencial y caracterización de aceite se utilizaron los laboratorios de la Facultad de Ingeniería Química y Metalurgia, ubicados en la ciudad universitaria Módulo UNSCH; específicamente los laboratorios siguientes:

- Laboratorio de Transferencia de Masa. Facultad de Ingeniería Química y Metalurgia, Universidad Nacional de San Cristóbal de Huamanga.
- Laboratorio de Investigación de la Facultad de Ingeniería Química y Metalurgia, Universidad Nacional de San Cristóbal de Huamanga.
- Laboratorio del Instituto de Química de la Universidad Federal de Uberlândia, Uberlândia-MG. Brasil

## **3.8 ANÁLISIS ESTADÍSTICO**

Los resultados fueron evaluados estadísticamente usando el Microsoft Excel, Desig Expert V14, Onmic 8.0 y Agilent Mass Hunter Unknowns Analysis 10.0.

## CAPITULO VI

### RESULTADOS Y DISCUSIONES

#### 4.1 EXTRACCIÓN DE ACEITES ESENCIALES DE FRUTOS DE MOLLE (*SCHINUS MOLLE* L)

El proceso de extracción de aceites esenciales de frutos de molle se llevó a cabo bajo las condiciones que se detallan en la tabla 5 y 6. Las fracciones de aceite esencial extraídas se codificaron en AE y AF, aquellas extraídas a promedio de 90,3 °C están codificadas con la letra AE y aquellas extraídas a promedio de 81,3°C están codificadas con la letra AF. Las codificaciones AE y AF tienen las siguientes características:

**Tabla 5**

*Datos de extracción de aceite esencial de frutos de molle a 90,3°C*

Código	Tiempo (min)	Masa de aceite esencial (g)	% Aceite esencial de frutos de molle (m/m)	T1 °C	T2 °C	T3 °C	T4 °C	Presión (mmHg)
AE1	30	212,10	2,75	88,8	17,3	18,7	18,4	548
AE2	60	79,50	3,78	90	17,3	19,3	18,7	548
AE3	120	45,50	4,37	90,3	17,3	19	18,7	548
AE4	180	16,60	4,58	90,3	17,3	19	18,9	548
AE5	240	13,90	4,76	90,3	17,2	18,7	19,1	548
AE6	300	10,80	4,90	90,3	17,2	18,7	19	548
AE7	360	6,60	4,99	90,3	17,2	18,5	18,3	548

T1, corresponde al registro de la temperatura de la columna (tanque) de extracción, como puede observarse en la tabla 5, al inicio de la extracción la temperatura registraba 88,8 °C, que progresivamente al pasar el tiempo se incrementó y se mantuvo a 90,3 °C. T2, corresponde a la temperatura de ingreso de agua al condensador, puede observarse

que la temperatura es casi constante 17,3 – 17,2 °C. T3, corresponde a la temperatura de salida del agua del condensador, puede observarse que la temperatura varía entre 18,5 a 19,3 °C. T4, corresponde a la temperatura de la salida del aceite esencial de frutos de molle, puede observarse que la temperatura varia de 18,3 – 19,1 °C. El proceso de extracción se llevó a presión constante de 548 mmHg.

**Tabla 6**

*Datos de extracción de aceite esencial de frutos de molle a 81,3°C*

Código	Tiempo (min)	Masa de aceite esencial (g)	% Aceite esencial de frutos de molle (m/m)	T1 °C	T2 °C	T3 °C	T4 °C	Presión (mmHg)
AF1	30	211,50	2,74	80,2	17,6	20,4	18,3	150
AF2	60	56,30	3,47	80,6	17,6	17,2	18,7	150
AF3	120	48,90	4,10	81,3	17,6	17,9	18,4	150
AF4	180	14,90	4,30	81,3	17,6	17,5	18,6	150
AF5	240	12,60	4,46	81,3	17,6	17,3	19,3	150
AF6	300	10,00	4,59	81,8	17,6	21,3	18,8	150
AF7	360	6,40	4,67	81,8	17,6	19,1	18,4	150

T1, corresponde al registro de la temperatura de la columna (tanque) de extracción, como puede observarse en la tabla 6, al inicio de la extracción la temperatura registraba 80,2 °C, que progresivamente al pasar el tiempo se incrementó y se mantuvo a 81,3 °C. T2, corresponde a la temperatura de ingreso de agua al condensador, puede observarse que la temperatura es casi constante 17,6 °C. T3, corresponde a la temperatura de salida del agua del condensador, puede observarse que la temperatura varía entre 17,2 a 20,4 °C. T4, corresponde a la temperatura de la salida del aceite esencial de frutos de molle, puede observarse que la temperatura varia de 18,3 – 19,3 °C. El proceso de extracción se llevó a presión constante de 150 mmHg.

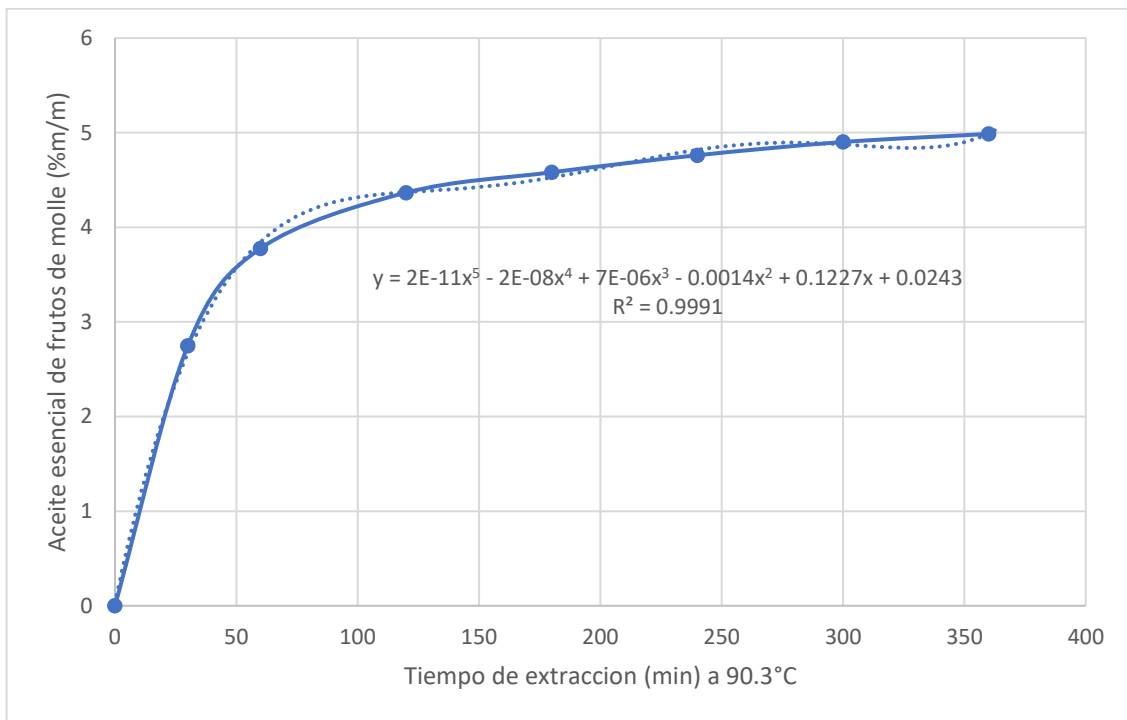
Un estudio evaluó la extracción de aceite esencial de hojas de *Schinus molle* usando dos sistemas de destilación (Clevenger y Rayleigh) y tiempos de extracción diferentes (60 y 120 minutos) encontrando mayor rendimiento en el aparato de Clevenger, encontrándose diferentes tasas de incremento en el tiempo, durante los diferentes tiempos de extracción, un mayor tiempo de extracción mejora el rendimiento de extracción (Murrieta-Dionicio et al., 2024)

Los rendimientos reportados para el aceite esencial de frutos de *Schinus molle* varían ampliamente en diferentes investigaciones ( $\approx 0.5\text{--}4.1\%$ ) (Volpini-Klein et al., 2021) (Giuffrida et al., 2020) (Belhoussaine et al., 2022), que depende del quimiotipo, la madurez y el método de extracción. En este trabajo de investigación los porcentajes obtenidos en la extracción por arrastre de con vapor ( $4.67 - 4.99\%$ ) se encuentran en el rango superior de lo reportado y probablemente se relacionan con el mayor tiempo de extracción y las condiciones operativas empleadas.

### 3.1.1 Porcentaje de extracción de aceite esencial de frutos de molle

**Figura 13**

*Porcentaje de extracción de aceite esencial de frutos de molle a 90,3 °C a diferentes tiempos 30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min*

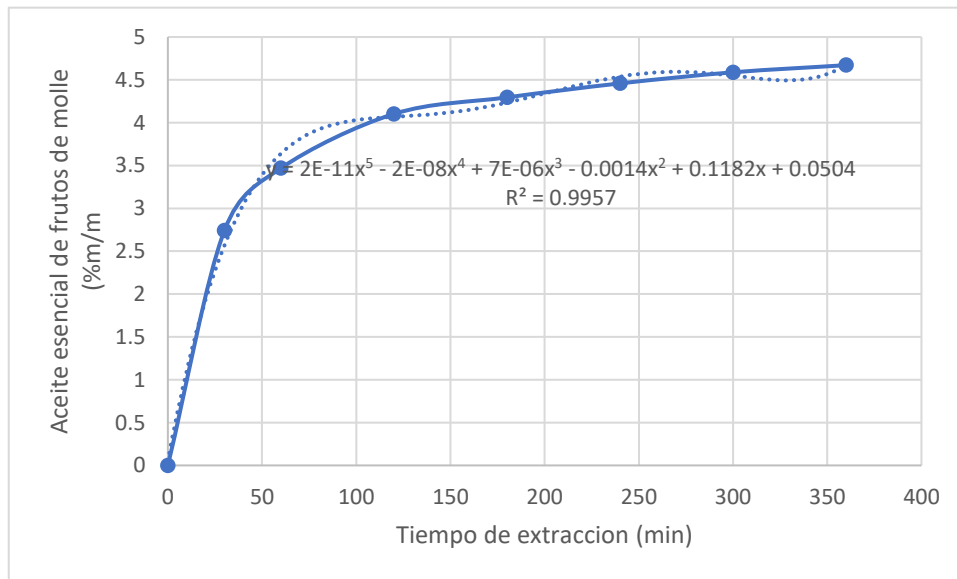


En la figura 13 se observa el porcentaje de extracción del aceite esencial los frutos de molle a 90,3 °C, se puede notar que para obtener la mitad del contenido máximo estimado de porcentaje de aceite esencial es a los 30 min de extracción. Por otro lado, a partir 60 min de tiempo de extracción el porcentaje de extracción va disminuyendo y entre los 300 y 360 min la extracción es mínima. La curva de tendencia que mejor se ajusta al porcentaje de extracción del aceite esencial es una no lineal polinómica de 5 grado con  $R^2 = 0,9991$ . Desde el punto de económico, el gasto de vapor para el proceso

de extracción de aceite esencial al parecer es innecesario a partir de los 120 min de extracción, pues los extractos a partir de este tiempo son mínimas.

### Figura 14

Porcentaje de extracción de aceite esencial de frutos de molle a 81,3 °C a diferentes tiempos 30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min



En la figura 14 se observa el porcentaje de extracción del aceite esencial los frutos de molles a 81,3 °C, similar en el caso de 90, 3 °C se puede notar que para obtener la mitad del contenido máximo estimado de porcentaje de aceite esencial es a los 30 min, a partir 60 min de tiempo de extracción el porcentaje de extracción va disminuyendo y entre los 300 y 360 min la extracción es mínima. La curva de tendencia que mejor se ajusta a la cinética de extracción del aceite esencial es no lineal polinómica de 5 grado con  $R^2 = 0,9957$ .

Dos Santos Cavalcanti et al. (2015) observaron que la velocidad de extracción de aceite esencial de frutos de *Schinus* es más rápida que la de las hojas, por lo que para obtener la mitad del contenido máximo estimado de aceites esenciales se necesitaron 150 y 75 minutos para la extracción de hojas y solo 11 y 29 minutos para los frutos de *S. terebinthifolius* y *S. molle*, respectivamente. En esta investigación, a los 30 min de extracción se obtiene la mitad del contenido máximo estimado de porcentaje de aceite esencial, concordando con el tiempo extraído por Dos Santos Cavalcanti et al., (2015).

#### 4.1.2 Análisis de varianza (ANOVA) extracción de aceite esencial de frutos de molle.

Para evaluar la cantidad de aceite esencial de semillas de molle extraídos a 90,3°C y 81,3 °C, y verificar si son similares o diferentes se llevó a cabo el análisis de varianza (tabla 7) con los datos de la tabla 5 y 6

**Tabla 7**

*Análisis de varianza (ANOVA) de la cantidad (%) de aceite esencial de frutos de molle, extraídos a 90,3 y 81,3 °C, a diferentes tiempos.*

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p
<b>Modelo</b>	6,96	7	0,9943	163,13	< 0,0001 significativo
A-TEMPERATURA	0,2314	1	0,2314	37,97	0,0008
B-TIEMPO	6,73	6	1,12	183,99	< 0,0001
<b>Residual</b>	0,0366	6	0,0061		
<b>Cor Total</b>	7,00	13			

Los resultados de ANOVA muestran que los valores p son inferiores a 0,05, lo que indica que tanto los factores de temperatura (A) y tiempo de extracción (B) son significativos, es decir que la cantidad de aceite esencial de semillas de molle extraídos a 90,3°C y 81,3 °C, son diferentes en cantidad, y las temperaturas de extracción influyen considerablemente en la cantidad de aceite esencial a diferentes tiempos de extracción. No se evidencian investigaciones similares con análisis de ANOVA para corroborar el grado de desviación con este estudio.

#### 4.2 ÍNDICE DE REFRACCIÓN DE ACEITE ESENCIAL DE FRUTOS DE MOLLE

El índice de refracción de las fracciones de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 90,3°C (AE) y 81,3 °C (AF), tabla 8 y 9, varían mínimamente durante los diferentes tiempos de extracción, los cuales nos permite afirmar que es probable variación en los componentes a cada 30, 60 min de extracción.

**Tabla 8***Índice de Refracción (20°C) de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 90,3°C*

<b>Código</b>	<b>Tiempo de extracción (min)</b>	<b>Índice de Refracción (20°C)</b>
AE1	30	1,4720 ± 0,0001
AE2	60	1,4726 ± 0,0001
AE3	120	1,4764 ± 0,0001
AE4	180	1,4819 ± 0,0001
AE5	240	1,4838 ± 0,0001
AE6	300	1,4851 ± 0,0001
AE7	360	1,4875 ± 0,0001

**Tabla 9***Índice de Refracción (20°C) de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 81,3 °C*

<b>Código</b>	<b>Tiempo de extracción (min)</b>	<b>Índice de Refracción (20°C)</b>
AF1	30	1,4720 ± 0,0001
AF2	60	1,4732 ± 0,0001
AF3	120	1,4760 ± 0,0001
AF4	180	1,4810 ± 0,0001
AF5	240	1,4838 ± 0,0001
AF6	300	1,4856 ± 0,0001
AF7	360	1,4867 ± 0,0001

A las temperaturas de extracción de 81,3 °C y 90,3 °C, el valor de índice de refracción se incrementa conforme avanza el tiempo de extracción. Al inicio (30 min), el índice de refracción es similar a ambas temperaturas (1,4720) y con el tiempo de extracción los valores se van diferenciándose ligeramente, a 90,3 °C se alcanzan índices un poco más altos (hasta 1,4875 en 360 min), a 81,3 °C el máximo es 1,4867.

Podemos considerar, a mayor tiempo de extracción, el aceite se enriquece en compuestos de mayor índice de refracción (terpenos oxigenados, sesquiterpenos, etc.) (Marongiu et al., 2004), lo que eleva el índice de refracción. También la temperatura de extracción influye, aunque la diferencia entre 81,3 °C y 90,3 °C no es tan marcada. A temperatura de 90,3 °C se extrae fracciones más pesadas y eso incrementa el índice de refracción.

Durante la extracción el comportamiento del índice de refracción del aceite esencial indica un cambio en su composición. Se puede interpretar, entonces, que el índice de

refracción funciona como un indicador indirecto de la evolución composicional del aceite esencial durante la destilación.

Los valores de índice de refracción que se tienen en la tabla 8 y 9 coinciden con los valores de índice de refracción de aceite esencial de molle reportado por Llanos (2012) que oscila entre 1,477 a 1,478. Asimismo, en otras investigaciones reportan índice de refracción de aceite esencial de frutos de molle entre 1,476 a 1,484 (Plaza & Ricalde, 2015)

#### **4.2.1. Análisis de varianza (ANOVA) de índice de refracción de aceite esencial de frutos de molle, extraídos a 90,3 y 81,3 °C, a diferentes tiempos**

Para evaluar diferencias en el índice de refracción de aceite esencial de semillas de molle extraídos a 90,3°C y 81,3 °C, se llevó a cabo el análisis de varianza (tabla 10) con los datos de la tabla 8 y 9.

**Tabla 10**

*Análisis de varianza (ANOVA) de índice de refracción de aceite esencial de frutos de molle, extraídos a 90,3 y 81,3 °C, a diferentes tiempos.*

<b>Fuente</b>	<b>Suma de cuadrados</b>	<b>df</b>	<b>Cuadrado medio</b>	<b>Valor F</b>	<b>valor p</b>
<b>Modelo</b>	0,0004	7	0,0001	370,16	< 0,0001 significant
A-TEMPERATURA	7,143E-08	1	7,143E-08	0,4127	0,5444
B-TIEMPO	0,0004	6	0,0001	431,78	< 0,0001
<b>Residual</b>	1,039E-06	6	1,731E-07		
<b>Cor Total</b>	0,0004	13			

Los resultados de ANOVA muestran que el valor p que corresponde al factor temperatura (B) es superior a 0,05, lo que indican que no es significativos, es decir que los valores de índice de refracción del aceite esencial de semillas de molle extraídos a 90,3°C y 81,3 °C son casi similares, por tanto, las temperaturas de extracción no influyen considerablemente en el índice de refracción de aceite esencial a diferentes tiempos de extracción. No se evidencian investigaciones similares con análisis de ANOVA, respecto al índice de refracción, para corroborar el grado de desviación con este estudio

#### **4.3 DENSIDAD DE ACEITE ESENCIAL DE FRUTOS DE MOLLE**

En la tabla 11 y 12, las fracciones de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 90,3°C (AE) y 81,3°C (AF) varían en los valores de densidad (g/ml) durante los diferentes tiempos de extracción, los cuales nos permite afirmar que hay variación en los componentes a cada 30 min de extracción de los frutos de molle. Por otro lado, la

densidad varia (0,8272 – 0,8588) tanto a la extracción a 90,3 y 81,3 °C., pero la variación de densidad es ligera.

**Tabla 11**

*Densidad (20°C) de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 90,3°C*

<b>Código</b>	<b>Tiempo de extracción (min)</b>	<b>Densidad (g/ml) (20°C)</b>
AE1	30	0,8272 ± 0,0001
AE2	60	0,8338 ± 0,0001
AE3	120	0,8518 ± 0,0001
AE4	180	0,8535 ± 0,0001
AE5	240	0,8552 ± 0,0002
AE6	300	0,8566 ± 0,0002
AE7	360	0,8588 ± 0,0001

**Tabla 12**

*Densidad (20°C) de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 81,3°C*

<b>Código</b>	<b>Tiempo de extracción (min)</b>	<b>Densidad (g/ml) (20°)</b>
AF1	30	0,8277 ± 0,0001
AF2	60	0,8457 ± 0,0001
AF3	120	0,8473 ± 0,0002
AF4	180	0,8526 ± 0,0001
AF5	240	0,8563 ± 0,0001
AF6	300	0,8573 ± 0,0001
AF7	360	0,8656 ± 0,0001

Los valores de densidad que se tiene en la tabla 11 y 12 coinciden con los valores reportados por (LLanos, 2012) que oscila entre 0,832 a 0,847.

La densidad del aceite esencial de frutos de *Schinus molle* varían en la literatura (0,85–0,88 g·mL<sup>-1</sup>) (Do Prado et al., 2019) (Herrera-Calderon et al., 2022) (LLanos, 2012). En este trabajo de investigación la densidad obtenida de las fracciones de aceite esencial en la extracción por arrastre de con vapor (0,8272- 0,8656) se encuentran en el rango de lo reportado. La variación de densidad que se observa en las distintas fracciones se debe a composición química (monoterpenos, sesquiterpenos, presencia de compuestos oxigenados) del aceite esencial en cada fracción de extracción.

#### 4.3.1. Análisis de varianza (ANOVA) de índice de refracción de aceite esencial de frutos de molle, extraídos a 90,3 y 81,3 °C, a diferentes tiempos

Para evaluar la densidad de aceite esencial de semillas de molle extraídos a 90,3°C y 81,3 °C, se llevó a cabo el análisis de varianza (tabla 13) con los datos de la tabla 11 y 12.

**Tabla 13**

*Análisis de varianza (ANOVA) de densidad (g/ml) de aceite esencial de frutos de molle, extraídos a 90,3 y 81,3 °C, a diferentes tiempos.*

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p
<b>Modelo</b>	0,0015	7	0,0002	68,09	< 0,0001 significativo
A-TEMPERATURA	4,018E-06	1	4,018E-06	1,25	0,3070
B-TIEMPO	0,0015	6	0,0003	79,23	< 0,0001
<b>Residual</b>	0,0000	6	3,225E-06		
<b>Cor Total</b>	0,0016	13			

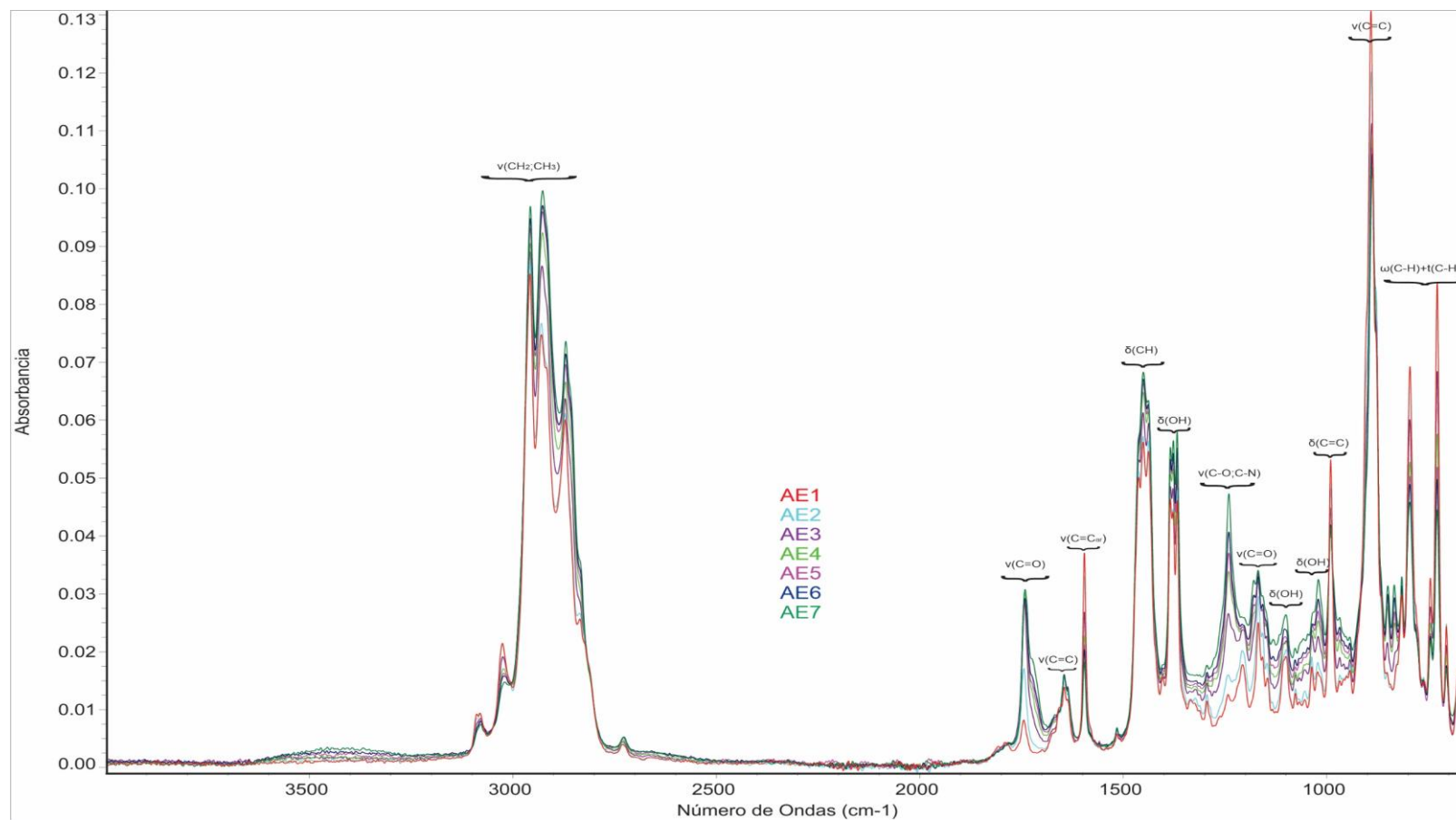
Los resultados de ANOVA muestran que el valor p (0,3070) que corresponde al factor temperatura (B) es superior a 0,05, lo que indican que no es significativos, es decir que los valores de densidad del aceite esencial de semillas de molle extraídos a 90,3°C y 81,3 °C son parecidos, poca variabilidad, por tanto, las temperaturas de extracción no influyen considerablemente en la densidad de aceite esencial a diferentes tiempos de extracción. No se evidencian investigaciones similares con análisis de ANOVA, respecto a la densidad, para corroborar el grado de desviación con este estudio.

#### 4.4 ESPECTROS INFRARROJO DE ACEITE ESENCIAL DE FRUTOS DE MOLLE.

En la figura 15 y 16, podemos observar los espectros infrarrojos con sus diferentes picos o bandas espectrales de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 90,3 °C y 81,3 °C respectivamente (más detalle Anexo 01 y 02), los picos o bandas espectrales se muestran entre intensas, medias y bajas, desde 600 a 4000  $\text{cm}^{-1}$ . Para determinar los grupos funcionales presentes en el aceite esencial de frutos de molle se recurrió a la tabla de espectros de infrarrojos por intervalo de frecuencia, del siguiente enlace. [https://chem.libretexts.org/Ancillary\\_Materials/Reference/Reference\\_Tables/Spectroscopic\\_Reference\\_Tables/Infrared\\_Spectroscopy\\_Absorption\\_Table](https://chem.libretexts.org/Ancillary_Materials/Reference/Reference_Tables/Spectroscopic_Reference_Tables/Infrared_Spectroscopy_Absorption_Table) .

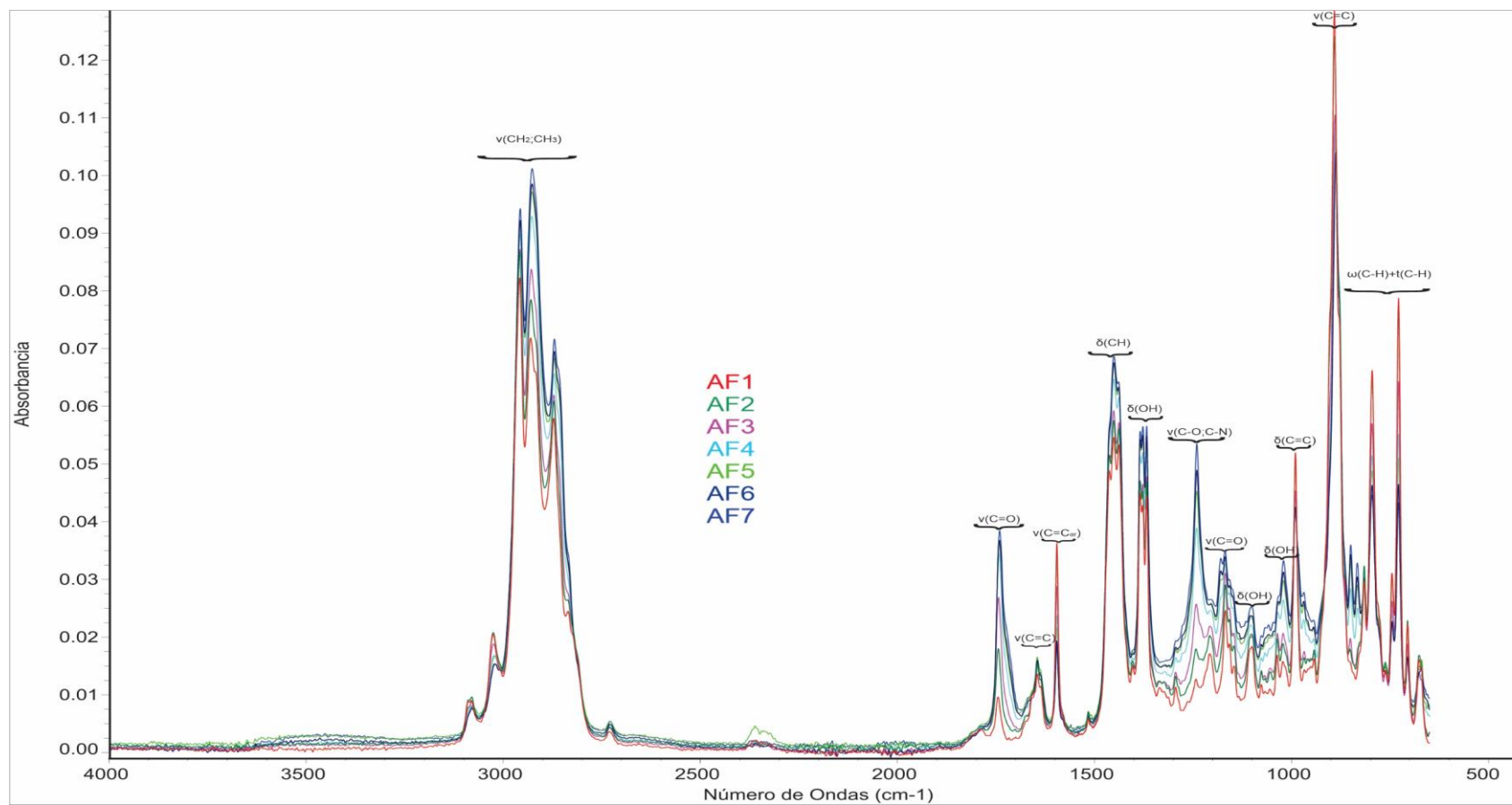
**Figura 15**

*Picos espectrales IRTF - ATR de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 90,3 °C, (AE), a diferentes tiempos (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min)*



**Figura 16**

*Picos espectrales IRTF - ATR de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 81,3 °C, (AF) a diferentes tiempos (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min)*



En esta tabla se indican los intervalos de frecuencia, la apariencia de la vibración y las absorciones de los grupos funcionales en la espectroscopia IR.

Realizado las comparaciones entre los picos espectrales de la figura 15 y 16 y la tabla de espectros de infrarrojos por intervalo de frecuencia, se tiene los siguientes grupos funcionales que se muestran en la tabla 14. Las bandas espectrales obtenidas de aceite esencial de frutos de molle coinciden con los resultados obtenidos por (Solis Quispe, 2018) del aceite esencial de *Schinus molle*.

#### 4.4.1 Grupos funcionales de aceite esencial de frutos de molle.

Tal como puede observarse en la tabla 14, se ha detectado 13 grupos funcionales en el aceite esencial de frutos de molle: alcanos, alquenos, éster, alqueno conjugado, alqueno cíclico, alcoholes, éteres, aminas. Sin embargo, comparando con tabla de espectros de infrarrojos por intervalo de frecuencia la coincidencia es solo con 8 grupos funcionales, en relación a la apariencia de los picos, 5 grupos funcionales no coinciden en cuanto a la apariencia de las bandas espectrales.

**Tabla 14**

*Grupos funcionales de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 90.3°C y 81.3 °C.*

Intervalo de frecuencia experimental Absorción (cm-1)	Apariencia	Intervalo de frecuencia referencial Absorción (cm-1)	Apariencia	Grupos Funcionales	Clase de compuesto
3100 - 2850	Media, fuerte	3100 - 2840	Media	$\nu(\text{CH}_2) + \nu(\text{CH}_3)$	Alqueno, alcano
1780 - 1730	Bajo	1750 - 1735	Fuerte	$\nu(\text{C}=\text{O})$	Ester
1670 - 1620	Bajo	1650 - 1600	Media	$\nu(\text{C}=\text{C})$	Alqueno conjugado
1630 - 1570	Media	1650 - 1566	Media	$\nu(\text{C}=\text{Car})$	Alqueno ciclico
1500 - 1400	Media	1450 - 1350	Media	$\delta(\text{C}-\text{H})$	Alcano
1400 - 1350	Media	1420 - 1330	Media	$\delta(\text{O}-\text{H})$	Alcohol
1300 - 1200	Bajo	1342 - 1200	Media, fuerte	$\nu(\text{C}-\text{O}) + \nu(\text{C}-\text{Nar})$	Eteres, aminas aromaticas
1200 - 1130	Bajo	1210 - 1163	Fuerte	$\nu(\text{C}=\text{O})$	Ester
1120 - 1080	Bajo	1124-1087	Fuerte	$\nu(\text{O}-\text{H})$	alcohol secundario
1080 - 1020	Bajo	1085-1050	Fuerte	$\nu(\text{O}-\text{H})$	alcohol primario
1000 - 980	Fuerte	995-985	Fuerte	$\delta(\text{C}=\text{C})$	Alqueno monosustituido
950 - 850	Fuerte	895-885	Fuerte	$\nu(\text{C}=\text{C})$	Alqueno
830 - 700	Fuerte	830 - 730	Fuerte	$\omega(\text{C}-\text{H}) + \tau(\text{C}-\text{H})$	Alcanos

v: Estiramiento/tensión;  $\delta$ : Flexión;  $\omega$ : Flexión fuera de plano (movimiento);  $\tau$ : Flexión fuera de plano (torsión)

Las bandas espectrales aceite esencial de frutos de molle extraídas a 90,3 (Figura 15) y 81,3°C (Figura 16), tienen los mismos grupos funcionales descritos en la tabla 14, es decir los aceites esenciales extraídas a diferentes temperaturas tiene los 13 grupos funcionales.

Las principales bandas espectrales identificadas, que corresponden a los grupos funcionales, en el aceite esencial de frutos de molle corresponden al estiramiento de grupos alqueno y alcano ( $\nu(\text{CH}_2) + \nu(\text{CH}_3)$ ), 3100–2850  $\text{cm}^{-1}$ ); estiramiento del grupo éster ( $\nu(\text{C}=\text{O})$ ), 1780 – 1730  $\text{cm}^{-1}$ ); estiramiento del grupo alqueno conjugado ( $\nu(\text{C}=\text{C})$ ), 1670 – 1620  $\text{cm}^{-1}$ ); estiramiento del grupo alqueno cíclico ( $\nu(\text{C}=\text{Car})$ ), 1630 – 1570  $\text{cm}^{-1}$ ); flexión de grupo alcano ( $\delta(\text{C}-\text{H})$ ), 1500 – 1400  $\text{cm}^{-1}$ ); flexión de grupo alcohol ( $\delta(\text{O}-\text{H})$ ), 1400– 1350  $\text{cm}^{-1}$ ); estiramiento del grupo éter y aminas aromáticas  $\nu(\text{C}-\text{O}) + \nu(\text{C}-\text{Nar})$ , 1300 – 1200  $\text{cm}^{-1}$ ); estiramiento del grupo éster ( $\nu(\text{C}=\text{O})$ ), 1200 – 1130  $\text{cm}^{-1}$ ); estiramiento del grupo alcohol secundario ( $\nu(\text{O}-\text{H})$ ), 1120– 1080  $\text{cm}^{-1}$ ), estiramiento del grupo alcohol primario ( $\nu(\text{O}-\text{H})$ ), 1180– 1020  $\text{cm}^{-1}$ ); flexión de grupo alcano ( $\delta(\text{C}-\text{H})$ ), 1000 – 980  $\text{cm}^{-1}$ ); estiramiento de alqueno ( $\nu(\text{C}=\text{C})$ ), 950–850  $\text{cm}^{-1}$ ) y flexión y torción de alcanos ( $\omega(\text{C}-\text{H}) + \tau(\text{C}-\text{H})$ ), 830 – 700  $\text{cm}^{-1}$ .

Estas bandas espectrales corresponden a terpenos saturados e insaturados con grupos funcionales carbonilo y alcohol y no se observa presencia de compuestos aromáticos.

Tanto en la figura 15 y 16, puede observarse que las bandas espectrales, que representan a los grupos funcionales, se ubican en las mismas regiones tanto a diferentes tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min) y temperaturas de extracción 90,3 y 81,3 °C. Por otro lado, podemos observar que existe variación en las absorbancias de los distintos grupos funcionales a los tiempos y temperaturas evaluadas, dándonos a considerar que hay variación en la concentración de los compuestos que contienen los grupos funcionales, el cual se analiza en las siguientes líneas.

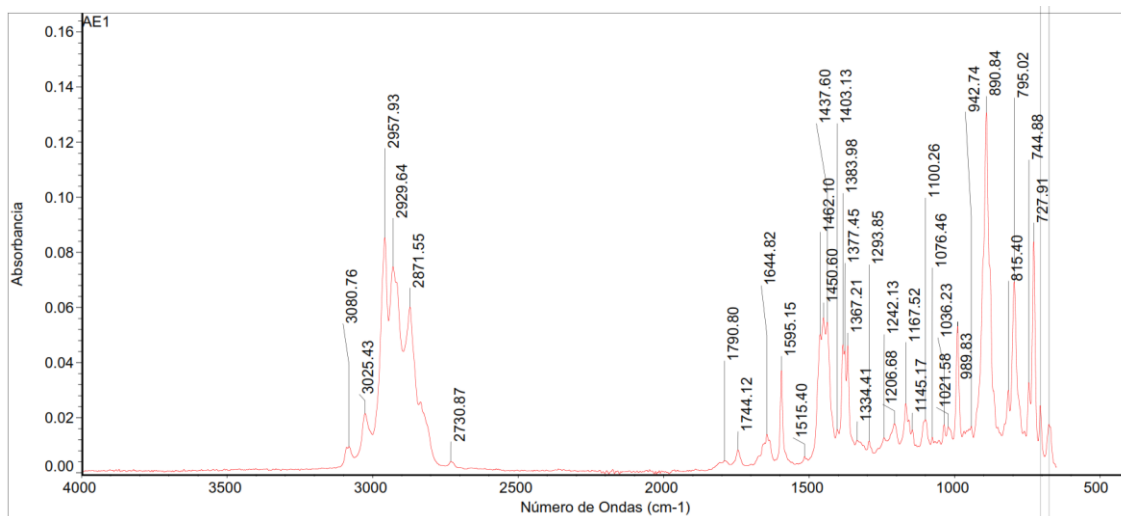
Dos Santos Cavalcanti et al. (2015) demostraron descenso de las concentraciones de hidrocarburos terpénicos e incrementos en sesquiterpenos oxigenados en la extracción a diferentes tiempos. Esto demuestra que en la extracción de aceites esenciales de molle hay incremento y descenso en la concentración de ciertos compuestos.

#### 4.4.2 Absorbancias de los distintos grupos funcionales aceite esencial de frutos de molle

Para poder evaluar las variaciones de las absorbancias de los distintos grupos funcionales se generaron graficas de picos de espectros IRTF – ATR de las distintas condiciones de extracción AE y AF. (fig 17, fig 18 y anexos N° 01 y 02)

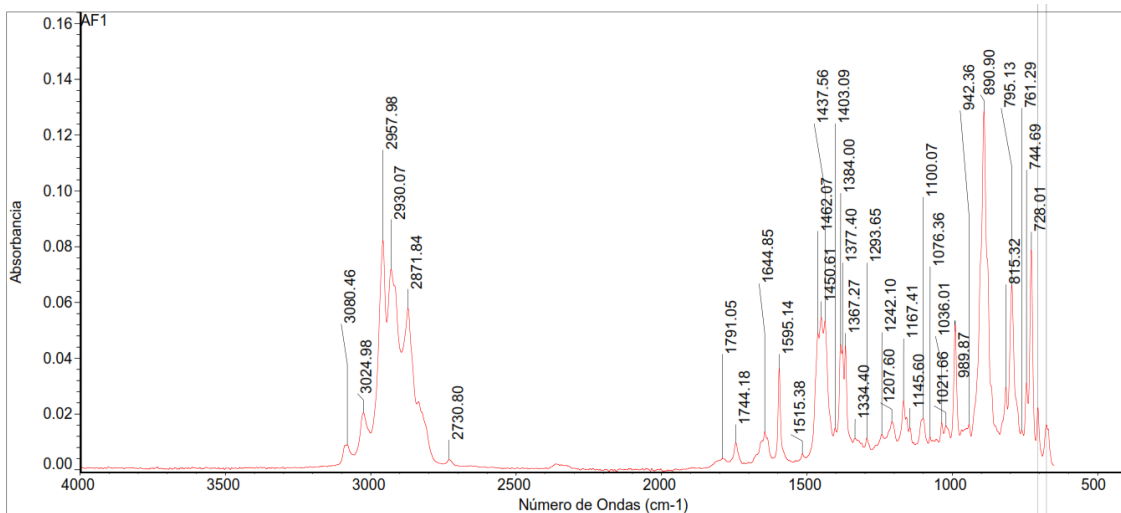
#### Figura 17

*Picos de espectros IRTF - ATR de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 30 min (AE1), A 90,3 °C*



#### Figura 18

*Picos de espectros IRTF - ATR de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 30 min (AF1), A 81,3 °C*



Tanto en la figura 17 y 18 podemos observar que los diferentes picos o bandas espectrales, que representan los grupos funcionales, tienen la posición en el número de onda correspondiente, asimismo la intensidad del mismo expresado en absorbancia.

#### 4.4.3 Comportamiento de los grupos funcionales en los diferentes tiempos de extracción.

Para evaluar el comportamiento de los grupos funcionales en los diferentes tiempos (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min) de extracción se ha generado las tablas (Tabla N° 15 y 16) a partir de los picos de espectros y absorbancia (véase anexo 1 y 2)

**Tabla 15**

*Absorbancia de grupos funcionales durante el tiempo de extracción a 90.3 °C (AE)*

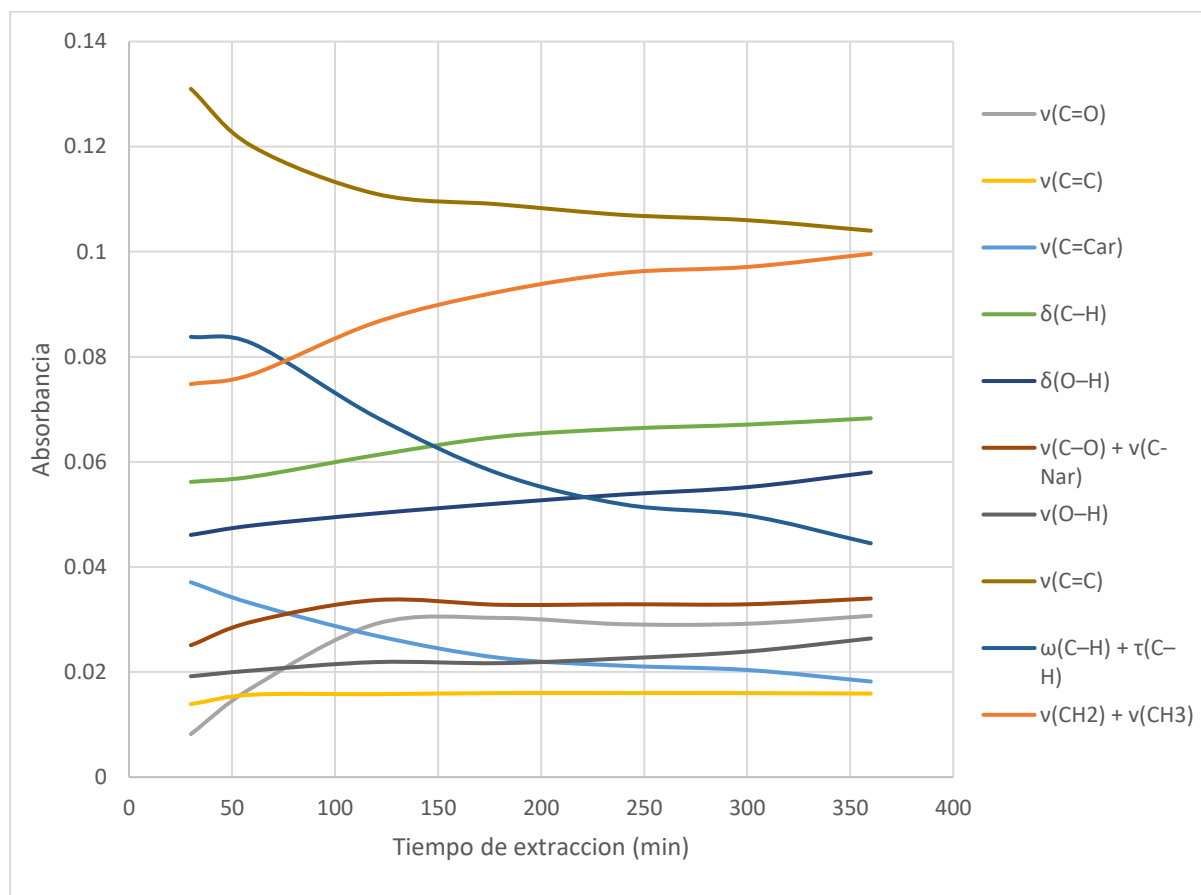
Rango de numero de onda (cm-1)	Grupo Funcional	Numero de onda (cm-1)	Tiempo de extracción (min)						
			30	60	120	180	240	300	360
3100 - 2850	v(CH2) + v(CH3)	2929.64	0.0748	0.0767	0.0866	0.0924	0.096	0.0971	0.0996
1780 - 1730	v(C=O)	1744.12	0.0082	0.0171	0.0292	0.0303	0.0291	0.0292	0.0307
1670 - 1620	v(C=C)	1644.82	0.0139	0.0157	0.0158	0.016	0.016	0.016	0.0159
1630 - 1570	v(C=Car)	1595.15	0.0371	0.033	0.0269	0.0227	0.0212	0.0204	0.0182
1500 - 1400	δ(C-H)	1450.6	0.0562	0.0572	0.0613	0.0648	0.0663	0.0671	0.0683
1400 - 1350	δ(O-H)	1367.21	0.0461	0.0479	0.0502	0.0521	0.0538	0.0552	0.0580
1300 - 1200	v(C-O) + v(C-Nar)	1167.52	0.0251	0.0296	0.0337	0.0328	0.0329	0.0329	0.0340
1120 - 1080	v(O-H)	1100.26	0.0192	0.0203	0.0219	0.0217	0.0226	0.0239	0.0264
950 - 850	v(C=C)	890.84	0.1310	0.120	0.1110	0.109	0.107	0.106	0.104
830 - 700	ω(C-H) + τ(C-H)	727.91	0.0838	0.0825	0.0685	0.0577	0.0519	0.0498	0.0445

En la tabla 15 se tiene las absorbancias de los picos de principales grupos funcionales del aceite esencial de frutos de molle a 90,3 °C. Allí podemos observar que en algunos casos se incrementa, disminuye y se mantiene constante los valores de las absorbancias, para un mejor análisis se realizan las gráficas a continuación.

En la figura 19, podemos observar las tendencias de comportamiento de grupos funcionales del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min) a 90,3 °C. Tal es así que hay una tendencia al descenso en sus absorbancias, consecuentemente en sus concentraciones de los grupos alquenos cíclico (v(C=Car)), 1630 - 1570 cm<sup>-1</sup>, alqueno (v(C=C)), 950-850 cm<sup>-1</sup>, y alcanos (ω(C-H) + τ(C-H)), 830 - 700 cm<sup>-1</sup> tienen.

**Figura 19**

*Comportamiento de grupos funcionales del aceite esencial de frutos de molle durante el tiempo de extracción a 90,3 °C*



Por otro lado, hay un incremento en sus absorbancias, también en sus concentraciones de los grupos alqueno y alcano ( $v(\text{CH}_2) + v(\text{CH}_3)$ ,  $3100\text{--}2850\text{ cm}^{-1}$ ), grupo alcano ( $\delta(\text{C-H})$ ), grupo éster ( $v(\text{C=O})$ ),  $1780 - 1730\text{ cm}^{-1}$ ,  $1500 - 1400\text{ cm}^{-1}$ ), grupo alcohol ( $\delta(\text{O-H})$ ,  $1400 - 1350\text{ cm}^{-1}$ ), grupo éter y aminas aromáticas  $v(\text{C-O}) + v(\text{C-Nar})$ ,  $1300 - 1200\text{ cm}^{-1}$ ). Finalmente los que mantienen tendencias inalterables son los grupos alqueno conjugado ( $v(\text{C=C})$ ),  $1670 - 1620\text{ cm}^{-1}$ ) y alcohol primario ( $v(\text{O-H})$ ,  $1180 - 1020\text{ cm}^{-1}$ ) se mantienen estables.

De igual forma se tiene la tabla 16, donde se tiene los datos extraídos de los barridos espectrales de los aceites esenciales a  $81,3\text{ °C}$ .

En la tabla N° 16 se tiene las absorbancias de los picos de principales grupos funcionales del aceite esencial de frutos de molle a  $81,3\text{ °C}$ . Al igual que la tabla 15, podemos observar que en algunos casos se incrementa, disminuye y se mantiene constante los valores de las absorbancias.

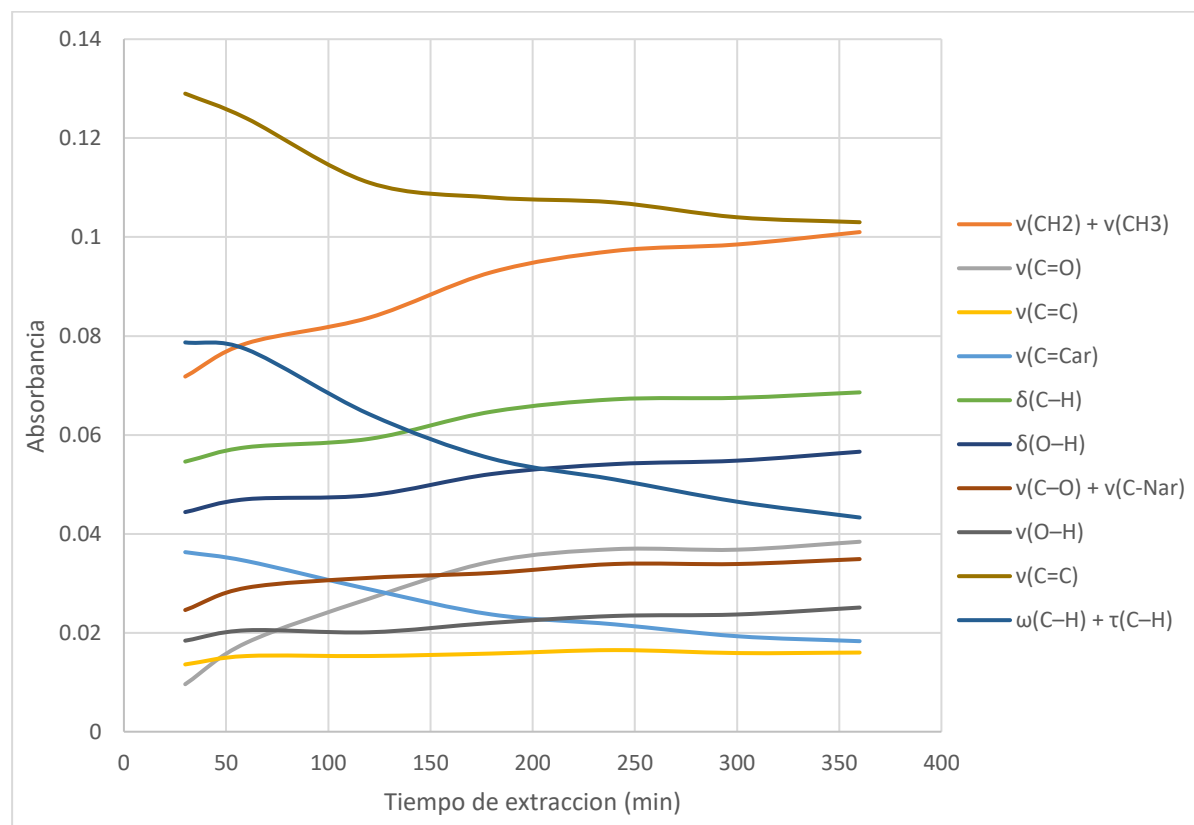
**Tabla 16**

*Absorbancia de grupos funcionales durante el tiempo de extracción a 81,3 °C (AF)*

Rango de número de onda (cm-1)	Grupo Funcional	Número de onda (cm-1)	Tiempo de extracción (min)						
			30	60	120	180	240	300	360
3100 - 2850	v(CH2) + v(CH3)	2930.07	0.0718	0.0785	0.0837	0.0929	0.0972	0.0985	0.101
1780 - 1730	v(C=O)	1744.18	0.0096	0.018	0.0269	0.0344	0.0369	0.0368	0.0384
1670 - 1620	v(C=C)	1644.85	0.0136	0.0153	0.0153	0.0158	0.0165	0.0159	0.016
1630 - 1570	v(C=Car)	1595.14	0.0363	0.0345	0.0288	0.0237	0.0217	0.0193	0.0183
1500 - 1400	δ(C-H)	1450.61	0.0546	0.0575	0.0592	0.0647	0.0672	0.0675	0.0686
1400 - 1350	δ(O-H)	1367.27	0.0444	0.047	0.0478	0.0521	0.0541	0.0548	0.0566
1300 - 1200	v(C-O) + v(C-Nar)	1167.54	0.0246	0.0291	0.0311	0.0321	0.0339	0.0339	0.0349
1120 - 1080	v(O-H)	1100.07	0.0184	0.0205	0.0201	0.022	0.0234	0.0237	0.0251
950 - 850	v(C=C)	890.9	0.129	0.124	0.111	0.108	0.107	0.104	0.103
830 - 700	ω(C-H) + τ(C-H)	728.01	0.0787	0.0773	0.0642	0.0552	0.051	0.0465	0.0433

**Figura 20**

*Comportamiento de grupos funcionales del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 81,3 °C*



En la figura 20, podemos observar las tendencias de comportamiento de grupos funcionales del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min) a 81,3 °C.

Como en el caso de los aceites extraídos a 90,3 °C, en la figura 20 se observa que los aceites esenciales extraídos a 81,3 °C, poseen bandas espectrales con tendencia al descenso en sus absorbancias, consecuentemente en sus concentraciones de los grupos alquenos cíclico ( $\nu(\text{C}=\text{Car})$ ), 1630 –1570  $\text{cm}^{-1}$ ), alqueno ( $\nu(\text{C}=\text{C})$ ), 950–850  $\text{cm}^{-1}$ ), y alcanos ( $\omega(\text{C}-\text{H}) + \tau(\text{C}-\text{H})$ ), 830 – 700  $\text{cm}^{-1}$ .

Por otro lado, los aceites esenciales extraídos a 81,3 °C también muestran un incremento en sus absorbancias de las bandas espectrales de los grupos alqueno y alcano ( $\nu(\text{CH}_2) + \nu(\text{CH}_3)$ ), 3100–2850  $\text{cm}^{-1}$ ), grupo alcano ( $\delta(\text{C}-\text{H})$ ), grupo éster ( $\nu(\text{C}=\text{O})$ ), 1780 – 1730  $\text{cm}^{-1}$ ), 1500 – 1400  $\text{cm}^{-1}$ ), grupo alcohol ( $\delta(\text{O}-\text{H})$ ), 1400– 1350  $\text{cm}^{-1}$ ), grupo éter y aminas aromáticas  $\nu(\text{C}-\text{O}) + \nu(\text{C}-\text{Nar})$ , 1300 – 1200  $\text{cm}^{-1}$ ). Asimismo se mantienen tendencias constantes en los grupos alqueno conjugado ( $\nu(\text{C}=\text{C})$ ), 1670 – 1620  $\text{cm}^{-1}$ ) y alcohol primario ( $\nu(\text{O}-\text{H})$ ), 1180– 1020  $\text{cm}^{-1}$ ) se mantienen estables.

Los grupos funcionales determinados en el aceite esencial extraídos a 80.3 °C y 81.3 °C son similares a los encontrados por (Solis Quispe, 2018)

Marongiu et al. (2004) demostró la disminución del contenido de monoterpenos y aumento del contenido de sesquiterpenos en la extracción de componentes de semillas de *Schinus*, Asimismo esta disminución e incremento concuerda con lo reportado por Barbosa et al. (2007).

#### **4.4.4 Análisis de varianza (ANOVA) de grupos funcionales extraídos a 90,3 y 81,3 °C.**

##### **Grupos alqueno y alcano ( $\nu(\text{CH}_2) + \nu(\text{CH}_3)$ )**

En la tabla 17 podemos notar que el valor p, respecto a la temperatura de extracción es 0,1519, superior a 0,05, por lo que no es significativo, es decir que no hay diferencia significativa en las absorbancias grupos alqueno y alcano ( $\nu(\text{CH}_2) + \nu(\text{CH}_3)$ ) extraídas a 90,3 y 81,3 °C. Sin embargo, el valor p, respecto al tiempo de extracción es 0,0001, inferior a 0,05, es decir que hay diferencias significativas en las absorbancias grupos

alqueno y alcano ( $\nu(\text{CH}_2) + \nu(\text{CH}_3)$ ) extraídas a diferentes tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).

**Tabla 17**

*Análisis de varianza de grupos alqueno y alcano ( $\nu(\text{CH}_2) + \nu(\text{CH}_3)$ ) en la extracción entre 90.3 (AE) y 81.3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).*

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p
<b>Modelo</b>	0,0028	7	0,0004	254,88	< 0,0001 significativo
A-TEMPERATURA	0,0000	1	0,0000	23,32	0,0029
B-TIEMPO	0,0027	6	0,0005	293,48	< 0,0001
<b>Residual</b>	9,304E-06	6	1,551E-06		
<b>Cor Total</b>	0,0028	13			

El ANOVA de otros grupos funcionales evaluados (Anexo 02) muestran las mismas características de la tabla 17, tal es así, el *alqueno cíclico*  $\nu(\text{C}=\text{Car})$  muestra el valor p, respecto a la temperatura de extracción de 0,3379, superior a 0,05; el grupo *alcano*  $\delta(\text{C}-\text{H})$  muestra el valor de p respecto a la temperatura de extracción es 0,5474, superior a 0,05; El grupo de *eteres y aminas aromáticas*  $\nu(\text{C}-\text{O}) + \nu(\text{C}-\text{Nar})$  muestra el valor de p respecto a la temperatura de extracción es 0,700, superior a 0,05; El grupo *Alcohol*  $\delta(\text{O}-\text{H})$  muestra el valor de p respecto a la temperatura de extracción es 0,3015, superior a 0,05; El grupo *alqueno conjugado*  $\nu(\text{C}=\text{C})$  muestra el valor de p respecto a la temperatura de extracción es 0,7261, superior a 0,05. Por tanto, en estos grupos funcionales mencionados anteriormente no hay diferencia significativa en las absorbancias respecto a la temperatura de extracción 90,3 y 81,3 °C. Asimismo en los grupos funcionales antes mencionados el valor p es 0,0001, respecto al tiempo de extracción, y es inferior a 0,05, por tanto que hay diferencias significativas en las absorbancias grupos funcionales extraídas a diferentes tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).

### **Grupo Ester $\nu(\text{C}=\text{O})$**

En la tabla 18 podemos notar que el valor p, respecto a la temperatura de extracción es 0,0431, inferior a 0.05, por lo que es significativo, es decir que hay diferencia significativa en las absorbancias grupos éster ( $\nu(\text{C}=\text{O})$ ) extraídas a 90,3 y 81,3 °C. Asimismo, el valor p, respecto al tiempo de extracción es 0,0006, inferior a 0,05, es decir que hay diferencias significativas en las absorbancias del grupo éster ( $\nu(\text{C}=\text{O})$ ) extraídas a

diferentes tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min). Características similares se presentan el grupo Alcohol  $\delta(\text{O-H})$  y alquenos  $\omega(\text{C-H}) + \tau(\text{C-H})$ .

**Tabla 18**

*Análisis de varianza de grupo ester  $\nu(\text{C=O})$  en la extracción entre 90,3 (AE) y 81,3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).*

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p
<b>Model</b>	0,0012	7	0,0002	21,25	0,0008 significativo
A-TEMPERATURA	0,0001	1	0,0001	6,53	0,0431
B-TIEMPO	0,0012	6	0,0002	23,71	0,0006
<b>Residual</b>	0,0000	6	8,089E-06		
<b>Cor Total</b>	0,0013	13			

#### **Grupo alqueno conjugado $\nu(\text{C=C})$**

En la tabla 19 podemos notar que el valor p, respecto a la temperatura de extracción es 0,3798, superior a 0,05, por lo que no es significativo, es decir que no hay diferencia significativa en las absorbancias grupos alqueno conjugado  $\nu(\text{C=C})$  extraídas a 90,3 y 81,3 °C. Asimismo, el valor p, respecto al tiempo de extracción es 0,4578, superior a 0,05, es decir que no hay diferencias significativas en las absorbancias grupos alqueno conjugado extraídas a diferentes tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).

**Tabla 19**

*Análisis de varianza de grupo alqueno conjugado  $\nu(\text{C=C})$  en la extracción entre 90,3 (AE) y 81,3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).*

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p
<b>Model</b>	0,0003	7	0,0000	1,07	0,4769 not significant
A-TEMPERATURA	0,0000	1	0,0000	0,8984	0,3798
B-TIEMPO	0,0002	6	0,0000	1,09	0,4578
<b>Residual</b>	0,0002	6	0,0000		
<b>Cor Total</b>	0,0005	13			

#### **4.5 IDENTIFICACIÓN DE COMPONENTES MAYORITARIOS EVALUANDO LAS BANDAS ESPECTRALES IRTF-ATR.**

Varios estudios han identificado  $\alpha$ -felandreno,  $\alpha$ -pineno, limoneno y otros constituyentes de aceites esenciales, extraídas de distintas plantas aromáticas, utilizando sus bandas o picos espectrales del IRTF. Para identificar los compuestos presentes en el aceite esencial de frutos de molle, se utilizó los picos espectrales IRTF (Figura 15, Figura 16 y anexos 01, 02) en la región de la huella digital obtenida para cada tiempo de extracción

y se validó con datos de la literatura como (Rodrigues et al., 2021), (Schulz & Baranska, 2007) y se sistematizó en la Tabla 20. De las comparaciones de los grupos funcionales obtenidos y la literatura se ha determinado que los componentes principales del aceite esencial de frutos de molle son:  $\alpha$ -felandreno, limoneno,  $\beta$ -Cariofileno,  $\alpha$ -pineno,

**Tabla 20**

*Numero de onda (cm<sup>-1</sup>), típico de compuestos mayoritarios en el aceite esencial de frutos de molle.*

Numero de onda (cm <sup>-1</sup> ) típico de cada compuesto					
Rango de numero de onda (cm <sup>-1</sup> )	Grupo Funcional	$\alpha$ - Felandreno	Limoneno	$\beta$ -Cariofileno	$\beta$ -Pineno
3100 - 2850	$\nu(\text{CH}_2) + \nu(\text{CH}_3)$				
1780 - 1730	$\nu(\text{C}=\text{O})$				
1670 - 1620	$\nu(\text{C}=\text{C})$		1644	1635	1640
1630 - 1570	$\nu(\text{C}=\text{Car})$				
1500 – 1400	$\delta(\text{C}-\text{H})$	1462	1435	1447	
1400 – 1350	$\delta(\text{O}-\text{H})$	1364/1382	1378	1369	
1300 – 1200	$\nu(\text{C}-\text{O}) + \nu(\text{C}-\text{Nar})$				
1120 - 1080	$\nu(\text{O}-\text{H})$				
950 – 850	$\nu(\text{C}=\text{C})$		886	887	873
830 – 700	$\omega(\text{C}-\text{H}) + \tau(\text{C}-\text{H})$	721/786/808	800		

#### 4.5.1. Evaluación de componentes mayoritarios, identificados con IRTF-ATR en el proceso de extracción de aceite esencial a 90,3 °C

Para evaluar de la tendencia de concentración de los componentes principales del aceite esencial de frutos de molle durante la extracción a 90,3 °C se evaluó la absorbancia de los picos espectrales IRTF-ATR característicos (Tabla 21) de  $\alpha$ -felandreno, anexo N°04 de limoneno,  $\beta$ -Cariofileno,  $\alpha$ -pineno.

En la tabla 21, se tienen los picos espectrales característicos (IRTF-ATR) y sus respectivas absorbancias del  $\alpha$ -Felandreno, extraídas a 90,3 °C. En este cuadro se puede observar que existe variación descendente y ascendente de las absorbancias. Los números de onda 721 y 786 (cm<sup>-1</sup>) muestran en sus absorbancias un descenso, consecuentemente un descenso en su concentración, el cual se verificará con los resultados de GC-MS. Asimismo en el anexo N°04 se tiene la absorbancia de los picos espectrales de Limoneno,  $\beta$ -Cariofileno,  $\beta$  -Pineno extraídos a 90,3 °C.

**Tabla 21**

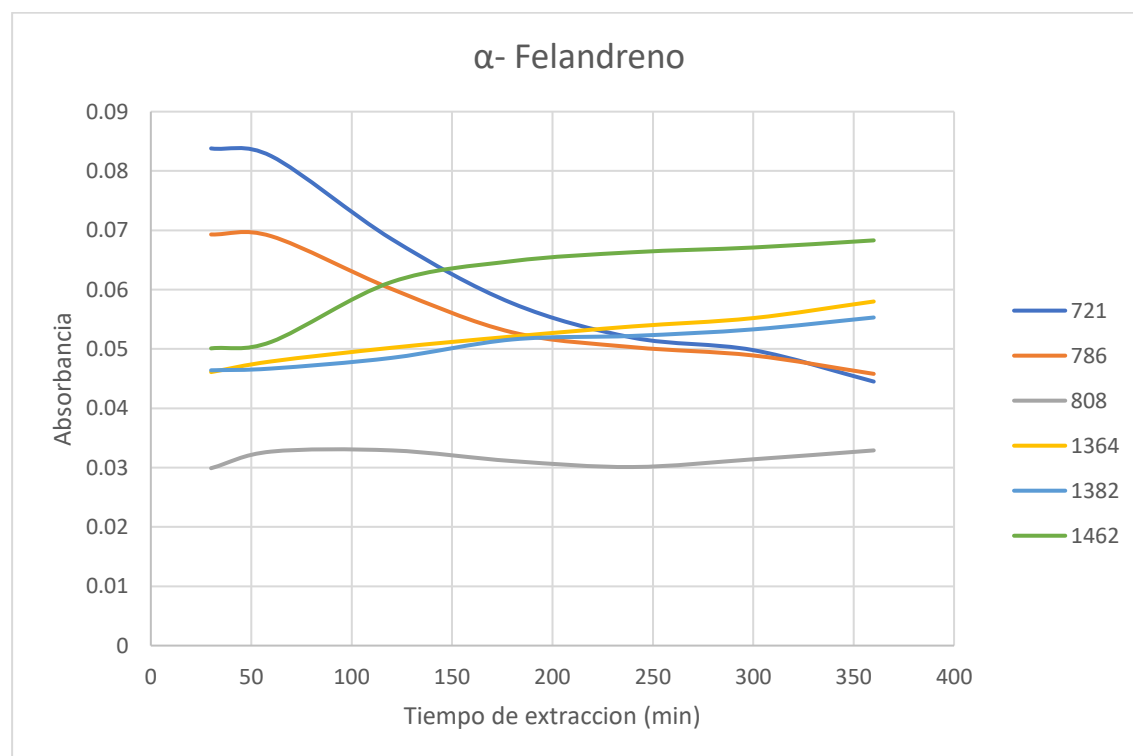
*Absorbancia de los picos espectrales correspondientes a  $\alpha$ - Felandreno durante la extracción de aceite esencial a 90,3 °C (AE)*

Número de onda (cm <sup>-1</sup> )	Tiempo de extracción (min)						
	30 AE1	60 AE2	120 AE3	180 AE4	240 AE5	300 AE6	360 AE7
721	0,0838	0,0825	0,0685	0,0577	0,0519	0,0498	0,0445
786	0,0693	0,069	0,0601	0,0528	0,0503	0,0489	0,0458
808	0,0299	0,0327	0,0329	0,0311	0,0301	0,0314	0,0329
1364	0,0461	0,0479	0,0502	0,0521	0,0538	0,0552	0,058
1382	0,0464	0,0467	0,0485	0,0516	0,0522	0,0533	0,0553
1462	0,0501	0,0512	0,0613	0,0648	0,0663	0,0671	0,0683

En la figura 21, se puede observar la tendencia de las absorbancias del  $\alpha$ - Felandreno, los números de onda 721 y 786 (cm<sup>-1</sup>) muestran un descenso en sus absorbancias durante los tiempos de extracción (de 0 a 360 min), consecuentemente un descenso en su concentración, el cual se verificará con los resultados de GC-MS.

**Figura 21**

*Comportamiento de  $\alpha$ - Felandreno del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 90,3 °C*



Los otros números de onda 808, 1364, 1382 y 1462 ( $\text{cm}^{-1}$ ) presentan un ligero incremento de las absorbancias. Los números de onda que presentan mayor inflexión son 721 y 786 ( $\text{cm}^{-1}$ ), el cual nos permite considerar que estos números de onda representan definitivamente al  $\alpha$ - Felandreno.

Asimismo, se tiene la tendencia del comportamiento (véase anexo N°04) de Limoneno,  $\beta$ -Cariofileno,  $\beta$  -Pineno extraídos a 90,3 °C.

En el caso del **Limoneno** se puede observar que los números de onda 800 y 886 ( $\text{cm}^{-1}$ ) muestran un descenso en sus absorbancias durante los tiempos de extracción (de 0 a 360 min) consecuentemente un descenso en su concentración, estos números de onda son los que presentan mayor inflexión, por lo que representa el comportamiento del Limoneno. Los otros números de onda 1378, 1435, y 1644 ( $\text{cm}^{-1}$ ) presentan un ligero incremento de las absorbancias.

En el caso del  **$\beta$ -Cariofileno** se puede observar que el número de onda 887 ( $\text{cm}^{-1}$ ) muestran un descenso en sus absorbancias durante los tiempos de extracción (de 0 a 360 min). Los otros números de onda 1369, 1447 ( $\text{cm}^{-1}$ ) presentan un incremento de las absorbancias, estos 2 números de onda presentan inflexión similar, por lo que se consideraría un comportamiento de incremento del  $\beta$ -Cariofileno durante la extracción, el cual se verificara con los resultados de GC-MS.

En el caso del  **$\beta$  - Pineno** se puede observar que el número de onda 873 ( $\text{cm}^{-1}$ ) muestran un descenso en sus absorbancias durante los tiempos de extracción (de 0 a 360 min), asimismo es el que presenta mayor inflexión, consecuentemente un descenso en su concentración, por lo que se consideraría un comportamiento de descenso  $\beta$  - Pineno durante la extracción, el cual se verificara con los resultados de GC-MS.

#### **4.5.2. Evaluación de componentes mayoritarios, identificados con IRTF-ATR en el proceso de extracción de aceite esencial a 81,3 °C**

Para evaluar de la tendencia de concentración de los componentes principales del aceite esencial de frutos de molle durante la extracción a 81,3 °C se evaluó la absorbancia de los picos espectrales IRTF-ATR característicos (Tabla 22) de  $\alpha$ - felandreno, anexo N°05 de limoneno,  $\beta$ -Cariofileno,  $\alpha$ -pineno.

**Tabla 22**

*Comportamiento de  $\alpha$ - Felandreno durante la extracción de aceite esencial a 81,3 °C (AF)*

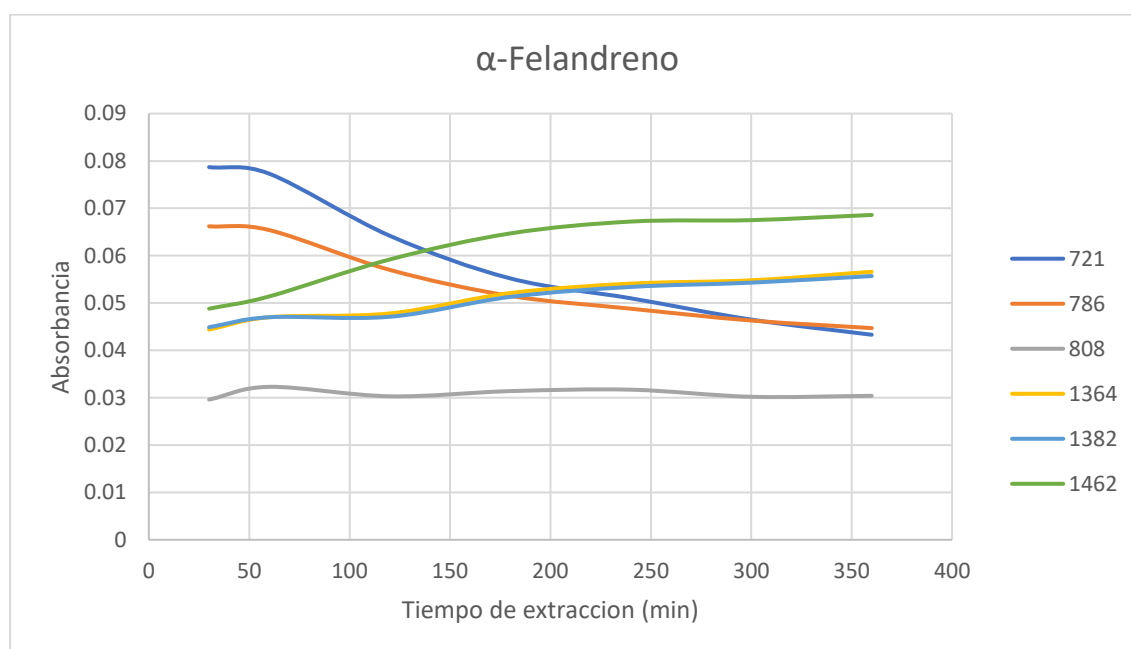
Número de onda (cm <sup>-1</sup> )	Tiempo de extracción (min)						
	30 AF1	60 AF2	120 AF3	180 AF4	240 AF5	300 AF6	360 AF7
721	0,0787	0,0773	0,0642	0,0552	0,051	0,0465	0,0433
786	0,0662	0,0654	0,057	0,0515	0,0488	0,0463	0,0447
808	0,0296	0,0323	0,0303	0,0314	0,0317	0,0302	0,0304
1364	0,0444	0,047	0,0478	0,0521	0,0541	0,0548	0,0566
1382	0,0449	0,047	0,0471	0,0513	0,0534	0,0543	0,0557
1462	0,0488	0,0514	0,0592	0,0647	0,0672	0,0675	0,0686

En la tabla 22, se tienen los picos espectrales característicos (IRTF-ATR) y sus respectivas absorbancias del  $\alpha$ - Felandreno, extraídas a 81,3 °C. En este cuadro se puede observar que existe variación descendente y ascendente de las absorbancias. Los números de onda 721 y 786 (cm<sup>-1</sup>) muestran en sus absorbancias un descenso, consecuentemente un descenso en su concentración, el cual se verificará con los resultados de GC-MS. Además, se puede observar que los números de onda son los mismos tanto en los aceites esenciales extraídos a 81,3 y 90,3 °C. Asimismo en el anexo N°05 se tiene la absorbancia de los picos espectrales de Limoneno,  $\beta$ -Cariofileno,  $\beta$  - Pineno extraídos a 81,3 °C.

En la figura 22, se puede observar la tendencia de las absorbancias del  $\alpha$ - Felandreno, los números de onda 721 y 786 (cm<sup>-1</sup>) muestran un descenso en sus absorbancias durante los tiempos de extracción (de 0 a 360 min), consecuentemente un descenso en su concentración, el cual se verificará con los resultados de GC-MS. Los otros números de onda 808, 1364, 1382 y 1462 (cm<sup>-1</sup>) presentan un ligero incremento de las absorbancias. Los números de onda que presentan mayor inflexión son 721 y 786 (cm<sup>-1</sup>), el cual nos permite considerar que estos números de onda representan definitivamente al  $\alpha$ - Felandreno. Asimismo, puede notarse que los números de onda de los aceites esenciales extraídos a 90,3 y 81,3 °C son los mismo, pero con distinta absorbancia, para el cual es necesario realizar un análisis de varianza.

**Figura 22**

*Comportamiento de  $\alpha$ -Felandreno del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 81,3 °C*



Asimismo, se tiene la tendencia del comportamiento (véase anexo N°05) de Limoneno,  $\beta$ -Cariofileno,  $\beta$ -Pino extraídos a 81,3 °C.

En el caso del **Limoneno** se puede observar que los números de onda 800 y 886 ( $\text{cm}^{-1}$ ) muestran un descenso en sus absorbancias durante los tiempos de extracción (de 0 a 360 min) consecuentemente un descenso en su concentración, estos números de onda son los que presentan mayor inflexión, por lo que representa el comportamiento del Limoneno durante la extracción a 81,3 °C. Los otros números de onda 1378, 1435, y 1644 ( $\text{cm}^{-1}$ ) presentan un ligero incremento de las absorbancias, y tienen mínima inflexión en su tendencia.

En el caso del  **$\beta$ -Cariofileno** se puede observar que el número de onda 887 ( $\text{cm}^{-1}$ ) muestran un descenso en sus absorbancias durante los tiempos de extracción (de 0 a 360 min) y a 81,3 °C. Los otros números de onda 1369, 1447 ( $\text{cm}^{-1}$ ), que son mayoritarios, presentan un incremento de las absorbancias, estos 2 números de onda presentan inflexión similar, por lo que se consideraría un comportamiento de incremento del  $\beta$ -Cariofileno durante la extracción, el cual se verificara con los resultados de GC-MS.

En el caso del  **$\beta$  - Pineno** se puede observar que el número de onda 873 ( $\text{cm}^{-1}$ ) muestran un descenso en sus absorbancias durante los tiempos de extracción (de 0 a 360 min) y 81,3°C, asimismo es el que presenta mayor inflexión, consecuentemente un descenso en su concentración, por lo que se consideraría un comportamiento de descenso  $\beta$  - Pineno durante la extracción a 81,3°C, el cual se verificara con los resultados de GC-MS.

#### 4.5.3. Análisis de varianza (ANOVA) de compuestos mayoritarios (IRTF-ATR) extraídos a 90,3 y 81,3 °C

##### $\alpha$ - Felandreno

En la tabla 23 podemos notar que el valor p, respecto a la temperatura de extracción es 0,7102, superior a 0,05, por lo que no es significativo, es decir que no hay diferencia significativa en las absorbancias de  $\alpha$ - Felandreno extraídas a 90,3 y 81,3 °C. Sin embargo, el valor p, respecto al tiempo de extracción es 0,0001, inferior a 0,05, es decir que hay diferencias significativas en las absorbancias  $\alpha$ - Felandreno extraídas a diferentes tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).

**Tabla 23**

*Análisis de varianza de grupos  $\alpha$ - Felandreno en la extracción entre 90,3 (AE) y 81,3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).*

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p
<b>Modelo</b>	0,0013	7	0,0002	88,31	< 0,0001 significativo
A-TEMPERATURA	3,150E-07	1	3,150E-07	0,1519	0,7102
B-TIEMPO	0,0013	6	0,0002	103,01	< 0,0001
<b>Residual</b>	0,0000	6	2,073E-06		
<b>Cor Total</b>	0,0013	13			

El ANOVA de otros principales componentes de aceite esencial de molle evaluados (Anexo 06) muestran ciertas características, tal es así, **el limoneno** muestra el valor p, respecto a la temperatura de extracción de 0,0237, inferior a 0,05 y respecto al tiempo 0,0237. El  **$\beta$ -Cariofileno** muestra el valor de p respecto a la temperatura de extracción es 0,7261, superior a 0,05; y respecto al tiempo 0,0001. El  **$\beta$ -Pineno** muestra el valor de p respecto a la temperatura de extracción es 0,7261, superior a 0,05; y respecto al tiempo 0,0001.

#### 4.6 IDENTIFICACIÓN Y PORCENTAJE DE LOS COMPONENTES MAYORITARIOS EN ACEITE ESENCIAL DE FRUTOS DE *SCHINUS MOLLE* MEDIANTE GS-MS

Para la identificación y determinar el porcentaje de los componentes mayoritarios del aceite esencial de frutos de molle se recurrió al análisis mediante cromatografía de gases acoplado a masa (GC-MS) en el equipo Agilent Technologies, modelo 7890B, con el software Agilent Mass Hunter Unknowns Analysis 10. En los resultados se muestran el tiempo de retención ( $R_t$ ), índice aritmético de retención (AI) y % Área de para cada compuesto los compuestos determinados se muestran a continuación:

**Tabla 24**

*Identificación y porcentaje de componentes mayoritarios de aceite esencial de frutos molle.*

Peak N.	Compound	$R_t$	AI	%
1	$\alpha$ -Pinoeno	7.4920	-	1.415
2	Canfeno	7.8883	946	0.162
3	Sabineno	8.6017	969	1.463
4	L- $\beta$ -Pinoeno	8.7036	-	0.208
5	$\beta$ -Pinoeno	9.1338	974	13.907
6	$\alpha$ -Felandreno	9.5528	1002	29.615
7	<i>p</i> -Cimeno	10.1076	1020	3.079
8	D-Limoneno	10.2775	1024	20.997
9	$\gamma$ -Terpineno	11.1720	1054	0.244
10	Terpinoleno	12.0779	1086	0.280
11	Caprilato de metilo	13.1423	1123	1.972
12	Terpinen-4-ol	14.8068	1174	0.209
13	Éster metílico del ácido 5-metil-heptano carboxílico	15.2484	-	0.196
14	Citronelato de metilo	17.2299	1257	0.304
15	L- $\alpha$ - acetato de bornilo	18.0112	1284	0.461
16	$\alpha$ -Cubebeno	19.8795	1348	0.388
17	Copaeno	20.6382	1373	0.317
18	$\beta$ -Elemeno	21.0572	1389	0.668
19	$\beta$ -Maaleno	21.5893	1381	1.802
20	Cariofileno	21.8611	1417	5.997
21	Aromadendreno	22.3820	1439	0.409
22	cis,cis,cis-1,1,4,8- tetrametilo -4,7,10-cicoundecatrieno	22.7670	-	1.157
23	Aloaromadendreno	22.9594	1455	0.517
24	$\gamma$ - Muroleno	23.3218	1500	0.388
25	$\beta$ -Copaen-4 $\alpha$ -ol	23.4803	1590	1.270
26	$\beta$ -Selineno	23.6275	1649	0.206
27	Biciclogermacreno	23.8879	1500	4.849
28	$\gamma$ -Cadineno	24.3069	1513	0.664
29	$\beta$ -Cadineno	24.5220	-	2.264
30	Espatuleno	25.9261	1577	0.789
31	óxido de cariofileno	26.0846	1582	0.140
32	Tau-Cadinol	27.4547	1638	0.165
33	Shyobunol	28.7003	1688	0.243
34	Tau- acetato de cadinol	30.7724	-	0.280
	<b>Total</b>			89.78

Los componentes determinados en la tabla 24, coinciden con los reportados por (Gamarra, 2010), (Solis Quispe, 2018), (Guerra-Boone et al., 2013), (Viturro et al., 2010)

#### 4.6.1 Evaluación de componentes mayoritarios, identificados con GC-MS en el proceso de extracción de aceite esencial a 90,3 y 81,3 °C

Para evaluar de la tendencia de concentración de los componentes principales del aceite esencial de frutos de molle durante la extracción a 90,3 y 81,3 °C, se evaluó las concentraciones de componentes mayoritarios resultado de análisis GC-MS (Anexo N°08). Se ha considerado como componentes principales aquellos que tienen concentración mayor al 1,00% durante la extracción, los cuales son:  $\alpha$ -Pinenos, Sabineno,  $\beta$ -Pinenos,  $\alpha$ -Felandreno, Limoneno, Metil caprilato, Cariofileno, Bicyclogermaceno,  $\beta$ -Cadineno.

**Tabla 25**

*Porcentaje de componentes mayoritarios de aceite esencial de frutos molle durante la extracción de aceite esencial a 90.3 °C (AE)*

Compuesto	Porcentaje %				
	AE30 AE0.5	AE60 AE1	AE120 AE2	AE240 AE4	AE360 AE6
$\alpha$ -Pinenos	4,756	1,979	1,415	1,171	0,808
Sabineno	3,554	2,314	1,463	0,734	0,409
$\beta$ -Pinenos	23,437	19,526	13,907	8,567	6,44
$\alpha$ -Felandreno	40,366	38,96	29,615	17,348	12,243
Limoneno	22,045	26,154	20,997	11,445	8,774
Metil caprilato	0,461	1,493	1,972	0,999	0,686
Cariofileno	0,202	1,199	5,997	6,739	4,901
Bicyclogermaceno	0,353	0,621	4,849	9,81	13,564
$\beta$ -Cadineno	0,112	0,186	2,264	3,418	14,393

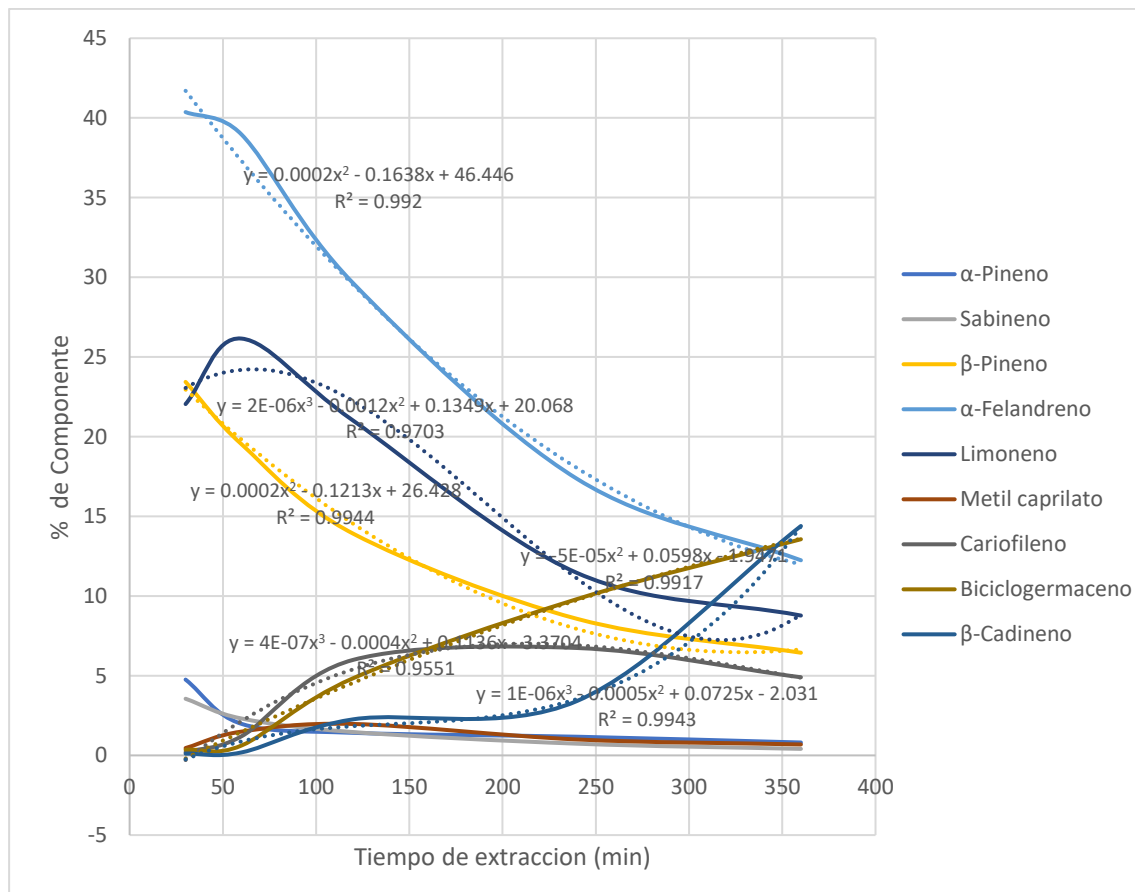
En la tabla 25 se tiene las concentraciones (%), obtenidas por GC-MC, de los principales componentes del aceite esencial de frutos de molle extraídas a 90,3 °C, a los 30(AE30), 60(AE60), 120(AE120), 240(AE240) y 360(AE360) min. Se puede observar que el componente mayoritario a los 30 min de extracción es el  $\alpha$ -Felandreno (40,366%), seguido de 23,437% ( $\beta$ -Pinenos) y Limoneno (22,045%) y estos disminuyen de concentración durante de extracción hasta 12,243%, 6,44%, 8,774% respectivamente a los 360 min. Por otro lado, se tiene a Cariofileno (0,202%), Bicyclogermaceno (0,353%),  $\beta$ -Cadineno (0,112%) que a los 30 min presentan baja concentración, pero incrementan

de concentración durante la extracción hasta 4,901%, 13,564%, 14,393% respectivamente a los 360 min.

Con los resultados (GC-MS) que se tiene en la tabla 25 podemos confirmar la presencia de los componentes mayoritarios identificados con el IRFT-ATR del aceite esencial de frutos de molle en la tabla 20 ( $\alpha$ - Felandreno, Limoneno,  $\beta$ -Cariofileno,  $\beta$  -Pineno). Asimismo, podemos notar la correlación entre las absorbancias del IRFT-ATR y las concentraciones encontradas en GC-MS, que nos confirma la disminución de la concentración de  $\alpha$ -Felandreno,  $\beta$ -Pineno y Limoneno durante la extracción de 30 a 240 min a 90,3 °C, y el incremento de la concentración de  **$\beta$ -Cariofileno**.

**Figura 23**

*Comportamiento de los componentes mayoritarios del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 90,3 °C (AE)*



En la figura 23 podemos observar que, a una temperatura de extracción de 90,3 °C, el  $\alpha$ -Felandreno,  $\beta$ -Pineno y Limoneno tiene un descenso en cuanto a su concentración (%), mientras que Cariofileno, bicylogermaceno,  $\beta$ -Cadineno tienen un incremento en

su concentración (%), los otros componentes tienen mínima variación durante el proceso de extracción.

En esta figura 23 podemos observar que las líneas de tendencia del  $\alpha$ -Felandreno,  $\beta$ -Pineno y Limoneno son polinómicas, tienen tendencia negativa en cuanto a la concentración y el valor R cuadrado es cercano a 1,00, donde se tiene un buen ajuste de la línea de tendencia respecto a las concentraciones de cada compuesto. También, en la figura 4.9 podemos encontrar las ecuaciones de tendencia para cada compuesto en estudio, para el  $\alpha$ -Felandreno se tiene  $y = 0,0002x^2 - 0,1638x + 46,446$ ;  $\beta$ -Pineno,  $y = 0,0002x^2 - 0,1213x + 26,428$ ; Limoneno,  $y = 2E-06x^3 - 0,0012x^2 + 0,1349x + 20,068$ , estas ecuaciones nos permiten predecir la concentración de estos compuestos en cualquier tiempo de extracción a 90,3°C.

Asimismo, en la fig 23 se observa que las líneas de tendencia del Cariofileno, Biciclogermaceno,  $\beta$ -Cadineno también son polinómicas, tienen tendencia positiva en cuanto a la concentración y el valor R cuadrado es cercano a 1,00, donde se tiene un buen ajuste de la línea de tendencia respecto a las concentraciones de cada compuesto en estudio, para el Cariofileno se tiene  $y = 4E-07x^3 - 0,0004x^2 + 0,1136x - 3,3704$ ; Biciclogermaceno,  $y = -5E-05x^2 + 0,0598x - 1,9471$ ;  $\beta$ -Cadineno,  $y = 1E-06x^3 - 0,0005x^2 + 0,0725x - 2,031$ , estas ecuaciones nos permiten predecir la concentración de estos compuestos en cualquier tiempo de extracción a 90, 3°C.

**Tabla 26**

*Concentración de componentes mayoritarios de aceite esencial de frutos molle durante la extracción de aceite esencial a 81,3 °C (AF)*

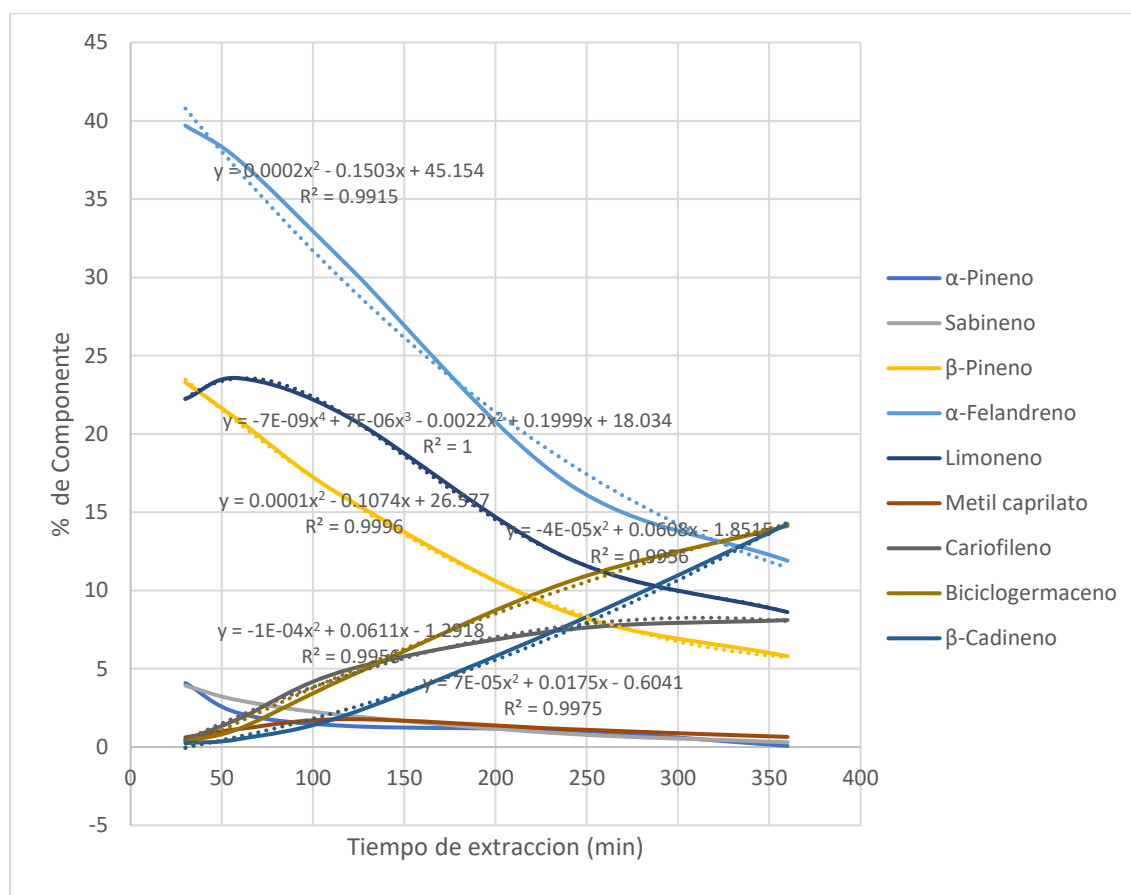
	AF30 AF0.5	AF60 AF1	AF120 AF2	AF240 AF4	AF360 AF6
<b>Compuesto</b>					
$\alpha$ -Pineno	4,092	2,146	1,342	1,065	0,075
Sabineno	3,928	2,971	1,995	0,845	0,309
$\beta$ -Pineno	23,299	20,808	15,761	8,584	5,8
$\alpha$ -Felandreno	39,700	37,432	30,634	16,825	11,901
Limoneno	22,241	23,555	21,029	12,042	8,621
Metil caprilato	0,621	1,162	1,784	1,145	0,648
Cariofileno	0,451	1,842	4,967	7,517	8,112
Biciclogermaceno	0,381	1,205	4,524	10,562	14,129
$\beta$ -Cadineno	0,252	0,523	2,116	7,797	14,236

En la tabla N° 26 se tiene las concentraciones, obtenidas por GC-MC, de los principales componentes del aceite esencial de frutos de molle extraídas a 81,3 °C, a los 30, 60, 120, 240 y 360 min. Se puede observar que el componente mayoritario a los 30 min de

extracción es el  $\alpha$ -Felandreno (39,700%), seguido de 23,229% ( $\beta$ -Pineno) y Limoneno (22,241%) y estos disminuyen de concentración durante de extracción hasta 11,901%, 5,80%, 8,621%, a los 240 min, respectivamente. Por otro lado, se tiene a Cariofileno (0,451%), Bicyclgermaceno (0,381%),  $\beta$ -Cadineno (0,252%) que a los 30 min presentan baja concentración, pero incrementan de concentración durante la extracción, de 240 min, hasta 8,112%, 14,236%, 14,236% respectivamente. Con los resultados (GC-MS) que se tiene en la tabla 26 podemos confirmar la presencia de los componentes mayoritarios identificados con el IRFT-ATR del aceite esencial de frutos de molle en la tabla 20 ( $\alpha$ - Felandreno, Limoneno,  $\beta$ -Cariofileno,  $\beta$  -Pineno).

### Figura 24

*Comportamiento de los componentes mayoritarios del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 81,3 °C (AF)*



Asimismo, podemos notar la correlación entre las absorbancias del IRFT-ATR y las concentraciones encontradas en GC-MS, que nos confirma la disminución de la concentración de  $\alpha$ -Felandreno,  $\beta$ -Pineno y Limoneno durante la extracción de 30 a 240 min a 81,3 °C, y el incremento de la concentración de  **$\beta$ -Cariofileno**.

En la figura 24 podemos observar que, a una temperatura de extracción de 81,3 °C, el  $\alpha$ -Felandreno,  $\beta$ -Pineno y Limoneno tiene un descenso en cuanto a su concentración (%), mientras que Cariofileno, biciclogermaceno,  $\beta$ -Cadineno tienen un incremento en su concentración (%), los otros componentes tienen mínima variación durante el proceso de extracción. La tendencia en las concentraciones es similar a la extracción de 90,3 °C

En esta figura 24 podemos observar que las líneas de tendencia del  $\alpha$ -Felandreno,  $\beta$ -Pineno y Limoneno son polinómicas, tienen tendencia negativa en cuanto a la concentración y el valor R cuadrado es cercano a 1,00, donde se tiene un buen ajuste de la línea de tendencia respecto a las concentraciones de cada compuesto. También, en la figura 22 podemos encontrar las ecuaciones de tendencia para cada compuesto en estudio, para el  $\alpha$ -Felandreno se tiene  $y = 0,0002x^2 - 0,1503x + 45,154$ ;  $\beta$ -Pineno,  $y = 0,0001x^2 - 0,1074x + 26,577$ ; Limoneno,  $y = -7E-09x^4 + -7E-06x^3 - 0,0022x^2 + 0,1999x + 18,034$ , estas ecuaciones nos permiten predecir la concentración de estos compuestos en cualquier tiempo de extracción a 81,3 °C.

Asimismo, en la fig 24 se observa que las líneas de tendencia del Cariofileno, Biciclogermaceno,  $\beta$ -Cadineno también son polinómicas, tienen tendencia positiva en cuanto a la concentración y el valor R cuadrado es cercano a 1,00, donde se tiene un buen ajuste de la línea de tendencia respecto a las concentraciones de cada compuesto en estudio, para el Cariofileno se tiene  $y = -1E-04x^2 + 0,0611x - 1,2918$ ; Biciclogermaceno,  $y = -4E-05x^2 + 0,0608x - 1,8515$ ;  $\beta$ -Cadineno,  $y = 7E-05x^2 + 0,0175x - 0,6041$ , estas ecuaciones nos permiten predecir la concentración de estos compuestos en cualquier tiempo de extracción a 81, 3°C.

Marongiu et al. (2004) demostró que durante la extracción con CO<sub>2</sub> supercrítico de frutos de Schinus molle el  $\alpha$ -felandreno es el dominante en la primera hora de extracción ( $\approx 34,5$  %), pero su proporción disminuye drásticamente a  $\approx 13,7$  % en la tercera hora de extracción, lo que indica que se extrae pronto y luego se va agotando a medida que avanza la extracción. También el limoneno ( $\approx 21$  %) se comporta de forma similar, su concentración disminuye a medida que continúa la extracción, en consonancia con la rápida eliminación de los monoterpenos de hidrocarburos en la primera hora.

#### **4.6.2 Actividades biológicas, aplicaciones farmacéuticas y alimentarias de aceites esenciales ricos en alfa-felandreno.**

El aceite esencial de molle extraído los primeros 120 min es rico en alfa-felandreno,  $\beta$ -Pineno, Limoneno, por lo que es necesario realizar un revisión de las Actividades biológicas, aplicaciones farmacéuticas y alimentarias de aceites esenciales ricos en alfa-felandreno. Aunque no se ha demostrado que sean directamente atribuibles al alfa-felandreno, estos resultados son un primer paso para formular hipótesis y proponer nuevos estudios similares sobre la molécula pura o concentrada.

##### **4.6.2.1 Actividad antimicrobiana**

Los aceites esenciales ricos en alfa-felandreno tienen propiedades potenciales como agentes antimicrobianos y conservantes de alimentos, y hay varias especies dentro del conocimiento etnofarmacológico que poseen esta molécula como uno de sus componentes principales. Gonzales et al. (2004 como se citó en Radice et al, (2022) estudiaron la actividad antimicrobiana del aceite esencial de *Schinus molle*, donde el alfa-felandreno, junto con el limoneno, fueron los componentes principales con alta actividad contra *Bacillus cereus*, una bacteria típica que produce toxinas en enfermedades gastrointestinales. Ozcan et al. (2006 como se citó en Radice et al,(2022) encontraron que el aceite esencial extraído del hinojo, que tenía alfa-felandreno como componente principal, en una concentración de 40 ppm, pero ineficaz a 10 ppm, inhibió completamente el crecimiento micelial de *Alternaria alternata*, un hongo bien conocido que causa manchas en las hojas y otras enfermedades en muchas especies diferentes de plantas. También tuvo diferentes grados de actividad fungistática dependiendo de las dosis. Sindhu et al, (2011) demostraron el potencial del AE de hojas de cúrcuma (que contiene 24,4% de alfa-felandreno) como bioconservante para el almacenamiento de especies, como maíz, maní y nueces, entre otras, mostrando 95,3% y 100% de inhibición de aflatoxinas al 1,0 y 1,5%, respectivamente. Do Rosario et al. (2014) estudiaron la actividad del aceite esencial de hojas de *S. molle*, con una concentración de alfa-felandreno del 25,9%, contra bacterias Gram+ y Gram- patógenas y hongos de deterioro de alimentos. Los mejores resultados se obtuvieron contra *Staphylococcus epidermidis* con una zona de inhibición de 11,3 mm, en comparación con 17,0 mm en el control positivo, Amoxicilina. En cuanto a su uso como conservante de alimentos, el aceite esencial mostró fuertes actividades contra *Aspergillus niger* y *Rhizopus stolonifera*. Un estudio ampliado de Elshafie et al. (2016) se centró en tres aceites esenciales diferentes (con alfa-felandreno dentro de los componentes principales) del

género *Schinus* en el control de fitopatógenos graves y patógenos humanos. Los resultados mostraron el mejor uso potencial contra el crecimiento micelial fúngico de *Colletotrichum acutatum* en una concentración de 250 a 1000 ppm, y fueron eficaces contra la mayoría de las bacterias probadas, mostrando mejores resultados en bacterias Gram+ que Gram-. Otro estudio con resultados óptimos en relación con las actividades antimicrobianas de un aceite esencial que contenía alfa-felandreno fue el de Ennigrou et al. (2018), que encontró actividades óptimas contra las bacterias Gram+ *Enterococcus faecium* y *Streptococcus agalactiae*. Cole et al.(2014), evaluó la actividad antimicrobiana de otra especie del mismo género, *Schinus terebinthifolius*, donde la composición del aceite esencial del fruto maduro presentó una concentración de 12.6% de alfa-felandreno. Cole et al. se enfocaron en cepas silvestres de bacterias de origen hospitalario, encontrando fuerte actividad del aceite contra *Corynebacterium* sp. y *Pseudomonas* sp., con una CMI de 3.55 µg/mL y 7.11 µg/mL, respectivamente. Salem et al. (2018) también enfocaron su estudio en esta especie donde su aceite, extraído de frutos maduros, presentó 32.8% de alfa-felandreno y mostró una CMI de 16.0 µg/mL y 32.0 µg/mL contra *S. aureus* y *P. aeruginosa*, respectivamente. Asimismo, Celaya et al. (2014) estudiaron los efectos del aceite esencial de *Schinus areira* contra *S. aureus*. Esta investigación estudió las propiedades antimicrobianas de diferentes variedades de la planta y encontró que el aceite esencial de hojas contenía la mayor cantidad de alfa-felandreno (30,9%) tenía una MIC óptima contra *S. aureus*, pero no era el mejor en comparación con las variedades que también contenían mayores concentraciones de limoneno, lo que sugiere que el efecto sinérgico de estas dos moléculas podría ser incluso más fuerte que los efectos separados.

#### **4.6.2.2 Efectos antitumorales**

Otra área de investigación importante que involucró a los aceites esenciales (AE) ricos en alfa-felandreno se refirió a sus actividades antitumorales. Bendaoud et al. (2010 como se citó en Radice et al.(2022)) estudiaron esta propiedad de los AE de dos especies que tienen altas concentraciones de esta molécula, *Schinus molle* y *Schinus terebinthifolius* (46,5% y 34,4%, respectivamente). Se probó la CI50 del AE para detener el crecimiento de células de cáncer de mama humano MCF-7. Usando AE de *S. terebinthifolius*, la CI50 fue de 47,0 µg/mL, mientras que fue de 54,0 µg/mL cuando se usó *S. molle*. Aboalhaja et al. (2019 como se citó en Radice et al.(2022) encontró que el AE de *S. molle*, cuya concentración de alfa-felandreno oscilaba entre 40,8% y 55,9%, tiene una actividad antiproliferativa moderada en las líneas celulares de cáncer

colorrectal y de mama (HCT116, Caco-2 y MCF7, T47D, respectivamente) con una CI50 que oscila entre 21,0 y 65,0 µg/mL.

#### 4.6.2.3 Biopesticidas y actividad repelente

El uso de pesticidas naturales basados en AE representa un método cada vez más adecuado para la protección de cultivos y, en este sentido, los AE ricos en alfa-felandreno han mostrado resultados prometedores. Kiran et al. (2017 como se citó en Radice et al.(2022)) determinaron la toxicidad fumigante del AE de *Boswellia carterii* (alfa-felandreno 6,8%) contra escarabajos de leguminosas. Encontraron que 0,096 µL del AE por ml de aire fue efectivo contra *Callusbruchus chinensis* después de 24 h de tratamiento, obteniendo más del 90% de mortalidad. El AE de *B. carterii* fue, de igual modo, efectivo contra *C. maculatus*, ya que la CL 90 de los individuos fue incluso menor (0,075 µL/mL aire).

(2012) determinó que el alfa-felandreno era el componente principal (28,5 %) del aceite esencial obtenido de las hojas de *Schinus areira* y mostró la concentración más baja que causó la mortalidad de la mitad de las ninfas de *Metopolophium dirhadum* analizadas, una plaga conocida de los cultivos de cereales, en comparación con otros aceites esenciales. Además, la CL50 exacta para los adultos alados fue de 7,5 mg/ml a las 24 h después de la exposición por contacto.

El alfa-felandreno también se ha probado como repelente contra varios organismos. Por ejemplo, los extractos de acetato de etilo de las inflorescencias de *Myrica gale* (alfa-felandreno 25%) repelieron al 82,1% de los mosquitos (*Ae. aegypti*). (Salem et al., 2018)

#### 4.6.2.4 Conservante de alimentos

Otra aplicación potencial de los aceites esenciales ricos en alfa-felandreno es su uso como ingredientes conservantes naturales en alimentos. Hayouni et al. (2008) encontró resultados óptimos centrándose en las propiedades del aceite esencial de *Schinus molle*, con una concentración de alfa-felandreno del 35,9%, en la inhibición del crecimiento del género *Salmonella* en carne cruda. Olomedo et al. (2012) demostraron que el aceite esencial de *Schinus molle* con alfa-felandreno dentro de los componentes principales mejoraba la estabilidad de los cacahuets fritos salados al prevenir la oxidación de lípidos y el desarrollo de sabores rancios. En un estudio reciente. Tavakkoli et al. (2020) evaluaron los efectos de la inmersión en extracto de residuo de tomate (TRE) y el recubrimiento de goma arábiga (AG) enriquecido con aceite esencial de

eneldo (DAE), con alfa-felandreno como componente principal, sobre la extensión de la vida útil de filetes de trucha refrigerados, y encontraron que los tratamientos TRE 3%-AG-DEO 2% y TRE 6%-AG-DEO 2% tuvieron efectos significativos.

De la revisión efectuada es necesario la realización de ensayos con el aceite esencial extraídos en los 120 primeros minutos de extracción.

#### 4.6.3 Análisis de varianza (ANOVA) de compuestos mayoritarios identificados con GC-MS en el proceso de extracción de aceite esencial a 90.3 y 81.3 °C

##### $\alpha$ -Felandreno

En la tabla 27 podemos notar que el valor p, respecto a la variable temperatura de extracción es 0,3768, superior a 0,05, por lo que no es significativo, es decir que no hay diferencia significativa en las concentraciones de  $\alpha$ - Felandreno extraídas a 90,3 y 81,3 °C. Sin embargo, el valor p, respecto al tiempo de extracción es 0,0001, inferior a 0,05, es decir que hay diferencias significativas en las concentraciones de  $\alpha$ - Felandreno extraídas a diferentes tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).

**Tabla 27**

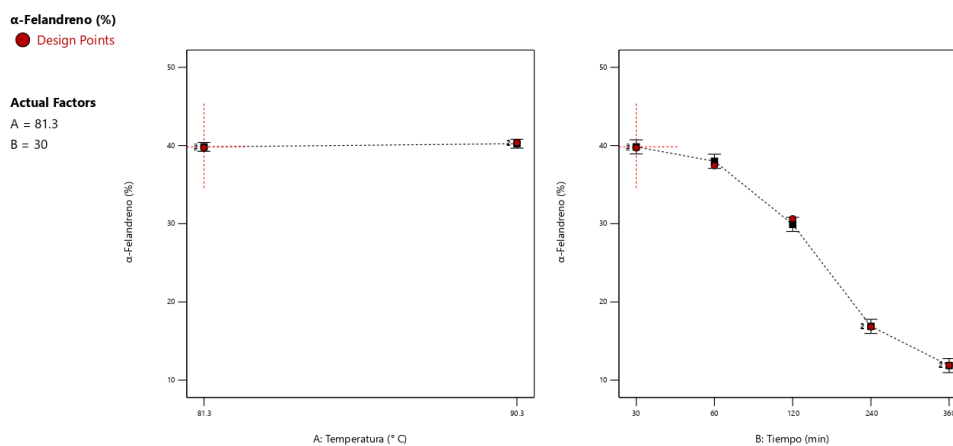
*Análisis de varianza de grupos  $\alpha$ - Felandreno en la extracción entre 90.3 (AE) y 81.3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).*

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p
<b>Modelo</b>	125008	5	250,02	592,65	< 0,0001 significativo
A-Temperatura	0,4162	1	0,4162	0,4162	0,3768
B-Tiempo	1249,67	4	312,42	740,57	< 0,0001
<b>Residual</b>	1,69	4	0,4219		
<b>Cor Total</b>	1251,77	9			

Este hecho se puede corroborar en la gráfica 25, la concentración de  $\alpha$ - Felandreno respecto a la temperatura de 81,3 y 90,3 °C no tiene variación sustancial, mientras que las concentraciones respecto al tiempo varían considerablemente.

## Figura 25

Comportamiento del  $\alpha$ -Felandreno del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 81,3 °C y 90,3 °C



El ANOVA de otros principales componentes ( $\alpha$ -Pinenos, Sabinenos,  $\beta$ -Pinenos, Limoneno, Metil caprilato, Cariofileno, Bicycloterpeno,  $\beta$ -Cadineno) de aceite esencial de molle evaluados (Anexo 07) presentan el valor p, superior a 0,05, por lo que no es significativo, es decir que no hay diferencia significativa en las concentraciones de las componentes principales extraídas a 90,3 y 81,3 °C. Sin embargo, el valor p, respecto al tiempo de extracción es inferior a 0,05, es decir que hay diferencias significativas en las concentraciones de las componentes principales extraídas a diferentes tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).

Dos Santos Cavalcanti et al. (2015) demostraron la existencia de un descenso en la concentración de  $\alpha$ -Pinenos,  $\beta$ -Pinenos, Sabinenos, Limoneno y otros compuestos durante en los diferentes tiempos de extracción (0,5 – 6 horas) de frutos de *Schinus molle*. Asimismo, demostraron un incremento en la concentración de  $\beta$ -Cariofileno, Germaceno Cadieno y otros en el mismo ensayo.

## CONCLUSIONES

En la evaluación del porcentaje de extracción del aceite esencial los frutos de molle, tanto a 90,3 °C y 81.3 °C, el mayor porcentaje de extracción es durante los primeros 120 min, casi el 88 %. Estos aceites extraídos le confieren efectos antitumorales, actividad biopesticida, repelente y conservación de alimentos demostrados en otras investigaciones, por la presencia de  $\alpha$ -Felandreno.

El índice de refracción y la densidad de los aceites esenciales de frutos de molle extraídos a diferentes tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min) muestran variabilidad en los resultados, el cual indica que los componentes del aceite no son iguales durante la extracción. Asimismo, estos indicadores fisicoquímicos muestran que el aceite esencial de molle está dentro de los parámetros exigidos.

Los grupos funcionales determinados, mediante FTIR-ATR, que predominan en el aceite esencial de frutos de molle durante la extracción son alqueno, alcano, éster, alqueno conjugado, alqueno cíclico, alcoholes, éter, éster, y están presentes durante los diferentes tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min) con incrementos y disminución de absorbancias, indicativo de variación de concentración de los componentes del aceite esencial de frutos de molle durante la extracción a 81,3 y 90,3 °C. La FTIR-ATR permitió determinar el  $\alpha$ -Felandreno Limoneno,  $\beta$ -Cariofileno,  $\beta$ -Pineno como componentes mayoritarios en el aceite esencial molle.

Los componentes volátiles mayoritarios del aceite esencial de frutos de molle, extraídos a 81,3 y 90,3 °C, identificados mediante GC-MS, son  $\alpha$ -Pineno, Sabineno,  $\beta$ -Pineno,  $\alpha$ -Felandreno, Limoneno, Metil caprilato, Cariofileno, Biciclogermaceno,  $\beta$ -Cadineno y no varían con las temperaturas de extracción. En los primeros 120 min de extracción predominan altos porcentajes de  $\alpha$ -Felandreno,  $\beta$ -Pineno y Limoneno y a partir de los 240 min de extracción predominan el Biciclogermaceno,  $\beta$ -Cadineno, Cariofileno y  $\alpha$ -Felandreno.

## **RECOMENDACIONES**

Con las alícuotas obtenidas a diferentes tiempos de extracción del aceite esencial de molle, realizar ensayos de actividad biopesticida, repelente y conservación, pruebas de actividad antiinflamatoria y pruebas de efectos antitumorales.

Utilizar los picos o bandas espectrales IRTF-ATR y los cromatogramas GC-MS obtenidos en la investigación y determinar los componentes en otros tiempos de extracción mediante métodos quimiométricos.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Alnawari, H., Demirci, B., Hanoğlu, A., Hanoğlu, D., Çalış, İ., & Başer, K. H. C. (2018). Chemical characterization of *Schinus molle* L. essential oils from North Cyprus. *NVEO - NATURAL VOLATILES & ESSENTIAL OILS Journal* | NVEO, 7-12.
- Angulo, O. E. (2015). *Extracción y caracterización de aceite esencial del Molle Schinus linneo por medio de fluidos supercríticos* [UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CENTRO DELPERÚ]. <http://repositorio.uncp.edu.pe/handle/20.500.12894/1198>
- Barbosa, L. C. A., Demuner, A. J., Clemente, A. D., Paula, V. F. de, & Ismail, F. M. D. (2007). Seasonal variation in the composition of volatile oils from *Schinus terebinthifolius* raddi. *Química Nova*, 30, 1959-1965. <https://doi.org/10.1590/S0100-40422007000800030>
- Bautista, V. (2018). *QUÍMICA INDUSTRIAL DEL MOLLE (Schinus molle L.)* (1a ed.). Editorial Autores de Argentina. <chrome-extension://efaidnbnmnibpcajpcgclclefindmkaj/https://www.victorbautistadiazquimico.com/wp-content/uploads/2020/01/quimica-industrial-molle-final.pdf>
- Belhoussaine, O., El Kourchi, C., Harhar, H., Bouyahya, A., El Yadini, A., Fozia, F., Alotaibi, A., Ullah, R., & Tabyaoui, M. (2022). Chemical Composition, Antioxidant, Insecticidal Activity, and Comparative Analysis of Essential Oils of Leaves and Fruits of *Schinus molle* and *Schinus terebinthifolius*. *Evidence-based Complementary and Alternative Medicine: eCAM*, 2022, 4288890. <https://doi.org/10.1155/2022/4288890>
- Belhoussaine, O., El Kourchi, C., Harhar, H., El Moudden, H., El Yadini, A., Ullah, R., Iqbal, Z., Goh, K. W., Goh, B. H., Bouyahya, A., & Tabyaoui, M. (2024). Phytochemical characterization and nutritional value of vegetable oils from ripe berries of *Schinus terebinthifolia* raddi and *Schinus molle* L., through extraction methods. *Food Chemistry*: X, 23, 101580. <https://doi.org/10.1016/j.fochx.2024.101580>

- Bendaoud, H., Romdhane, M., Souchard, J. P., Cazaux, S., & Bouajila, J. (2010). Chemical Composition and Anticancer and Antioxidant Activities of Schinus Molle L. and Schinus Terebinthifolius Raddi Berries Essential Oils. *Journal of Food Science*, 75(6), C466-C472. <https://doi.org/10.1111/j.1750-3841.2010.01711.x>
- Celaya, L. S., Alabrudzińska, M. H., Molina, A. C., Viturro, C. I., & Moreno, S. (2014). The inhibition of methicillin-resistant Staphylococcus aureus by essential oils isolated from leaves and fruits of Schinus areira depending on their chemical compositions. *Acta Biochimica Polonica*, 61(1), 41-46.
- Cole, E. R., Santos, R. B. dos, Lacerda Júnior, V., Martins, J. D. L., Greco, S. J., & Cunha Neto, A. (2014). Chemical composition of essential oil from ripe fruit of Schinus terebinthifolius Raddi and evaluation of its activity against wild strains of hospital origin. *Brazilian Journal of Microbiology*, 45, 821-828. <https://doi.org/10.1590/S1517-83822014000300009>
- Do Prado, A. c., Garces, H. g., Bagagli, E., Rall, V. I. m., Furlanetto, A., Fernandes Junior, A., & Furtado, F. b. (2019). Schinus molle essential oil as a potential source of bioactive compounds: Antifungal and antibacterial properties. *Journal of Applied Microbiology*, 126(2), 516-522. <https://doi.org/10.1111/jam.14157>
- Dos Santos Cavalcanti, A., de Souza Alves, M., da Silva, L. C. P., dos Santos Patrocínio, D., Sanches, M. N., Chaves, D. S. de A., & de Souza, M. A. A. (2015). Volatiles composition and extraction kinetics from Schinus terebinthifolius and Schinus molle leaves and fruit. *Revista Brasileira de Farmacognosia*, 25(4), 356-362. <https://doi.org/10.1016/j.bjp.2015.07.003>
- Elshafie, H. S., Ghanney, N., Mang, S. M., Ferchichi, A., & Camele, I. (2016). An In Vitro Attempt for Controlling Severe Phytopathogens and Human Pathogens Using Essential Oils from Mediterranean Plants of Genus Schinus. *Journal of Medicinal Food*, 19(3), 266-273. <https://doi.org/10.1089/jmf.2015.0093>

- Ennigrou, A., Casabianca, H., Vulliet, E., Hanchi, B., & Hosni, K. (2018). Assessing the fatty acid, essential oil composition, their radical scavenging and antibacterial activities of *Schinus terebinthifolius* Raddi leaves and twigs. *Journal of Food Science and Technology*, 55(4), 1582-1590. <https://doi.org/10.1007/s13197-018-3049-6>
- Feriani, A., Tir, M., Hamed, M., Sila, A., Nahdi, S., Alwasel, S., Harrath, A. H., & Tlili, N. (2020). Multidirectional insights on polysaccharides from *Schinus terebinthifolius* and *Schinus molle* fruits: Physicochemical and functional profiles, *in vitro* antioxidant, anti-genotoxicity, antidiabetic, and antihemolytic capacities, and *in vivo* anti-inflammatory and anti-nociceptive properties. *International Journal of Biological Macromolecules*, 165, 2576-2587. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2020.10.123>
- Gamarra, R. J. (2010). *OBTENCIÓN DE SUSTANCIAS AROMATICAS POR FRACCIONAMIENTO DEL ACEITE ESENCIAL DEL MOLLE (Schinus Molle L.) y USOS*. Universidad Nacional Santiago Antunez de Mayolo.
- Giuffrida, D., Martínez, N., Arrieta-Garay, Y., Fariña, L., Boido, E., & Dellacassa, E. (2020). Valorisation of *Schinus molle* fruit as a source of volatile compounds in foods as flavours and fragrances. *Food Research International*, 133, 109103. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2020.109103>
- Guerra-Boone, L., Alvarez-Román, R., Salazar-Aranda, R., Torres-Cirio, A., Rivas-Galindo, V. M., Waksman de Torres, N., González González, G. M., & Pérez-López, L. A. (2013). Chemical compositions and antimicrobial and antioxidant activities of the essential oils from *Magnolia grandiflora*, *Chrysactinia mexicana*, and *Schinus molle* found in northeast Mexico. *Natural Product Communications*, 8(1), 135-138.
- Hayouni, E. A., Chraief, I., Abedrabba, M., Bouix, M., Leveau, J.-Y., Mohammed, H., & Hamdi, M. (2008). Tunisian *Salvia officinalis* L. and *Schinus molle* L. essential

- oils: Their chemical compositions and their preservative effects against *Salmonella* inoculated in minced beef meat. *International Journal of Food Microbiology*, 125(3), 242-251. <https://doi.org/10.1016/j.ijfoodmicro.2008.04.005>
- Herrera-Calderon, O., Chavez, H., Enciso-Roca, E. C., Común-Ventura, P. W., Hañari-Quispe, R. D., Figueroa-Salvador, L., Loyola-Gonzales, E., Pari-Olarte, J. B., Aljarba, N. H., Alkahtani, S., & Batiha, G. E.-S. (2022). GC-MS Profile, Antioxidant Activity, and In Silico Study of the Essential Oil from *Schinus molle* L. Leaves in the Presence of Mosquito Juvenile Hormone-Binding Protein (mJHBP) from *Aedes aegypti*. *BioMed Research International*, 2022, 5601531. <https://doi.org/10.1155/2022/5601531>
- Lazo Ramos, A. S., & Tupayachi Holgado, O. (2015). *Extracción de Aceite Esencial de Molle (Schinus Molle L.) Aplicada en la Conservación de Papas Procesadas Como Sustituto de Bisulfito de Sodio” – Ucsm, 2015.* <https://repositorio.ucsm.edu.pe/handle/20.500.12920/3106>
- LLanos, S. K. (2012). *EXTRACCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE (Schinus molle L.)*. UNIVERSIDAD NACIONAL JORGE BASADRE GROHMANN.
- Marongiu, B., Porcedda, A. P. S., Casu, R., & Pierucci, P. (2004). Chemical composition of the oil and supercritical CO<sub>2</sub> extract of *Schinus molle* L. *Flavour and Fragrance Journal*, 19(6), 554-558. <https://doi.org/10.1002/ffj.1350>
- Martínez, A. (2020). *Química de productos naturales*. El autor. <https://bibliotecadigital.udea.edu.co/handle/10495/16148>
- Martins, M. do R., Arantes, S., Candeias, F., Tinoco, M. T., & Cruz-Morais, J. (2014). Antioxidant, antimicrobial and toxicological properties of *Schinus molle* L. essential oils. *Journal of Ethnopharmacology*, 151(1), 485-492. <https://doi.org/10.1016/j.jep.2013.10.063>

- Moncada, F. M. (2014). *Determinación de la Composición y Actividad Antimicrobiana del Aceite Esencial de Schinus Molle L. (Molle) de Arequipa y Moquegua contra Klebsiella Pneumoniae, Pseudomona Aeruginosa y Staphylococcus Aureus* [Universidad Católica de Santa María]. <https://repositorio.ucsm.edu.pe/handle/20.500.12920/4316>
- Murrieta-Dionicio, U., Medrano-Hernández, J., Guerra-Ramírez, D., & Valle-Guadarrama, S. (2024). Composition of essential oil of Schinus molle L. leaves affected by extraction time and scale-up process. *Revista Chapingo Serie Ciencias Forestales y Del Ambiente*, 29(2), 25-40. <https://doi.org/10.5154/r.rchscfa.2022.04.027>
- Olmedo, R. H., Nepote, V., & Grosso, N. R. (2012). Aguaribay and Cedron Essential Oils as Natural Antioxidants in Oil-Roasted and Salted Peanuts. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 89(12), 2195-2205. <https://doi.org/10.1007/s11746-012-2129-4>
- Pino, J. A. P. (2015). *Aceites esenciales: Química, bioquímica, producción y usos*. Editorial Universitaria. <https://e-libro.net/libros/libro.aspx?idlibro=23665>
- Plaza, M., & Ricalde, M. (2015). Establecer parámetros de control de calidad físico-químicos del aceite esencial del Schinus molle l. Obtenido por arrastre de vapor. *Revista Ciencia, Tecnología e Innovación*, 11(12), 693-696.
- Radice, M., Durofil, A., Buzzi, R., Baldini, E., Martínez, A. P., Scalvenzi, L., & Manfredini, S. (2022). Alpha-Phellandrene and Alpha-Phellandrene-Rich Essential Oils: A Systematic Review of Biological Activities, Pharmaceutical and Food Applications. *Life*, 12(10), 1602. <https://doi.org/10.3390/life12101602>
- Rodrigues, V. H., de Melo, M. M. R., Tenberg, V., Carreira, R., Portugal, I., & Silva, C. M. (2021). Similarity analysis of essential oils and oleoresins of *Eucalyptus globulus* leaves produced by distinct methods, solvents and operating conditions.

*Industrial Crops and Products*, 164, 113339.

<https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2021.113339>

Roohinejad, S., Koubaa, M., Barba, F. J., Leong, S. Y., Khelfa, A., Greiner, R., & Chemat, F. (2017). Extraction Methods of Essential Oils From Herbs and Spices. En *Essential Oils in Food Processing* (pp. 21-55). John Wiley & Sons, Ltd. <https://doi.org/10.1002/9781119149392.ch2>

Salem, M. Z. M., El-Hefny, M., Ali, H. M., Elansary, H. O., Nasser, R. A., El-Settawy, A. A. A., El Shanhorey, N., Ashmawy, N. A., & Salem, A. Z. M. (2018). Antibacterial activity of extracted bioactive molecules of *Schinus terebinthifolius* ripened fruits against some pathogenic bacteria. *Microbial Pathogenesis*, 120, 119-127. <https://doi.org/10.1016/j.micpath.2018.04.040>

Sánchez Chopa, C., & Descamps, L. R. (2012). Composition and biological activity of essential oils against *Metopolophium dirhodum* (Hemiptera: Aphididae) cereal crop pest. *Pest Management Science*, 68(11), 1492-1500. <https://doi.org/10.1002/ps.3334>

Schulte, A., Rojas, C., & Rojas, R. (1992). *Reforestación y Agroforestería en los Andes; uso sostenido, conservación y restauración de suelos con árboles y arbustos nativos. 1- Apuntes sobre el molle (Schinus molle L.)*. ETSFOR- FUPAGEMA- AGRUCO- ECO.

Schulz, H., & Baranska, M. (2007). Identification and quantification of valuable plant substances by IR and Raman spectroscopy. *Vibrational Spectroscopy*, 43(1), 13-25. <https://doi.org/10.1016/j.vibspec.2006.06.001>

Sindhu, S., Chempakam, B., Leela, N. K., & Suseela Bhai, R. (2011). Chemoprevention by essential oil of turmeric leaves (*Curcuma longa* L.) on the growth of *Aspergillus flavus* and aflatoxin production. *Food and Chemical Toxicology*, 49(5), 1188-1192. <https://doi.org/10.1016/j.fct.2011.02.014>

- Solis Quispe, A. (2018). *Composición química de los aceites esenciales de Schinus areira Linneo Y Minthostachys spicata (Benth) Epling y ensayos de toxicidad en Artemia salina Leach y en ratones albinos* [Universidad Nacional de San Agustín de Arequipa]. <http://repositorio.unsa.edu.pe/handle/UNSA/8286>
- Tavakkoli, E., Bazargani-Gilani, B., & Pajohi-Alamoti, M. (2020). The impacts of tomato residuum extract with Arabic gum and dill essential oil on the shelf life improvement of trout fillets stored at chilly condition. *Journal of Food Safety*, 40(4), e12812. <https://doi.org/10.1111/jfs.12812>
- Vila Casanovas, R. (2019). Aceites esenciales y estado de ánimo. *Articles publicats en revistes (Farmacologia, Toxicologia i Química Terapèutica)*. <https://diposit.ub.edu/dspace/handle/2445/159478>
- Vituro, C., Bandoni, A., Dellacassa, E., Atti Serafini, L., & Elder, H. (2010). Problemática Schinus en latinoamérica. En *Normalización de productos naturales obtenidos de especies de la flora aromática latinoamericana: Proyecto CYTED IV.20*. Porto Alegre: EDIPUCRS, 2010. <https://bibliodigital.unijui.edu.br/items/6fa28d82-1518-4f0c-8d58-cb1ac9a62e83>
- Volpini-Klein, A. F. N., Lima Júnior, S. E., Cardoso, C. A. L., Cabral, M. R. P., Louro, G. M., Coutinho, E. J., de Jesus, D. A., Junior, D. P., & Simionatto, E. (2021). Chemical Composition of Essential Oils from Leaves and Fruits of Schinus molle Obtained by Different Extraction Methods (Hydrodistillation, Fractional Hydrodistillation and Steam Distillation) and Seasonal Variations. *Journal of Essential Oil Bearing Plants*, 24(2), 228-242. <https://doi.org/10.1080/0972060X.2021.1914739>
- Wade, L. G., & Simek, J. W. (2017). *Química orgánica* (9a. ed). Pearson Educación de México.
- Zahir, E., Saeed, R., Hameed, M. A., & Yousuf, A. (2017). Study of physicochemical properties of edible oil and evaluation of frying oil quality by Fourier Transform-

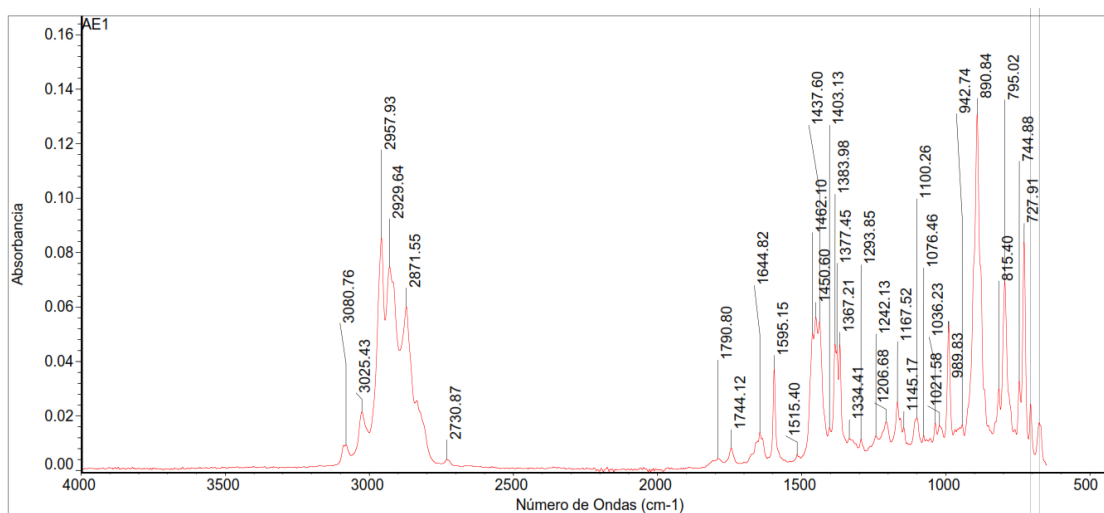
Infrared (FT-IR) Spectroscopy. *Arabian Journal of Chemistry*, 10, S3870-S3876.

<https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2014.05.025>

## ANEXOS ANEXO 01

Picos espectrales IRTF - ATR de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 90.3 °C, (AE), a diferentes tiempos (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min) con sus respectivas absorbancias (intensidades)

AE1.



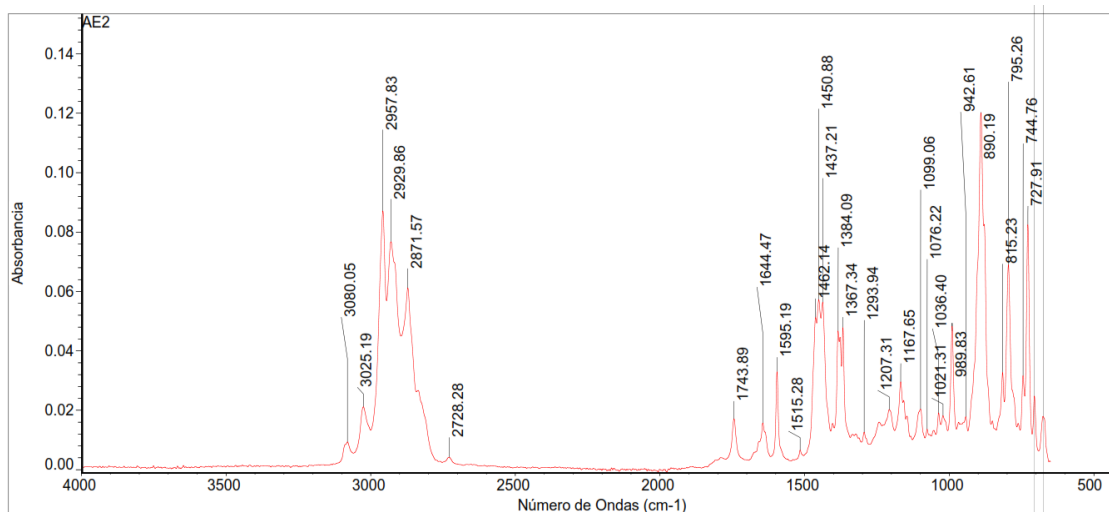
Dom Sep 25 10:38:37 2022 (GMT-05:00)

BUSCAR PICOS:

Espectros: AE1  
 Región: 4000.00 400.00  
 Umbral absoluto: 0.003  
 Sensibilidad: 78

Lista de picos:	Posición:	Intensidad:
	675.82	0.0175
	705.54	0.0244
	727.91	0.0838
	744.88	0.0327
	795.02	0.0693
	815.40	0.0299
	890.84	0.131
	942.74	0.0168
	989.83	0.0532
	1021.58	0.0165
	1036.23	0.0174
	1076.46	0.0128
	1100.26	0.0192
	1145.17	0.0154
	1167.52	0.0251
	1206.68	0.0177
	1242.13	0.0126
	1293.85	0.0115
	1334.41	0.0117
	1367.21	0.0461
	1377.45	0.0441
	1383.98	0.0464
	1403.13	0.0156
	1437.60	0.0546
	1450.60	0.0562
	1462.10	0.0501
	1515.40	0.0058
	1595.15	0.0371
	1644.82	0.0139
	1744.12	0.0082
	1790.80	0.0043
	2730.87	0.0040
	2871.55	0.0601
	2929.64	0.0748
	2957.93	0.0853
	3025.43	0.0214
	3080.76	0.0094

AE2



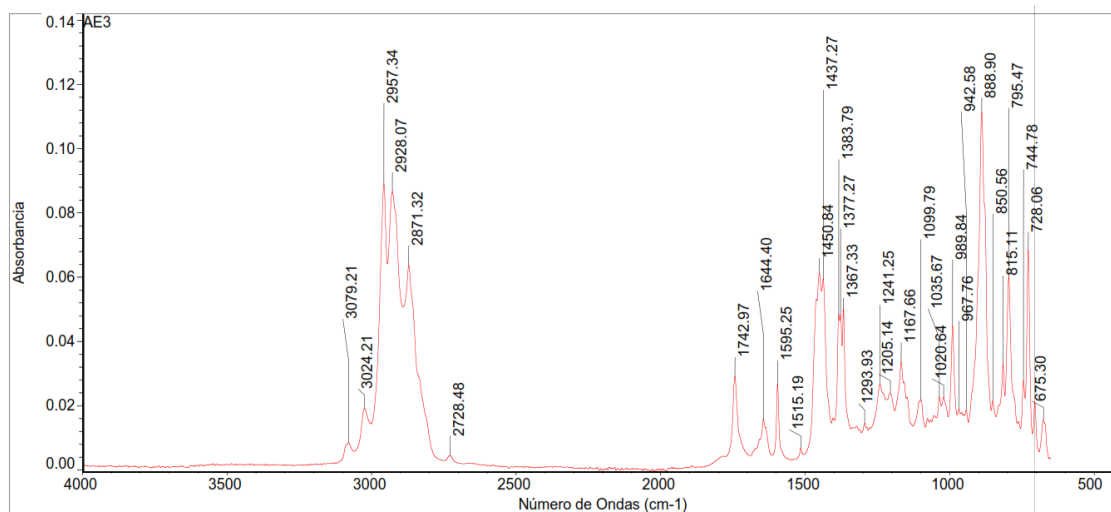
Dom Sep 25 10:23:13 2022 (GMT-05:00)

BUSCAR PICOS:

Espectros: AE2  
 Región: 4000.00 400.00  
 Umbral absoluto: 0.003  
 Sensibilidad: 68  
 Lista de picos:

Posición:	Intensidad:
675.72	0.0179
705.41	0.0248
727.91	0.0825
744.76	0.0317
795.26	0.0690
815.23	0.0327
890.19	0.120
942.61	0.0178
989.83	0.0483
1021.31	0.0181
1036.40	0.0191
1076.22	0.0136
1099.06	0.0203
1167.65	0.0296
1207.31	0.0202
1293.94	0.0126
1367.34	0.0479
1384.09	0.0467
1437.21	0.0564
1450.88	0.0572
1462.14	0.0512
1515.28	0.0066
1595.19	0.0330
1644.47	0.0157
1743.89	0.0171
2728.28	0.0041
2871.57	0.0612
2929.86	0.0767
2957.83	0.0871
3025.19	0.0211
3080.05	0.0093

AE3



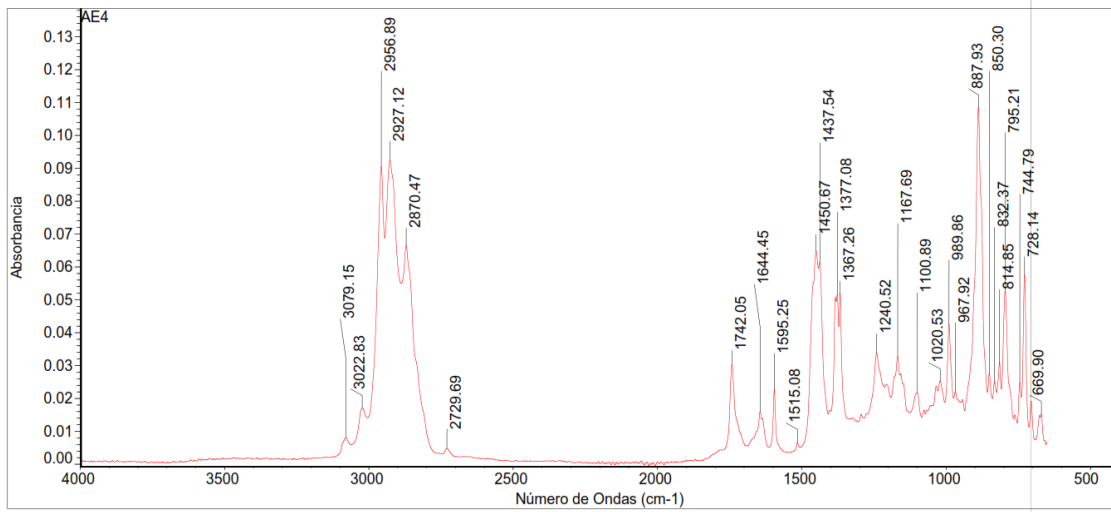
Dom Sep 25 10:26:23 2022 (GMT-05:00)

BUSCAR PICOS:

Espectros: AE3  
 Región: 4000.00 400.00  
 Umbral absoluto: 0.003  
 Sensibilidad: 68  
 Lista de picos:

Posición:	675.30	Intensidad:	0.0156
Posición:	705.50	Intensidad:	0.0211
Posición:	728.06	Intensidad:	0.0685
Posición:	744.78	Intensidad:	0.0277
Posición:	795.47	Intensidad:	0.0601
Posición:	815.11	Intensidad:	0.0329
Posición:	850.56	Intensidad:	0.0216
Posición:	888.90	Intensidad:	0.111
Posición:	942.58	Intensidad:	0.0186
Posición:	967.76	Intensidad:	0.0190
Posición:	989.84	Intensidad:	0.0449
Posición:	1020.64	Intensidad:	0.0226
Posición:	1035.67	Intensidad:	0.0228
Posición:	1099.79	Intensidad:	0.0219
Posición:	1167.66	Intensidad:	0.0337
Posición:	1205.14	Intensidad:	0.0238
Posición:	1241.25	Intensidad:	0.0266
Posición:	1293.93	Intensidad:	0.0146
Posición:	1367.33	Intensidad:	0.0502
Posición:	1377.27	Intensidad:	0.0482
Posición:	1383.79	Intensidad:	0.0485
Posición:	1437.27	Intensidad:	0.0595
Posición:	1450.84	Intensidad:	0.0613
Posición:	1515.19	Intensidad:	0.0068
Posición:	1595.25	Intensidad:	0.0269
Posición:	1644.40	Intensidad:	0.0158
Posición:	1742.97	Intensidad:	0.0292
Posición:	2728.48	Intensidad:	0.0044
Posición:	2871.32	Intensidad:	0.0637
Posición:	2928.07	Intensidad:	0.0866
Posición:	2957.34	Intensidad:	0.0891
Posición:	3024.21	Intensidad:	0.0191
Posición:	3079.21	Intensidad:	0.0085

AE4



Dom Sep 25 10:27:36 2022 (GMT-05:00)

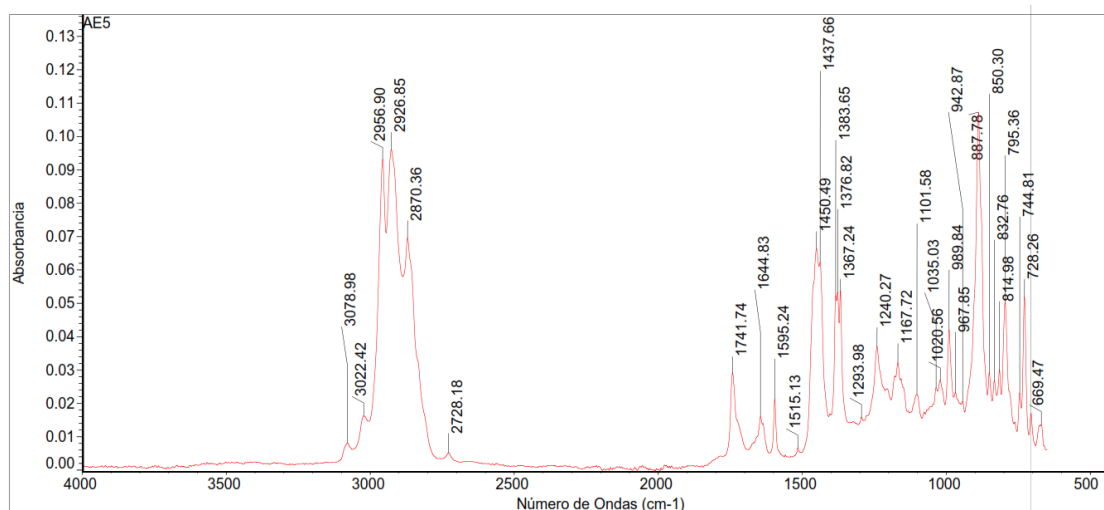
BUSCAR PICOS:

Espectros: AE4  
Región: 4000.00 400.00  
Umbral absoluto: 0.003  
Sensibilidad: 68

Lista de picos:

Posición:	669.90	Intensidad:	0.0153
Posición:	705.43	Intensidad:	0.0192
Posición:	728.14	Intensidad:	0.0577
Posición:	744.79	Intensidad:	0.0250
Posición:	795.21	Intensidad:	0.0528
Posición:	814.85	Intensidad:	0.0311
Posición:	832.37	Intensidad:	0.0250
Posición:	850.30	Intensidad:	0.0278
Posición:	887.93	Intensidad:	0.109
Posición:	967.92	Intensidad:	0.0221
Posición:	989.86	Intensidad:	0.0426
Posición:	1020.53	Intensidad:	0.0253
Posición:	1100.89	Intensidad:	0.0217
Posición:	1167.69	Intensidad:	0.0328
Posición:	1240.52	Intensidad:	0.0339
Posición:	1367.26	Intensidad:	0.0521
Posición:	1377.08	Intensidad:	0.0516
Posición:	1437.54	Intensidad:	0.0615
Posición:	1450.67	Intensidad:	0.0648
Posición:	1515.08	Intensidad:	0.0067
Posición:	1595.25	Intensidad:	0.0227
Posición:	1644.45	Intensidad:	0.0160
Posición:	1742.05	Intensidad:	0.0303
Posición:	2729.69	Intensidad:	0.0048
Posición:	2870.47	Intensidad:	0.0666
Posición:	2927.12	Intensidad:	0.0924
Posición:	2956.89	Intensidad:	0.0906
Posición:	3022.83	Intensidad:	0.0170
Posición:	3079.15	Intensidad:	0.0081

AE5



Dom Sep 25 10:39:47 2022 (GMT-05:00)

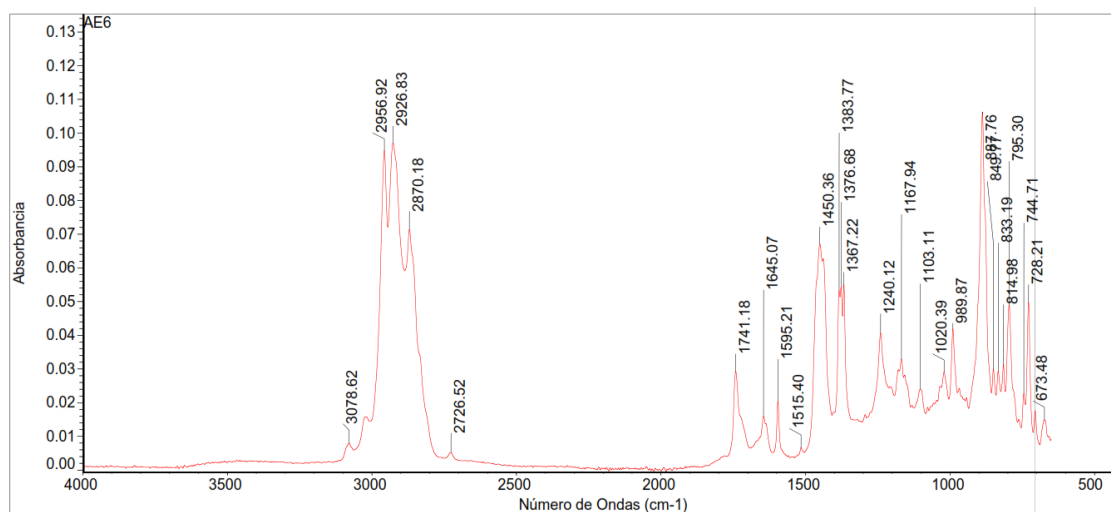
BUSCAR PICOS:

Espectros: AE5  
 Región: 4000.00 400.00  
 Umbral absoluto: 0.005  
 Sensibilidad: 78

Lista de picos:

Posición:	Intensidad:
669.47	0.0136
705.55	0.0170
728.26	0.0519
744.81	0.0231
795.36	0.0503
814.98	0.0301
832.76	0.0269
850.30	0.0293
887.78	0.107
942.87	0.0206
967.85	0.0233
989.84	0.0420
1020.56	0.0270
1035.03	0.0247
1101.58	0.0226
1167.72	0.0322
1240.27	0.0370
1293.98	0.0159
1367.24	0.0538
1376.82	0.0533
1383.65	0.0522
1437.66	0.0623
1450.49	0.0663
1515.13	0.0067
1595.24	0.0212
1644.83	0.0160
1741.74	0.0291
2728.18	0.0051
2870.36	0.0696
2926.85	0.0960
2956.90	0.0932
3022.42	0.0163
3078.98	0.0081

AE6



Dom Sep 25 10:33:59 2022 (GMT-05:00)

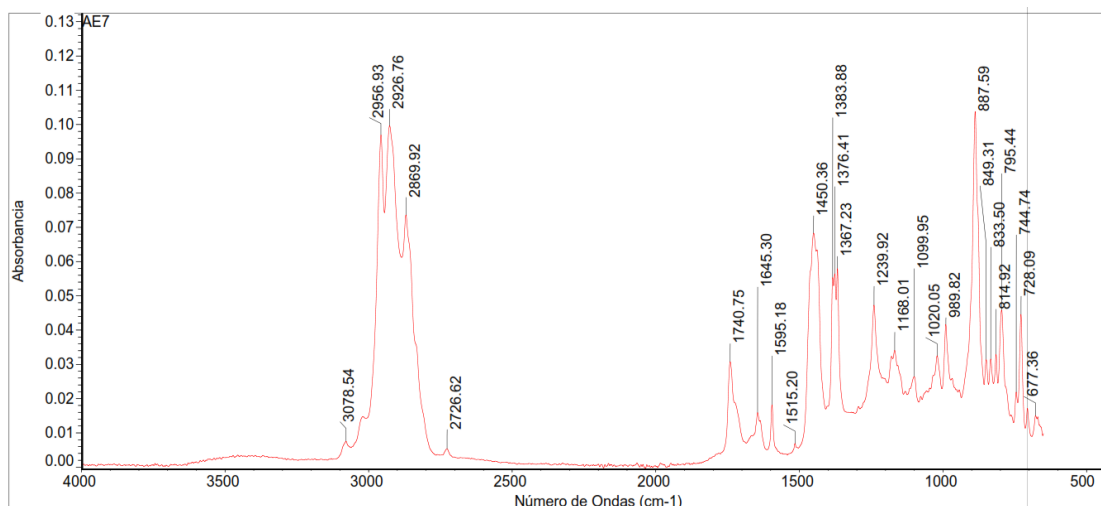
BUSCAR PICOS:

Espectros: AE6  
 Región: 4000.00 400.00  
 Umbral absoluto: 0.003  
 Sensibilidad: 68

Lista de picos:

Posición:	Intensidad:
673.48	0.0149
705.44	0.0176
728.21	0.0498
744.71	0.0226
795.30	0.0489
814.98	0.0314
833.19	0.0293
849.77	0.0299
887.76	0.106
989.87	0.0419
1020.39	0.0291
1103.11	0.0239
1167.94	0.0329
1240.12	0.0407
1367.22	0.0552
1376.68	0.0543
1383.77	0.0533
1450.36	0.0671
1515.40	0.0067
1595.21	0.0204
1645.07	0.0160
1741.18	0.0292
2726.52	0.0052
2870.18	0.0714
2926.83	0.0971
2956.92	0.0948
3078.62	0.0080

AE7



Dom Sep 25 10:36:19 2022 (GMT-05:00)

BUSCAR PICOS:

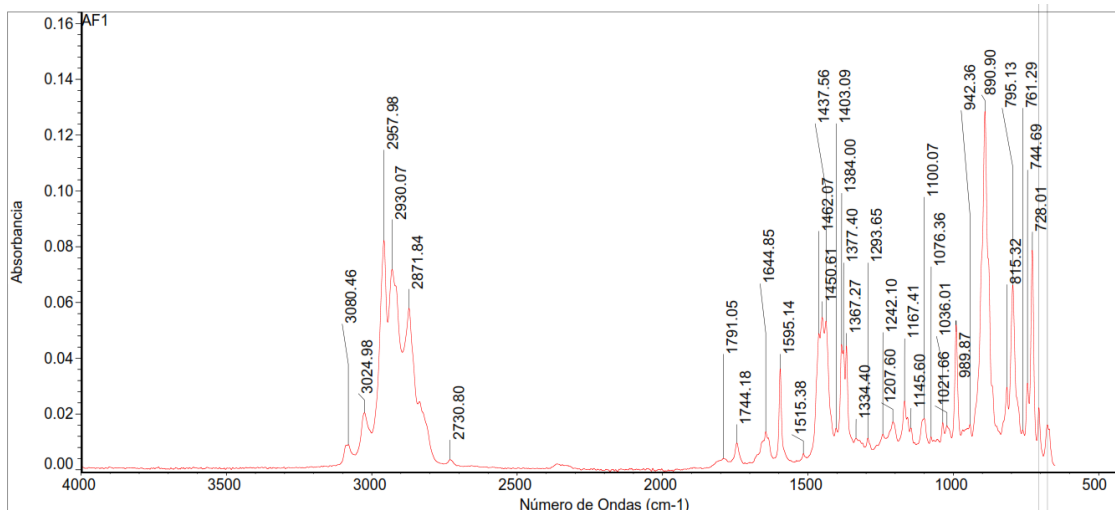
Espectros: AE7  
 Región: 4000.00 400.00  
 Umbral absoluto: 0.004  
 Sensibilidad: 73  
 Lista de picos:

Posición:	677.36	Intensidad:	0.0150
Posición:	705.64	Intensidad:	0.0172
Posición:	728.09	Intensidad:	0.0445
Posición:	744.74	Intensidad:	0.0219
Posición:	795.44	Intensidad:	0.0458
Posición:	814.92	Intensidad:	0.0329
Posición:	833.50	Intensidad:	0.0315
Posición:	849.31	Intensidad:	0.0314
Posición:	887.59	Intensidad:	0.104
Posición:	989.82	Intensidad:	0.0416
Posición:	1020.05	Intensidad:	0.0325
Posición:	1099.95	Intensidad:	0.0264
Posición:	1168.01	Intensidad:	0.0340
Posición:	1239.92	Intensidad:	0.0473
Posición:	1367.23	Intensidad:	0.0580
Posición:	1376.41	Intensidad:	0.0564
Posición:	1383.88	Intensidad:	0.0553
Posición:	1450.36	Intensidad:	0.0683
Posición:	1515.20	Intensidad:	0.0069
Posición:	1595.18	Intensidad:	0.0182
Posición:	1645.30	Intensidad:	0.0159
Posición:	1740.75	Intensidad:	0.0307
Posición:	2726.62	Intensidad:	0.0053
Posición:	2869.92	Intensidad:	0.0736
Posición:	2926.76	Intensidad:	0.0996
Posición:	2956.93	Intensidad:	0.0969
Posición:	3078.54	Intensidad:	0.0075

## ANEXO 02

Picos espectrales IRTF - ATR de aceite esencial de frutos de molle extraídos a 80.1 °C, (AF), a diferentes tiempos (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min) con sus respectivas absorbancias (intensidades)

AF1



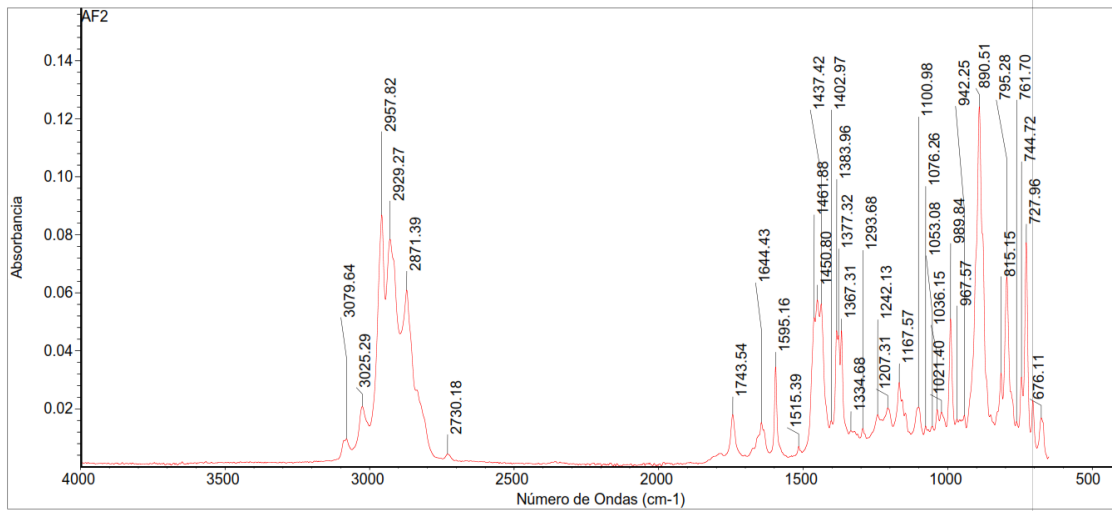
Dom Sep 25 12:06:20 2022 (GMT-05:00)

BUSCAR PICOS:

Espectros: AF1  
 Región: 4000.00 400.00  
 Umbral absoluto: 0.003  
 Sensibilidad: 78

Lista de picos:	Posición:	Intensidad:
	676.20	0.0161
	705.40	0.0223
	728.01	0.0787
	744.69	0.0311
	761.29	0.0142
	795.13	0.0662
	815.32	0.0296
	890.90	0.129
	942.36	0.0162
	989.87	0.0519
	1021.66	0.0158
	1036.01	0.0169
	1076.36	0.0118
	1100.07	0.0184
	1145.60	0.0149
	1167.41	0.0246
	1207.60	0.0171
	1242.10	0.0127
	1293.65	0.0113
	1334.40	0.0112
	1367.27	0.0444
	1377.40	0.0428
	1384.00	0.0449
	1403.09	0.0149
	1437.56	0.0533
	1450.61	0.0546
	1462.07	0.0488
	1515.38	0.0058
	1595.14	0.0363
	1644.85	0.0136
	1744.18	0.0096
	1791.05	0.0040
	2730.80	0.0036
	2871.84	0.0579
	2930.07	0.0718
	2957.98	0.0822
	3024.98	0.0204
	3080.46	0.0090

AF2



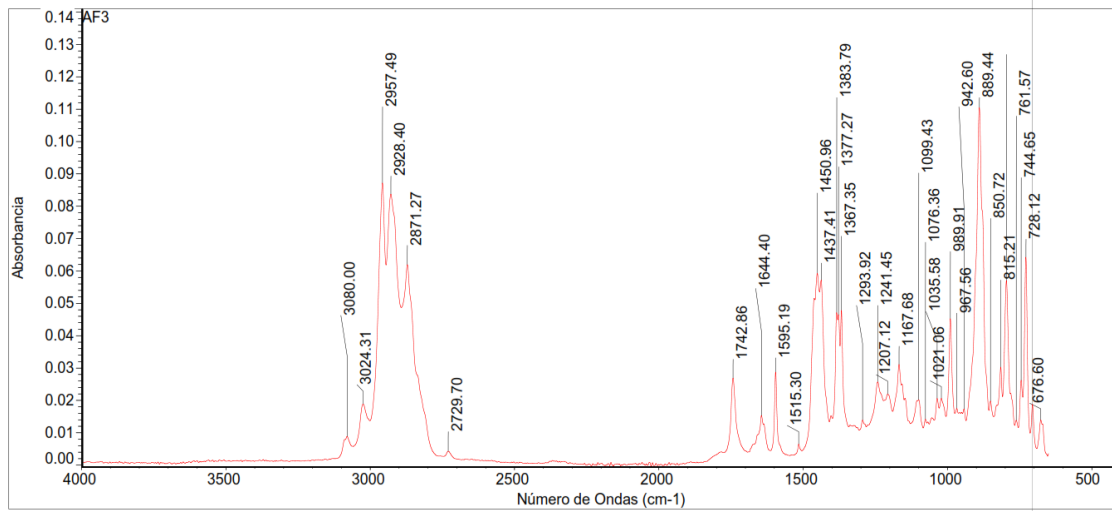
Dom Sep 25 12:07:51 2022 (GMT-05:00)

BUSCAR PICOS:

Espectros: AF2  
 Región: 4000.00 400.00  
 Umbral absoluto: 0.004  
 Sensibilidad: 78  
 Lista de picos:

Posición:	676.11	Intensidad:	0.0168
Posición:	705.30	Intensidad:	0.0229
Posición:	727.96	Intensidad:	0.0773
Posición:	744.72	Intensidad:	0.0309
Posición:	761.70	Intensidad:	0.0156
Posición:	795.28	Intensidad:	0.0654
Posición:	815.15	Intensidad:	0.0323
Posición:	890.51	Intensidad:	0.124
Posición:	942.25	Intensidad:	0.0178
Posición:	967.57	Intensidad:	0.0164
Posición:	989.84	Intensidad:	0.0510
Posición:	1021.40	Intensidad:	0.0189
Posición:	1036.15	Intensidad:	0.0197
Posición:	1053.08	Intensidad:	0.0140
Posición:	1076.26	Intensidad:	0.0140
Posición:	1100.98	Intensidad:	0.0205
Posición:	1167.57	Intensidad:	0.0291
Posición:	1207.31	Intensidad:	0.0202
Posición:	1242.13	Intensidad:	0.0179
Posición:	1293.68	Intensidad:	0.0132
Posición:	1334.68	Intensidad:	0.0124
Posición:	1367.31	Intensidad:	0.0470
Posición:	1377.32	Intensidad:	0.0453
Posición:	1383.96	Intensidad:	0.0470
Posición:	1402.97	Intensidad:	0.0158
Posición:	1437.42	Intensidad:	0.0562
Posición:	1450.80	Intensidad:	0.0575
Posición:	1461.88	Intensidad:	0.0514
Posición:	1515.39	Intensidad:	0.0070
Posición:	1595.16	Intensidad:	0.0345
Posición:	1644.43	Intensidad:	0.0153
Posición:	1743.54	Intensidad:	0.0180
Posición:	2730.18	Intensidad:	0.0044
Posición:	2871.39	Intensidad:	0.0609
Posición:	2929.27	Intensidad:	0.0785
Posición:	2957.82	Intensidad:	0.0868
Posición:	3025.29	Intensidad:	0.0207
Posición:	3079.64	Intensidad:	0.0096

AF3



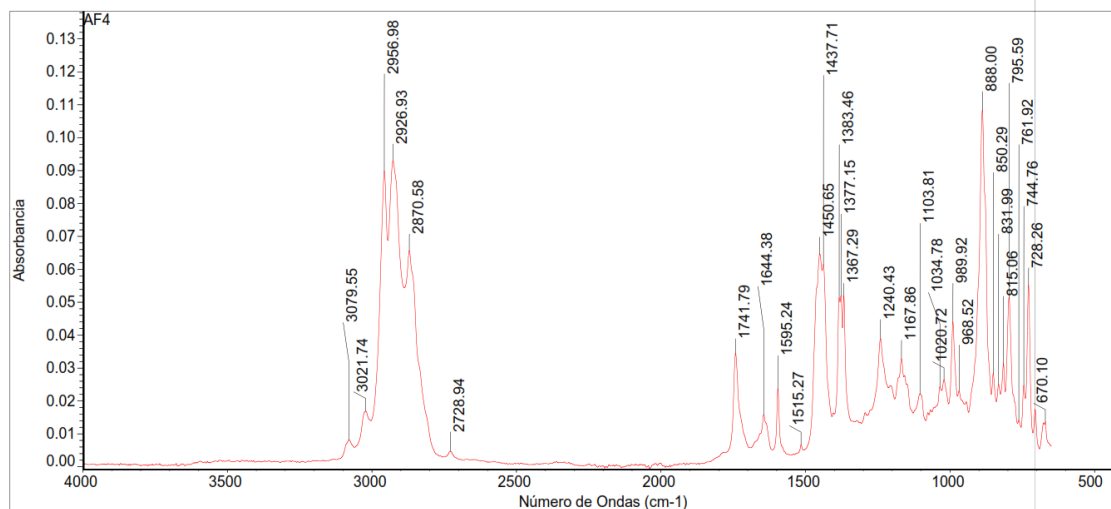
Dom Sep 25 12:20:31 2022 (GMT-05:00)

BUSCAR PICOS:

Espectros: AF3  
 Región: 4000.00 400.00  
 Umbral absoluto: 0.003  
 Sensibilidad: 78  
 Lista de picos:

Posición:	Intensidad:
676.60	0.0139
705.43	0.0188
728.12	0.0642
744.65	0.0262
761.57	0.0138
795.53	0.0570
815.21	0.0303
850.72	0.0198
889.44	0.111
942.60	0.0173
967.56	0.0175
989.91	0.0453
1021.06	0.0206
1035.58	0.0206
1076.36	0.0142
1099.43	0.0201
1167.68	0.0311
1207.12	0.0219
1241.45	0.0257
1293.92	0.0139
1367.35	0.0478
1377.27	0.0465
1383.79	0.0471
1437.41	0.0572
1450.96	0.0592
1515.30	0.0065
1595.19	0.0288
1644.40	0.0153
1742.86	0.0269
2729.70	0.0042
2871.27	0.0619
2928.40	0.0837
2957.49	0.0872
3024.31	0.0188
3080.00	0.0089

AF4



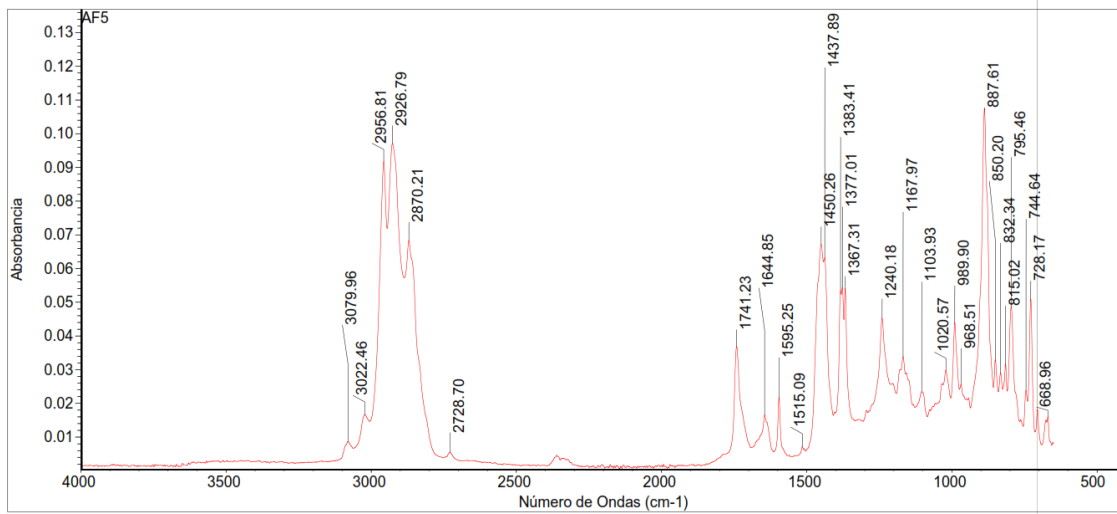
Dom Sep 25 12:21:59 2022 (GMT-05:00)

BUSCAR PICOS:

Espectros: AF4  
 Región: 4000.00 400.00  
 Umbral absoluto: 0.004  
 Sensibilidad: 78  
 Lista de picos:

Posición:	Intensidad:
670.10	0.0136
705.57	0.0175
728.26	0.0552
744.76	0.0247
761.92	0.0141
795.59	0.0515
815.06	0.0314
831.99	0.0250
850.29	0.0284
888.00	0.108
968.52	0.0230
989.92	0.0440
1020.72	0.0264
1034.78	0.0243
1103.81	0.0221
1167.86	0.0327
1240.43	0.0389
1367.29	0.0521
1377.15	0.0520
1383.46	0.0513
1437.71	0.0615
1450.65	0.0647
1515.27	0.0067
1595.24	0.0237
1644.38	0.0158
1741.79	0.0344
2728.94	0.0046
2870.58	0.0657
2926.93	0.0929
2956.98	0.0899
3021.74	0.0168
3079.55	0.0082

AF5



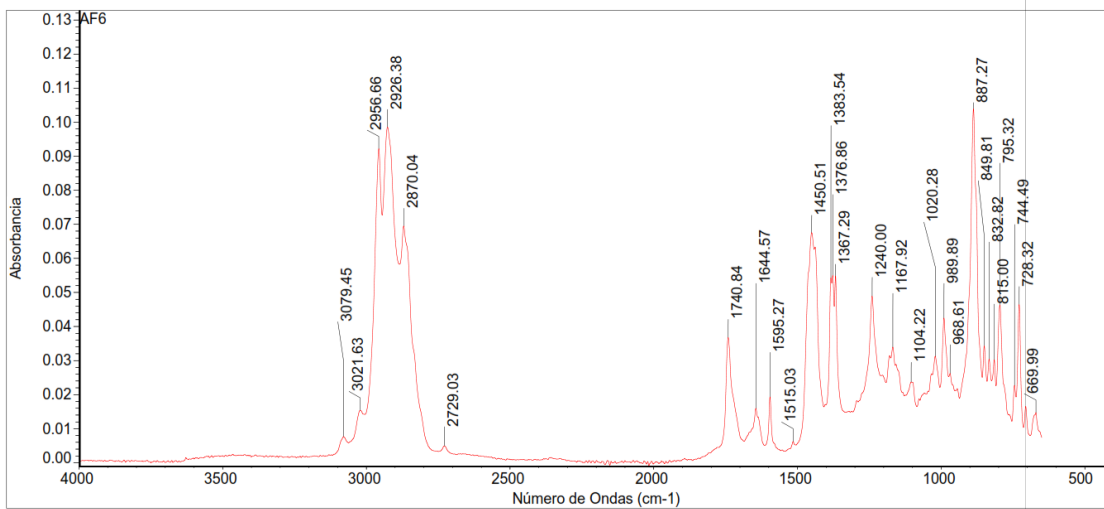
Dom Sep 25 12:29:02 2022 (GMT-05:00)

BUSCAR PICOS:

Espectros: AF5  
 Región: 4000.00 400.00  
 Umbral absoluto: 0.005  
 Sensibilidad: 78  
 Lista de picos:

Posición:	668.96	Intensidad:	0.0161
Posición:	705.22	Intensidad:	0.0183
Posición:	728.17	Intensidad:	0.0510
Posición:	744.64	Intensidad:	0.0239
Posición:	795.46	Intensidad:	0.0488
Posición:	815.02	Intensidad:	0.0317
Posición:	832.34	Intensidad:	0.0290
Posición:	850.20	Intensidad:	0.0330
Posición:	887.61	Intensidad:	0.107
Posición:	968.51	Intensidad:	0.0255
Posición:	989.90	Intensidad:	0.0439
Posición:	1020.57	Intensidad:	0.0298
Posición:	1103.93	Intensidad:	0.0234
Posición:	1167.97	Intensidad:	0.0339
Posición:	1240.18	Intensidad:	0.0453
Posición:	1367.31	Intensidad:	0.0541
Posición:	1377.01	Intensidad:	0.0544
Posición:	1383.41	Intensidad:	0.0534
Posición:	1437.89	Intensidad:	0.0632
Posición:	1450.26	Intensidad:	0.0672
Posición:	1515.09	Intensidad:	0.0071
Posición:	1595.25	Intensidad:	0.0217
Posición:	1644.85	Intensidad:	0.0165
Posición:	1741.23	Intensidad:	0.0369
Posición:	2728.70	Intensidad:	0.0054
Posición:	2870.21	Intensidad:	0.0683
Posición:	2926.79	Intensidad:	0.0972
Posición:	2956.81	Intensidad:	0.0918
Posición:	3022.46	Intensidad:	0.0166
Posición:	3079.96	Intensidad:	0.0087

AF6



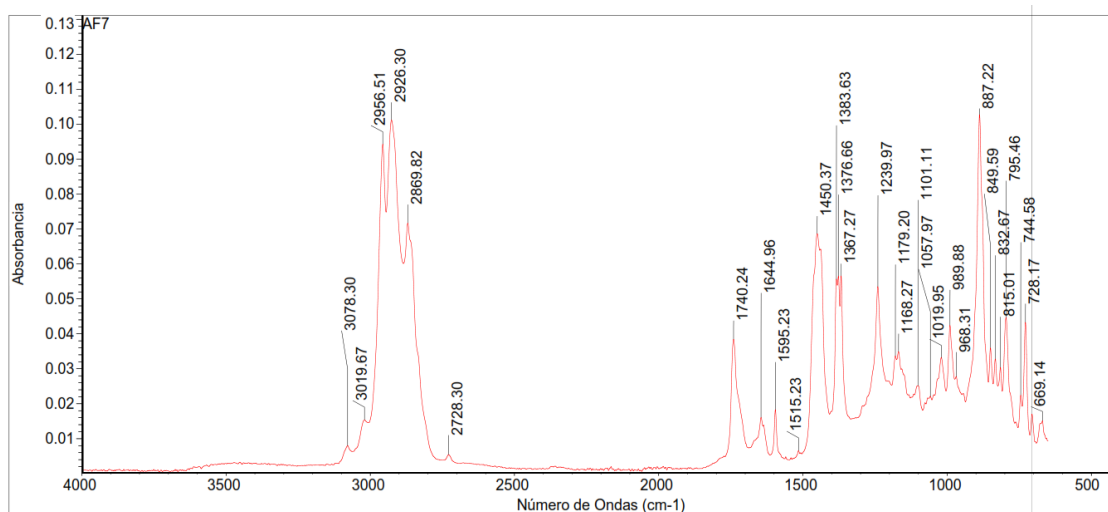
Dom Sep 25 12:30:42 2022 (GMT-05:00)

BUSCAR PICOS:

Espectros: AF6  
 Región: 4000.00 400.00  
 Umbral absoluto: 0.004  
 Sensibilidad: 78  
 Lista de picos:

Posición:	Intensidad:
669.99	0.0147
705.49	0.0165
728.32	0.0465
744.49	0.0227
795.32	0.0463
815.00	0.0302
832.82	0.0304
849.81	0.0343
887.27	0.104
968.61	0.0262
989.89	0.0425
1020.28	0.0313
1104.22	0.0237
1167.92	0.0339
1240.00	0.0489
1367.29	0.0548
1376.86	0.0550
1383.54	0.0543
1450.51	0.0675
1515.03	0.0062
1595.27	0.0193
1644.57	0.0159
1740.84	0.0368
2729.03	0.0049
2870.04	0.0695
2926.38	0.0985
2956.66	0.0922
3021.63	0.0153
3079.45	0.0076

AF7



Dom Sep 25 12:35:11 2022 (GMT-05:00)

BUSCAR PICOS:

Espectros: AF7  
 Región: 4000.00 400.00  
 Umbral absoluto: 0.004  
 Sensibilidad: 80  
 Lista de picos:

Posición:	Intensidad:
669.14	0.0151
705.52	0.0170
728.17	0.0433
744.58	0.0224
795.46	0.0447
815.01	0.0304
832.67	0.0328
849.59	0.0360
887.22	0.103
968.31	0.0277
989.88	0.0424
1019.95	0.0332
1057.97	0.0221
1101.11	0.0251
1168.27	0.0349
1179.20	0.0336
1239.97	0.0535
1367.27	0.0566
1376.66	0.0565
1383.63	0.0557
1450.37	0.0686
1515.23	0.0065
1595.23	0.0183
1644.96	0.0160
1740.24	0.0384
2728.30	0.0054
2869.82	0.0716
2926.30	0.101
2956.51	0.0943
3019.67	0.0153
3078.30	0.0080

### ANEXOS N°03

Análisis de varianza de grupo alqueno cíclico  $v(C=Car)$  en la extracción entre 90.3 °C (AE) y 81.3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Model</b>	0.0006	7	0.0001	137.47	< 0.0001	significant
A-TEMPERATURA	6.864E-07	1	6.864E-07	1.08	0.3379	
B-TIEMPO	0.0006	6	0.0001	160.20	< 0.0001	
<b>Residual</b>	3.799E-06	6	6.331E-07			
<b>Cor Total</b>	0.0006	13				

Análisis de varianza de grupo alcano  $\delta(C-H)$  en la extracción entre 90.3 (AE) y 81.3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Model</b>	0.0003	7	0.0000	73.22	< 0.0001	significant
A-TEMPERATURA	2.579E-07	1	2.579E-07	0.4064	0.5474	
B-TIEMPO	0.0003	6	0.0001	85.36	< 0.0001	
<b>Residual</b>	3.807E-06	6	6.345E-07			
<b>Cor Total</b>	0.0003	13				

Análisis de varianza de grupo Alcohol  $\delta(O-H)$  en la extracción entre 90.3 °C (AE) y 81.3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Model</b>	0.0002	7	0.0000	70.25	< 0.0001	significant
A-TEMPERATURA	3.018E-06	1	3.018E-06	6.43	0.0444	
B-TIEMPO	0.0002	6	0.0000	80.89	< 0.0001	
<b>Residual</b>	2.817E-06	6	4.695E-07			
<b>Cor Total</b>	0.0002	13				

Análisis de varianza de grupo éteres, aminas aromáticas  $v(C-O) + v(C-Nar)$  en la extracción entre 90.3 (AE) y 81.3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Model</b>	0.0001	7	0.0000	22.19	0.0007	significant
A-TEMPERATURA	1.400E-07	1	1.400E-07	0.1634	0.7000	
B-TIEMPO	0.0001	6	0.0000	25.87	0.0005	
<b>Residual</b>	5.140E-06	6	8.567E-07			
<b>Cor Total</b>	0.0001	13				

Análisis de varianza de grupo alcohol  $\delta(O-H)$  en la extracción entre 90.3 °C (AE) y 81.3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Model</b>	0.0001	7	9.244E-06	21.09	0.0008	significant
A-TEMPERATURA	5.600E-07	1	5.600E-07	1.28	0.3015	
B-TIEMPO	0.0001	6	0.0000	24.39	0.0006	
<b>Residual</b>	2.630E-06	6	4.383E-07			
<b>Cor Total</b>	0.0001	13				

Análisis de varianza de grupo alqueno conjugado  $\nu(\text{C}=\text{C})$  en la extracción entre 90.3 °C (AE) y 81.3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Model</b>	0.0012	7	0.0002	78.52	< 0.0001	significant
A-TEMPERATURA	2.857E-07	1	2.857E-07	0.1348	0.7261	
B-TIEMPO	0.0012	6	0.0002	91.58	< 0.0001	
<b>Residual</b>	0.0000	6	2.119E-06			
<b>Cor Total</b>	0.0012	13				

Análisis de varianza de grupo alcanos  $\omega(\text{C}-\text{H}) + \tau(\text{C}-\text{H})$  en la extracción entre 90.3 °C (AE) y 81.3 °C (AF) y tiempos de extracción (30, 60, 120, 180, 240, 300 y 360 min).

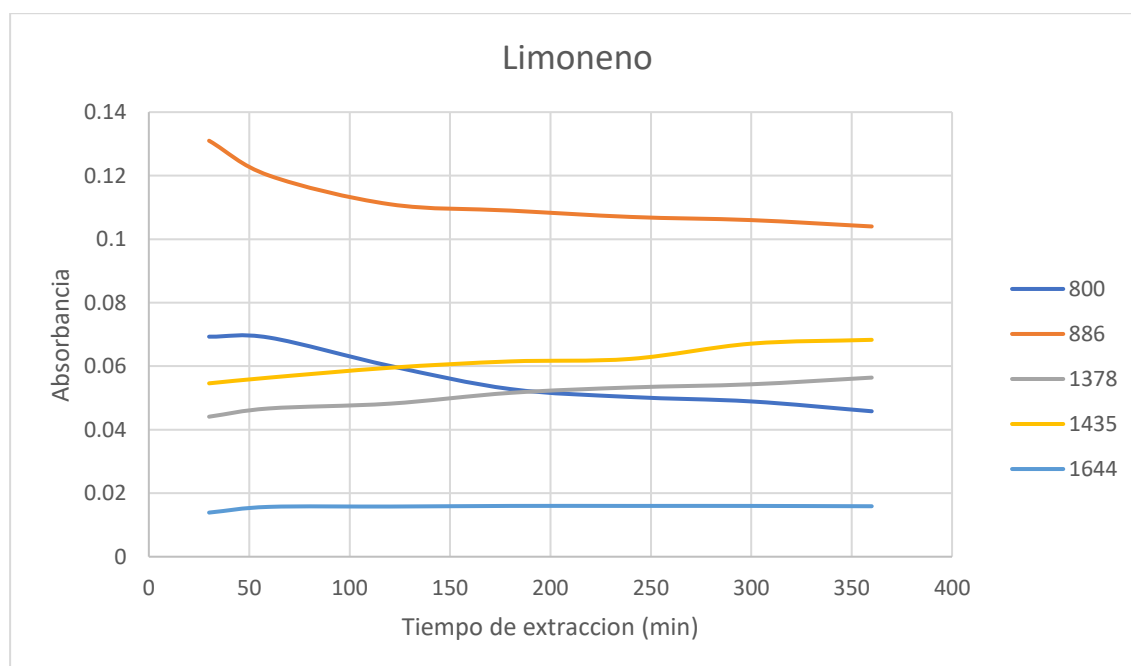
Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Model</b>	0.0028	7	0.0004	254.88	< 0.0001	significant
A-TEMPERATURA	0.0000	1	0.0000	23.32	0.0029	
B-TIEMPO	0.0027	6	0.0005	293.48	< 0.0001	
<b>Residual</b>	9.304E-06	6	1.551E-06			
<b>Cor Total</b>	0.0028	13				

## ANEXO N°04.

**Absorbancia de los picos espectrales correspondientes a Limoneno durante la extracción de aceite esencial a 90,3 °C (AE)**

Número de onda (cm-1)	Tiempo de extracción (min)						
	30	60	120	180	240	300	360
	AE1	AE2	AE3	AE4	AE5	AE6	AE7
800	0.0693	0.069	0.0601	0.0528	0.0503	0.0489	0.0458
886	0.131	0.12	0.111	0.109	0.107	0.106	0.104
1378	0.0441	0.0467	0.0482	0.0516	0.0533	0.0543	0.0564
1435	0.0546	0.0564	0.0595	0.0615	0.0623	0.0671	0.0683
1644	0.0139	0.0157	0.0158	0.016	0.016	0.016	0.0159

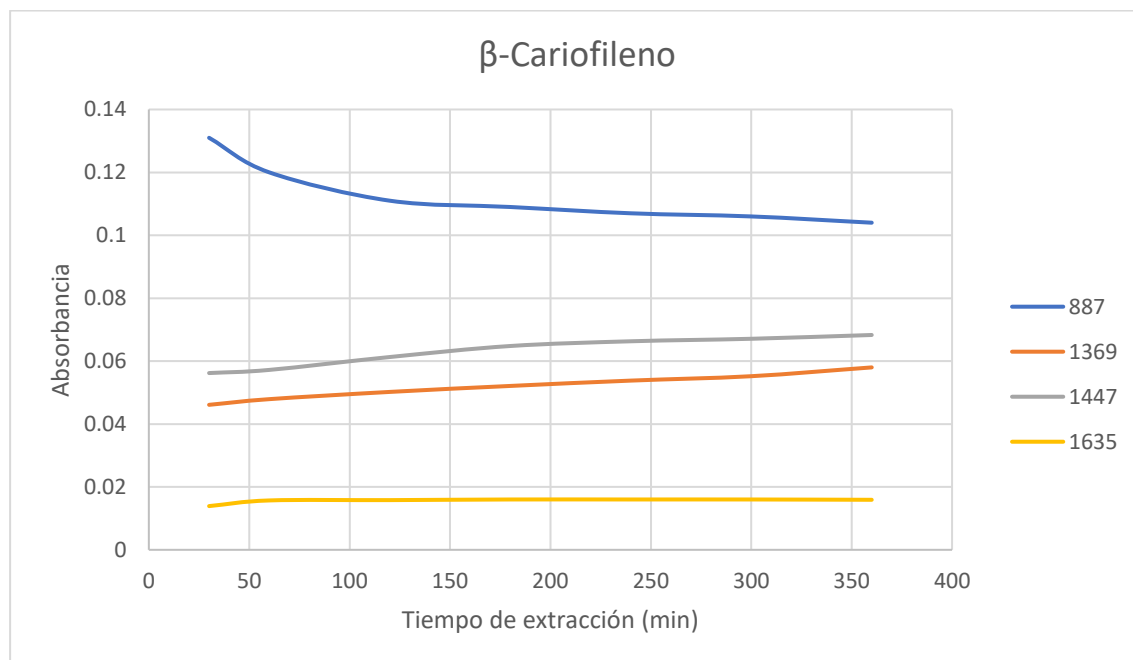
**Comportamiento de Limoneno del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 90,3 °C**



**Absorbancia de los picos espectrales correspondientes a  $\beta$ -Cariofileno durante la extracción de aceite esencial a 90,3 °C (AE)**

Número de onda (cm-1)	Tiempo de extracción (min)						
	30	60	120	180	240	300	360
	AE1	AE2	AE3	AE4	AE5	AE6	AE7
887	0.131	0.12	0.111	0.109	0.107	0.106	0.104
1369	0.0461	0.0479	0.0502	0.0521	0.0538	0.0552	0.058
1447	0.0562	0.0572	0.0613	0.0648	0.0663	0.0671	0.0683
1635	0.0139	0.0157	0.0158	0.016	0.016	0.016	0.0159

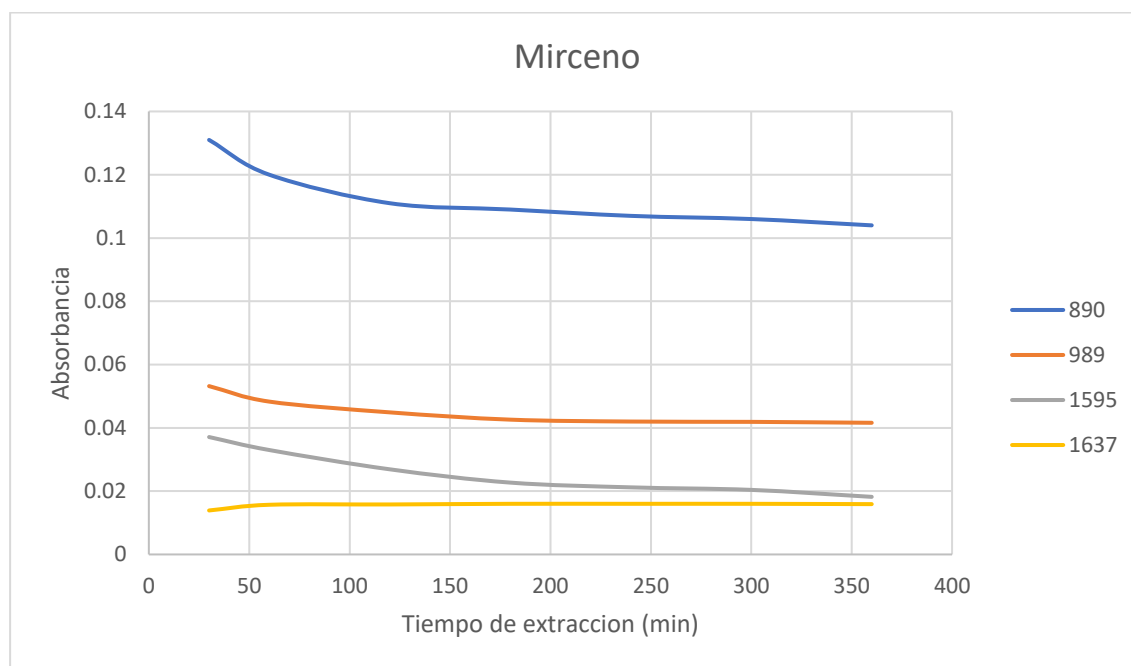
**Comportamiento de  $\beta$ -Cariofileno del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 90,3 °C**



**Absorbancia de los picos espectrales correspondientes a Mirceno durante la extracción de aceite esencial a 90,3 °C (AE)**

Número de onda (cm-1)	Tiempo de extracción (min)						
	30	60	120	180	240	300	360
	AE1	AE2	AE3	AE4	AE5	AE6	AE7
890	0.131	0.12	0.111	0.109	0.107	0.106	0.104
989	0.0532	0.0483	0.0449	0.0426	0.042	0.0419	0.0416
1595	0.0371	0.033	0.0269	0.0227	0.0212	0.0204	0.0182
1637	0.0139	0.0157	0.0158	0.016	0.016	0.016	0.0159

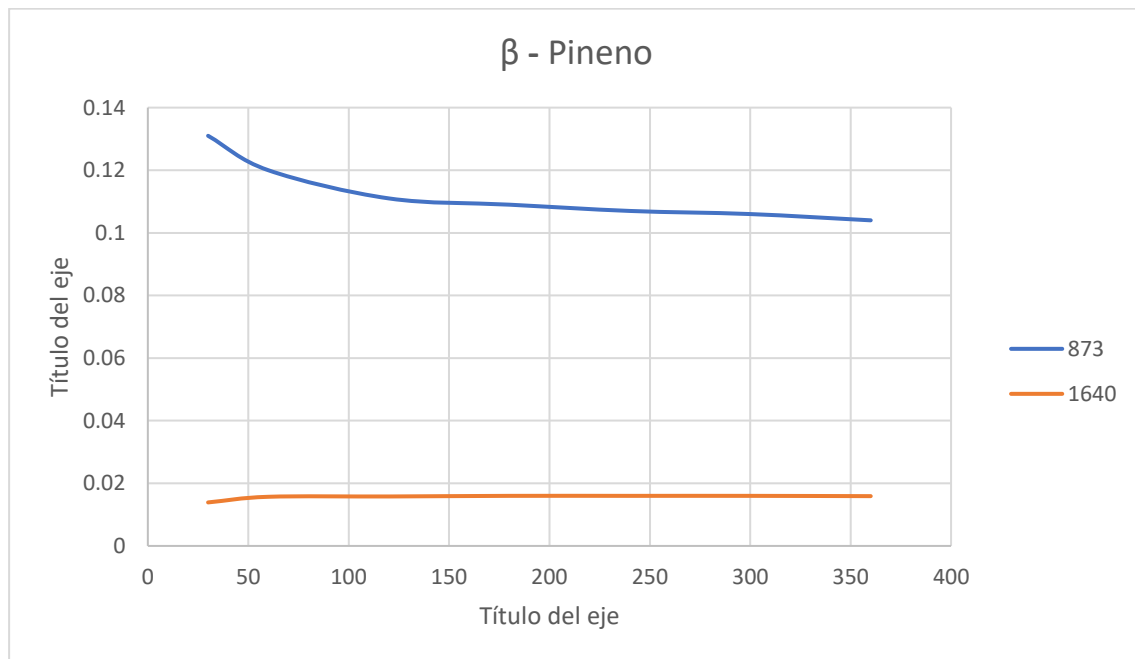
**Comportamiento de Mirceno del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 90,3 °C**



**Absorbancia de los picos espectrales correspondientes a  $\beta$ - Pineno durante la extracción de aceite esencial a 90,3 °C (AE)**

Número de onda (cm-1)	Tiempo de extracción (min)						
	30	60	120	180	240	300	360
	AE1	AE2	AE3	AE4	AE5	AE6	AE7
873	0.131	0.12	0.111	0.109	0.107	0.106	0.104
1640	0.0139	0.0157	0.0158	0.016	0.016	0.016	0.0159

**Comportamiento de Pineno del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 90,3 °C**

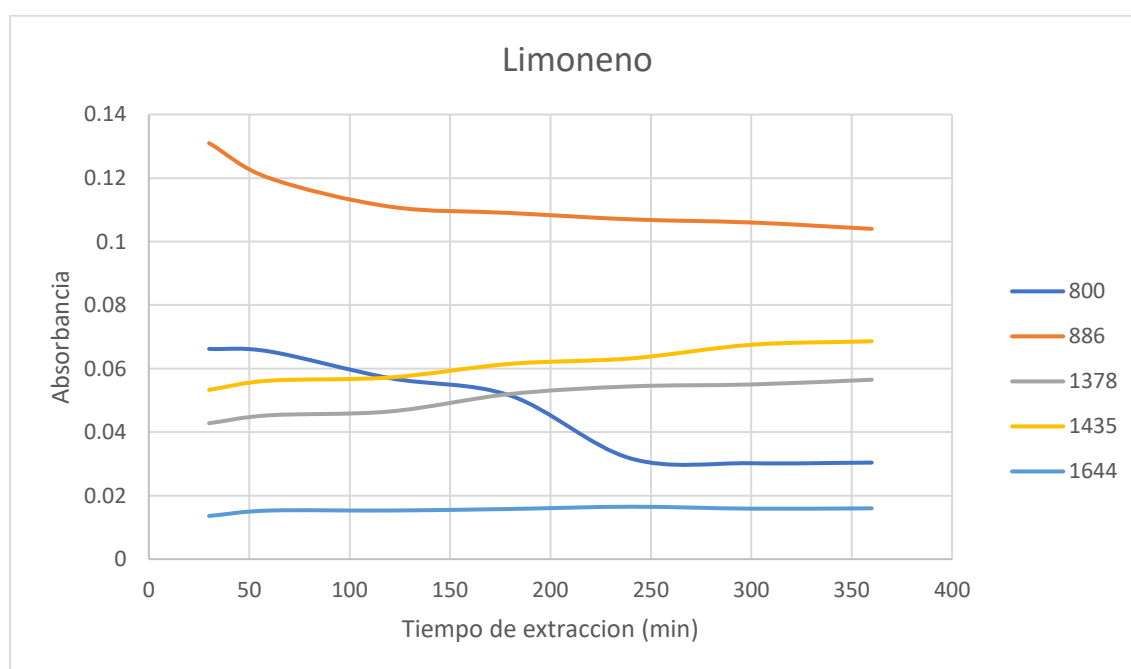


## ANEXO 05

**Absorbancia de los picos espectrales correspondientes a Limoneno durante la extracción de aceite esencial a 81,3 °C (AF)**

Número de onda (cm-1)	Tiempo de extracción (min)						
	30	60	120	180	240	300	360
	AF1	AF2	AF3	AF4	AF5	AF6	AF7
800	0.0662	0.0654	0.057	0.0515	0.0317	0.0302	0.0304
886	0.129	0.124	0.111	0.108	0.107	0.104	0.103
1378	0.0428	0.0453	0.0465	0.052	0.0544	0.055	0.0565
1435	0.0533	0.0562	0.0572	0.0615	0.0632	0.0675	0.0686
1644	0.0136	0.0153	0.0153	0.0158	0.0165	0.0159	0.016

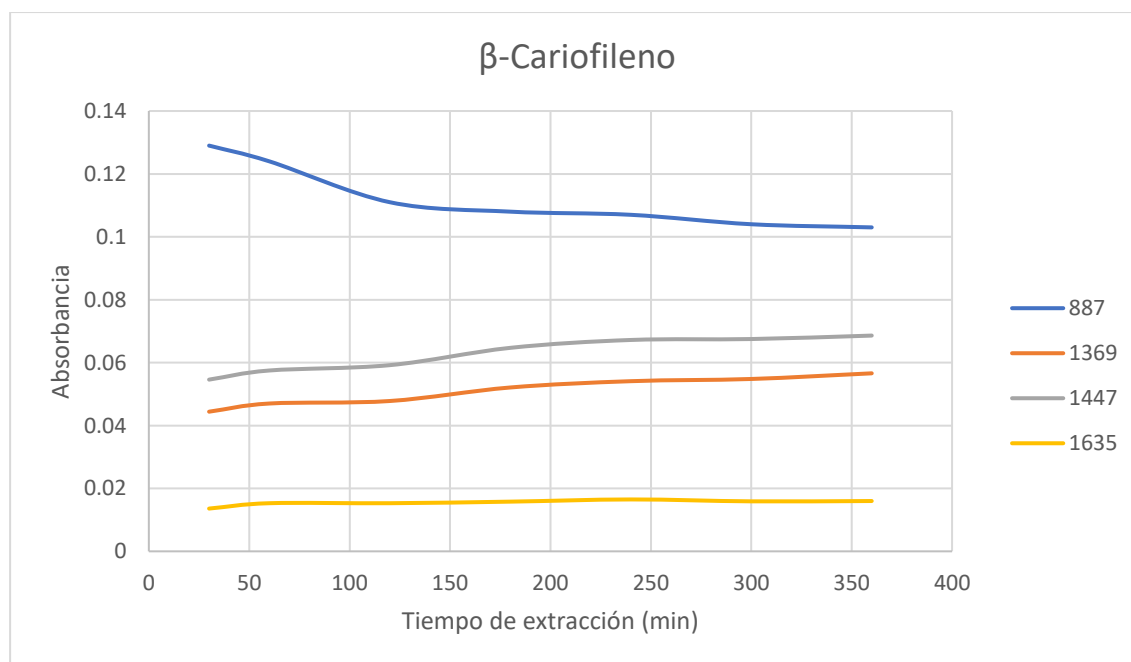
**Comportamiento de Limoneno del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 81,3 °C**



**Absorbancia de los picos espectrales correspondientes a  $\beta$ -Cariofileno durante la extracción de aceite esencial a 81,3 °C (AF)**

Número de onda (cm-1)	Tiempo de extracción (min)						
	30	60	120	180	240	300	360
	AF1	AF2	AF3	AF4	AF5	AF6	AF7
887	0.129	0.124	0.111	0.108	0.107	0.104	0.103
1369	0.0444	0.047	0.0478	0.0521	0.0541	0.0548	0.0566
1447	0.0546	0.0575	0.0592	0.0647	0.0672	0.0675	0.0686
1635	0.0136	0.0153	0.0153	0.0158	0.0165	0.0159	0.016

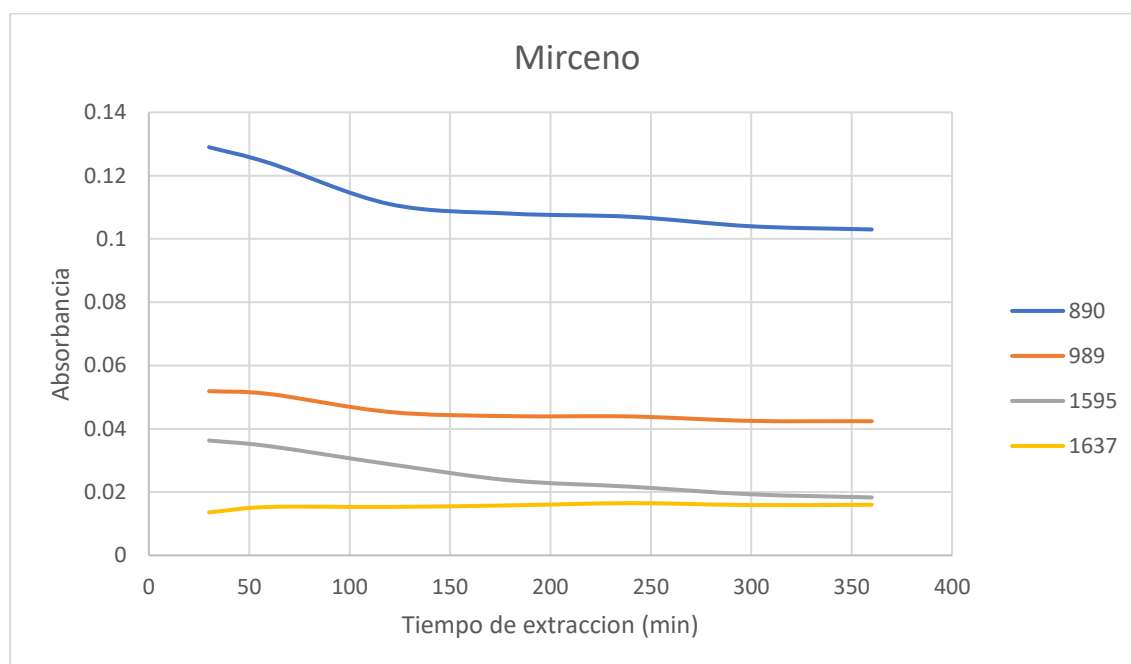
**Comportamiento de  $\beta$ -Cariofileno del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 90,3 °C**



**Absorbancia de los picos espectrales correspondientes a Mirceno durante la extracción de aceite esencial a 81,3 °C (AF)**

Número de onda (cm-1)	Tiempo de extracción (min)						
	30	60	120	180	240	300	360
	AF1	AF2	AF3	AF4	AE5	AE6	AE7
890	0.129	0.124	0.111	0.108	0.107	0.104	0.103
989	0.0519	0.051	0.0453	0.044	0.0439	0.0425	0.0424
1595	0.0363	0.0345	0.0288	0.0237	0.0217	0.0193	0.0183
1637	0.0136	0.0153	0.0153	0.0158	0.0165	0.0159	0.016

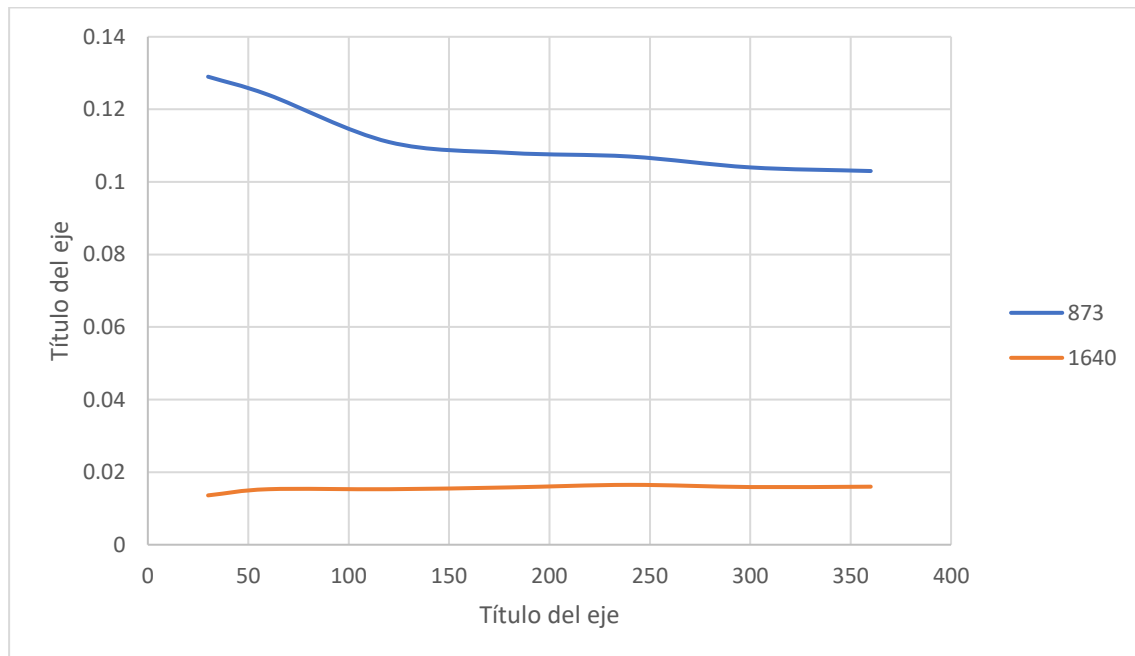
**Comportamiento de Mirceno del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 81,3 °C**



**Absorbancia de los picos espectrales correspondientes a  $\beta$ - Pineno durante la extracción de aceite esencial a 81,3 °C (AF)**

Número de onda (cm-1)	Tiempo de extracción (min)						
	30	60	120	180	240	300	360
	AF1	AF2	AF3	AF4	AF5	AF6	AF7
873	0.129	0.124	0.111	0.108	0.107	0.104	0.103
1640	0.0136	0.0153	0.0153	0.0158	0.0165	0.0159	0.016

**Comportamiento de Pineno del aceite esencial de semillas de molle durante el tiempo de extracción a 81,3 °C**



## ANEXO 06

**Análisis de varianza (ANOVA) de compuestos mayoritarios (IRTF-ATR) extraídos a 90,3 y 81,3 °C**

### Limoneno.

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Modelo</b>	0.0023	7	0.0003	10.12	0.0059	significativo
A-TEMPERATURA	0.0003	1	0.0003	9.06	0.0237	
B-TIEMPO	0.0020	6	0.0003	10.29	0.0061	
<b>Residual</b>	0.0002	6	0.0000			
<b>Cor Total</b>	0.0025	13				

### $\beta$ -Cariofileno

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Modelo</b>	0.0012	7	0.0002	78.52	< 0.0001	significativo
A-TEMPERATURA	2.857E-07	1	2.857E-07	0.1348	0.7261	
B-TIEMPO	0.0012	6	0.0002	91.58	< 0.0001	
<b>Residual</b>	0.0000	6	2.119E-06			
<b>Cor Total</b>	0.0012	13				

### $\beta$ -Pineno

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Modelo</b>	0.0012	7	0.0002	78.52	< 0.0001	significativo
A-TEMPERATURA	2.857E-07	1	2.857E-07	0.1348	0.7261	
B-TIEMPO	0.0012	6	0.0002	91.58	< 0.0001	
<b>Residual</b>	0.0000	6	2.119E-06			
<b>Cor Total</b>	0.0012	13				

## ANEXO 07

**Análisis de varianza (ANOVA) de compuestos mayoritarios identificados con GC-MS en el proceso de extracción de aceite esencial a 90.3 y 81.3 °C**

### $\alpha$ -Pineno

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Modelo</b>	15.67	5	3.13	53.27	0.0009	significativo
A-Temperatura	0.0555	1	0.0555	0.9432	0.3864	
B-Tiempo	15.62	4	3.90	66.35	0.0007	
<b>Residual</b>	0.2354	4	0.0588			
<b>Cor Total</b>	15.91	9				

### Limoneno

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Modelo</b>	399.07	5	79.81	102.42	0.0003	significativo
A-Temperatura	0.4507	1	0.4507	0.5784	0.4893	
B-Tiempo	398.62	4	99.65	127.88	0.0002	
<b>Residual</b>	3.12	4	0.7793			
<b>Cor Total</b>	402.18	9				

### $\beta$ -Pineno

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Modelo</b>	430.48	5	86.10	162.92	0.0001	significativo
A-Temperatura	0.6315	1	0.6315	1.20	0.3357	
B-Tiempo	429.85	4	107.46	203.35	< 0.0001	
<b>Residual</b>	2.11	4	0.5285			
<b>Cor Total</b>	432.59	9				

### Sabineno

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Modelo</b>	16.75	5	3.35	59.67	0.0008	significativo
A-Temperatura	0.1440	1	0.1440	2.57	0.1845	
B-Tiempo	16.60	4	4.15	73.95	0.0005	
<b>Residual</b>	0.2245	4	0.0561			
<b>Cor Total</b>	16.97	9				

### Metil caprilato

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Modelo</b>	2.16	5	0.4329	25.87	0.0038	significativo
A-Temperatura	0.0169	1	0.0169	1.01	0.3719	
B-Tiempo	2.15	4	0.5369	32.09	0.0027	
<b>Residual</b>	0.0669	4	0.0167			
<b>Cor Total</b>	2.23	9				

## Cariofileno

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Modelo</b>	74.84	5	14.97	12.22	0.0155	significativo
A-Temperatura	1.30	1	1.30	1.06	0.3615	
B-Tiempo	73.54	4	18.38	15.02	0.0112	
<b>Residual</b>	4.90	4	1.22			
<b>Cor Total</b>	79.73	9				

## Biciclogermaceno

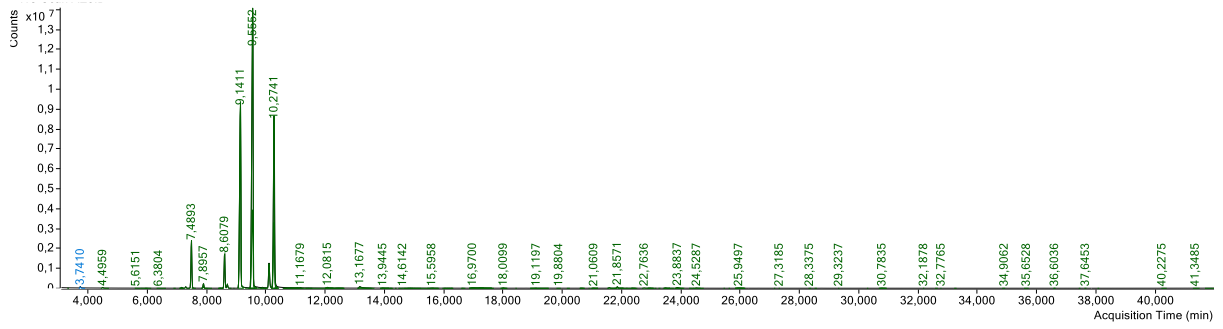
Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Modelo</b>	276.78	5	55.36	530.58	< 0.0001	significativo
A-Temperatura	0.2484	1	0.2484	2.38	0.1977	
B-Tiempo	276.53	4	69.13	662.63	< 0.0001	
<b>Residual</b>	0.4173	4	0.1043			
<b>Cor Total</b>	277.20	9				

## $\beta$ -Cadineno

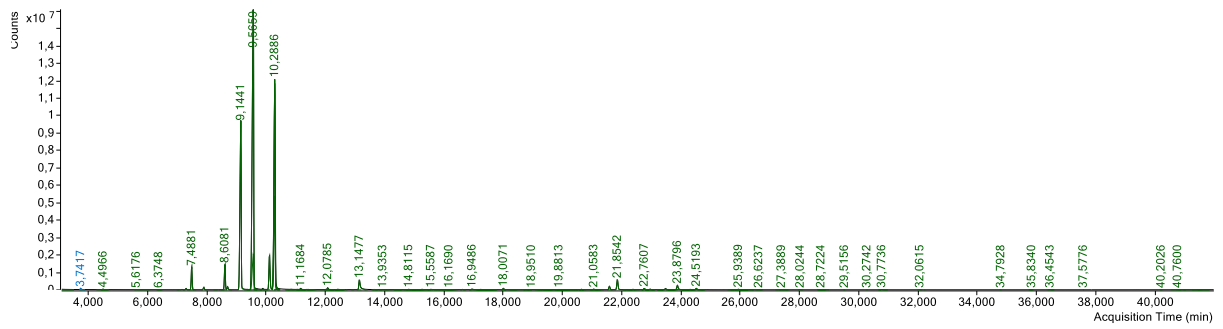
Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor F	valor p	
<b>Modelo</b>	278.16	5	55.63	28.82	0.0031	significativo
A-Temperatura	1.95	1	1.95	1.01	0.3722	
B-Tiempo	276.22	4	69.05	35.77	0.0022	
<b>Residual</b>	7.72	4	1.93			
<b>Cor Total</b>	285.88	9				

## ANEXO 08.

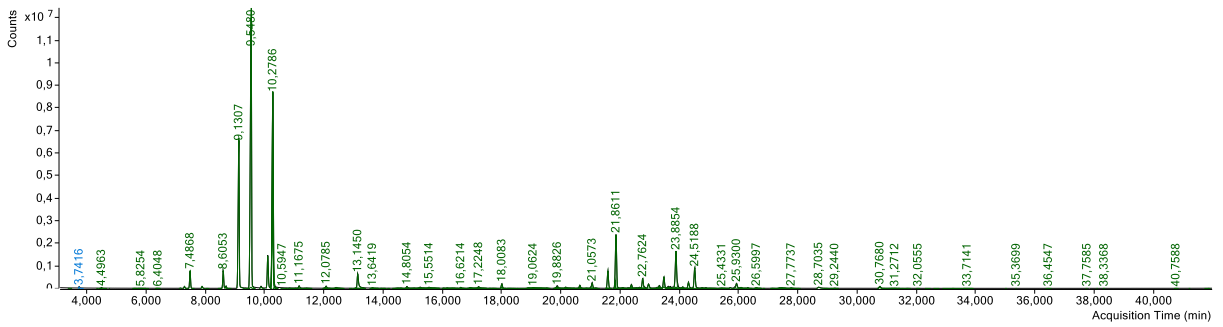
### CROMATOGRAMAS GC- MS DE ACEITES ESENCIALES EXTRAÍDOS A 90.3 °C



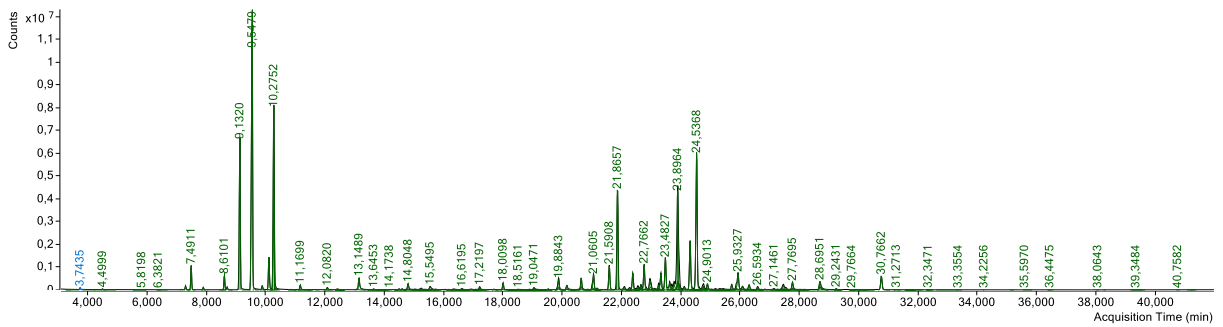
AE30



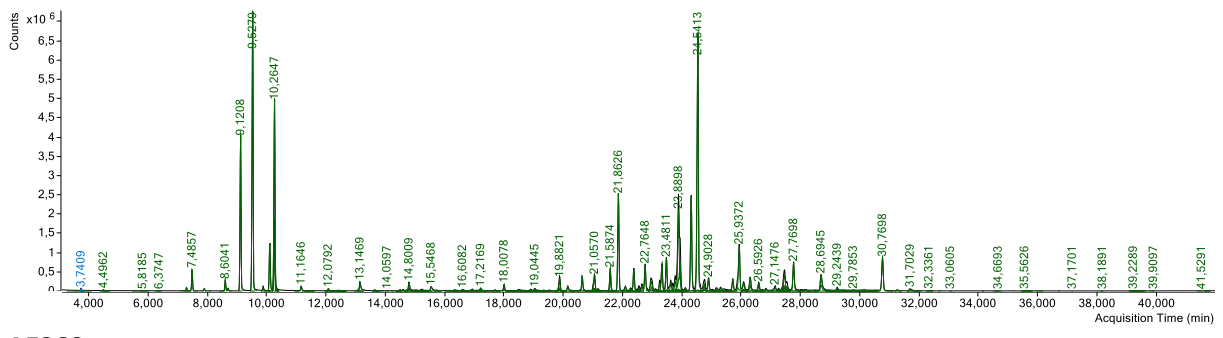
AE60



AE120

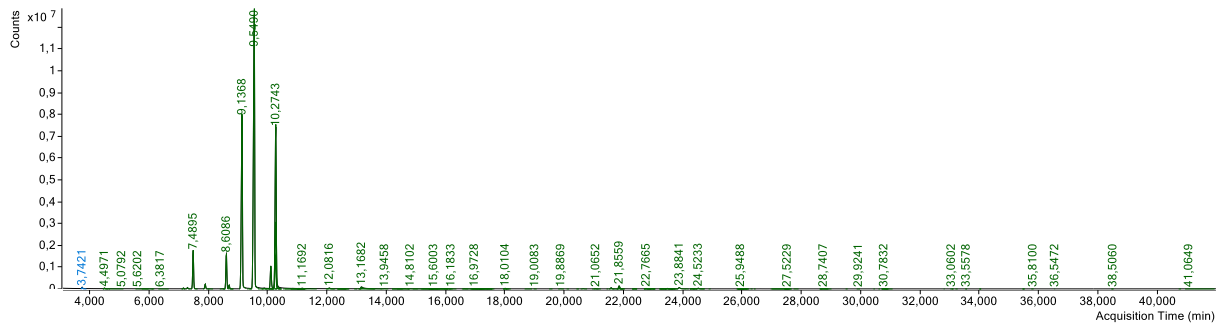


AE240

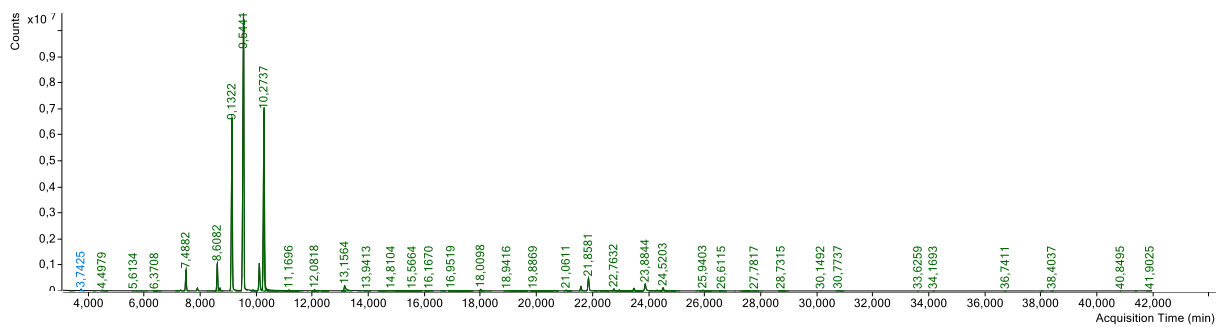


AE360

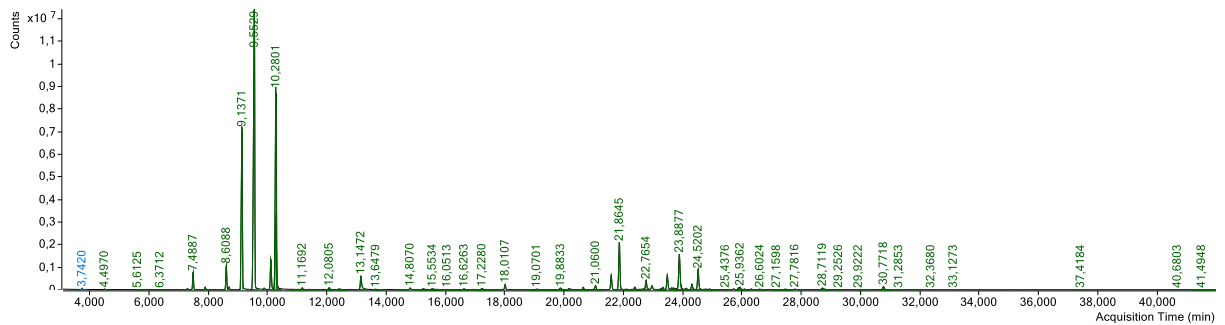
# ANEXO 09. CROMATOGRAMAS GC- MS DE ACEITES ESENCIALES EXTRAÍDOS A 81.3 °C



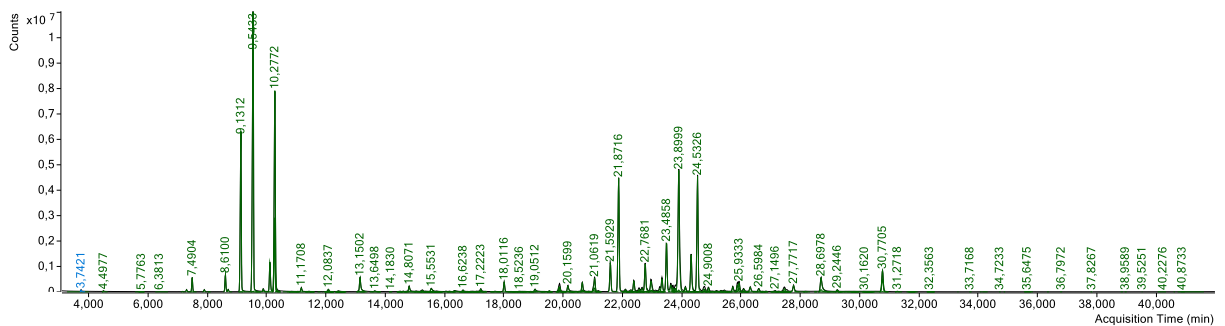
AF30



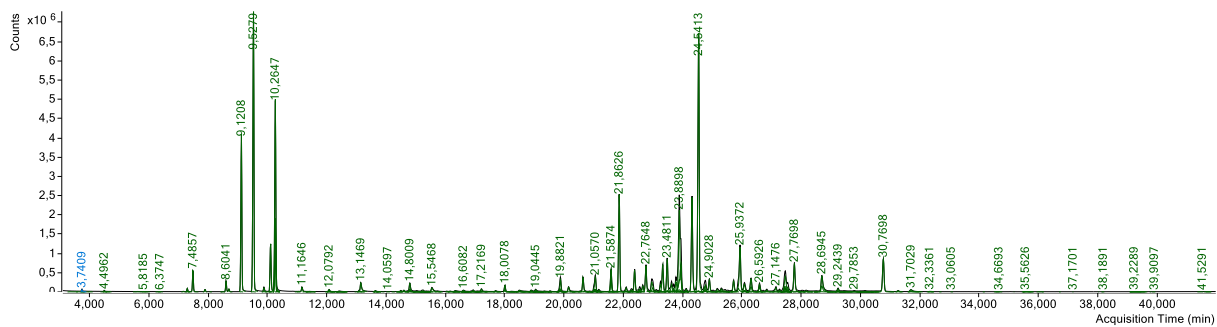
AF60



AF120



AF240



AF360

**Anexo N°10** Componentes (%) identificados en el aceite esencial de *Schinus molle* L, extraídos a 90.3 °C

Peak N.	Compound	R <sub>t</sub>	AI	%	Amostras
1	$\alpha$ -Pinene	7.4918	932	4.758	AE30
2	Camphene	7.8995	946	0.448	
3	Sabinene	8.2128	969	3.554	
4	L- $\beta$ -Pinene	8.7034	-	0.413	
5	$\beta$ -Pinene	9.1450	974	23.437	
6	$\alpha$ -Phellandrene	9.5527	1002	40.366	
7	o-Cymene	10.1075	1022	2.921	
8	Pseudolimonene	10.2773	1003	22.045	
9	Methyl caprylate	13.1647	1123	0.461	
<b>Total</b>				97.08	

Peak N.	Compound	R <sub>t</sub>	AI	%	Amostras
1	$\alpha$ -Thujene	7.2993	924	0.104	AE60
2	$\alpha$ -Pinene	7.4918	932	1.979	
3	Camphene	7.8994	946	0.227	
4	Sabinene	8.6127	969	2.314	
5	L- $\beta$ -Pinene	8.7033	-	0.291	
6	$\beta$ -Pinene	9.1449	974	19.526	
7	$\alpha$ -Phellandrene	9.5639	1002	38.960	
8	Terpinolene	9.8923	1086	0.119	
9	o-Cymene	10.1187	1022	3.669	
10	D-Limonene	10.2886	1024	26.154	
11	$\gamma$ -Terpinene	11.1718	1054	0.116	
12	Terpinolene	12.776	1086	0.257	
13	Methyl caprylate	13.1420	1123	1.493	
14	L- $\alpha$ -bornyl acetate	18.0110	1284	0.162	
15	$\beta$ -Maaliene	21.5891	1381	0.415	
16	Caryophyllene	21.8495	1417	1.199	
17	cis,cis,cis-1,1,4,8-Tetramethyl-4,7,10-cycloundecatriene	22.7554	-	0.171	
18	Bicyclogermacrene	23.8764	1500	0.621	
19	$\delta$ -Cadinene	24.5218	1522	0.186	
20	Caryophyllene oxide	32.9389	1582	2.634	
<b>Total</b>				97.92	

Peak N.	Compound	R <sub>t</sub>	AI	%	Amostras
1	1R- $\alpha$ -Pinene	7.4920	-	1.415	AE120
2	Camphene	7.8883	946	0.162	
3	Sabinene	8.6017	969	1.463	
4	L- $\beta$ -Pinene	8.7036	-	0.208	
5	$\beta$ -Pinene	9.1338	974	13.907	
6	$\alpha$ -Phellandrene	9.5528	1002	29.615	
7	<i>p</i> -Cymene	10.1076	1020	3.079	
8	D-Limonene	10.2775	1024	20.997	
9	$\gamma$ -Terpinene	11.1720	1054	0.244	
10	Terpinolene	12.0779	1086	0.280	
11	Methyl caprylate	13.1423	1123	1.972	
12	Terpinen-4-ol	14.8068	1174	0.209	
13	5-Methyl-heptanecarboxylicacidmethylester	15.2484	-	0.196	
14	Methyl citronellate	17.2299	1257	0.304	
15	L- $\alpha$ -bornyl acetate	18.0112	1284	0.461	
16	$\alpha$ -Cubebene	19.8795	1348	0.388	
17	Copaene	20.6382	1373	0.317	
18	$\beta$ -Elemen	21.0572	1389	0.668	
19	$\beta$ -Maaliene	21.5893	1381	1.802	
20	Caryophyllene	21.8611	1417	5.997	
21	Aromandendrene	22.3820	1439	0.409	
22	cis,cis,cis-1,1,4,8-Tetramethyl-4,7,10-cycloundecatriene	22.7670	-	1.157	
23	Alloaromadendrene	22.9594	1455	0.517	
24	$\gamma$ -Muurolene	23.3218	1500	0.388	
25	$\beta$ -Copaen-4 $\alpha$ -ol	23.4803	1590	1.270	
26	$\beta$ -Selinene	23.6275	1649	0.206	
27	Bicyclogermacren	23.8879	1500	4.849	
28	$\gamma$ -Cadinene	24.3069	1513	0.664	
29	$\beta$ -Cadinene	24.5220	-	2.264	
30	Espatulenol	25.9261	1577	0.789	
31	Caryophyllene oxide	26.0846	1582	0.140	
32	Tau-Cadinol	27.4547	1638	0.165	
33	Shyobunol	28.7003	1688	0.243	
34	Tau-Cadinol acetate	30.7724	-	0.280	
	<b>Total</b>			89.78	

Peak N.	Compound	R <sub>t</sub>	AI	%	Amostras
1	α-Pinene	7.4920	932	1.171	AE240
2	Camphene	7.8996	946	0.122	
3	Sabinene	8.6130	969	0.734	
4	β-Pinene	9.1338	974	8.567	
5	α-Phellandrene	9.5528	1002	17.348	
6	α-Terpinene	9.8925	1014	0.225	
7	p-Cymene	10.1076	1020	1.885	
8	D-Limonene	10.2775	1024	11.445	
9	γ-Terpinene	11.1720	1054	0.307	
10	Methyl caprylate	13.1536	1123	0.999	
11	Terpinen-4-ol	14.8068	1174	0.519	
12	Sabinol	15.5541	1137	0.365	
13	L-α-bornyl acetate	18.0112	1284	0.419	
14	α-Cubebene	19.8795	1348	0.952	
15	β-Elementen	21.0571	1389	1.318	
16	β-Maaliene	21.5893	1381	1.604	
17	Caryophyllene	21.8724	1417	6.739	
18	β-Copaen-4α-ol	22.0989	1590	0.263	
19	Aromandendrene	22.3820	1439	1.114	
20	Cadina-3,5-diene	22.6537	-	0.365	
21	cis,cis,cis-1,1,4,8-Tetramethyl-4,7,10-cycloundecatriene	22.7669	-	1.762	
22	Alloaromadendrene	22.9594	1455	1.065	
23	δ-Cadinene	23.2538	1522	0.418	
24	γ-Murolene	23.3331	1500	1.141	
25	β-Copaen-4α-ol II	23.4803	1590	2.198	
26	β-Selinene	23.6275	1649	0.635	
27	β-Guaiene	23.6954	1492	0.365	
28	Cadina-3,5-diene	23.7747	-	0.541	
29	Bicyclogermacren	23.8993	1500	9.810	
30	γ-Cadinene	24.3182	1513	3.418	
31	Cadina-3,9-diene	24.5334	-	9.696	
32	Cadine-1,4-diene	24.7711	-	0.555	
33	α-Cadinene	24.8957	1537	0.380	
34	Palustrol	25.7523	1567	0.339	
35	Spathulenol	25.9374	1577	1.587	
36	Viridiflorol	26.3111	1592	0.369	
37	α-Cadinol	27.7718	1644	0.575	
38	Shyobunol	28.7003	1688	0.875	
39	β-Gurjurene	30.7724	-	1.993	
	<b>Total</b>			83.86	

Peak N.	Compound	R <sub>t</sub>	AI <sub>Reference</sub>	%	Amostras
1	1R- $\alpha$ -Pinene	7.4806	-	0.808	AE360
2	Sabinene	8.6016	969	0.409	
3	$\beta$ -Pinene	9.1225	974	6.440	
4	$\alpha$ -Phellandrene	9.5301	1002	12.243	
6	o-Cymene	10.1076	1022	2.116	
7	Pseudolimonene	10.2661	1003	8.774	
8	$\gamma$ -Terpinene	11.1607	1054	0.218	
9	Methyl caprylate	13.1422	1123	0.686	
10	Terpinen-4-ol	14.7954	1174	0.604	
11	Sabinol	15.5427	1137	0.356	
12	L- $\alpha$ -bornyl acetate	18.0112	1284	0.305	
13	$\alpha$ -Cubebene	18.8795	1348	0.912	
14	Neryl acetate	20.1513	1359	0.349	
15	$\alpha$ -Copaene	20.6382	1348	0.794	
16	$\beta$ -Elemene	21.0571	1389	1.108	
17	$\beta$ -Maaliene	21.5893	1381	1.150	
18	Caryophyllene	21.8611	1417	4.901	
19	$\beta$ -Copaen-4 $\alpha$ -ol	22.0989	1590	0.231	
20	Aromandendrene	22.3919	1439	1.109	
21	(+)-epi-Bicyclosesquiphellandrene	22.5518	-	0.270	
22	Cadina-3,5-diene	22.6537	-	0.325	
23	cis,cis,cis-1,1,4,8-Tetramethyl-4,7,10-cycloundecatriene	22.7669	-	1.409	
24	Alloaromadendrene	22.9594	1455	1.018	
25	$\delta$ -Cadinene	23.2538	1522	0.502	
26	$\alpha$ -Muurolene	23.3331	1500	1.385	
27	$\beta$ -Copaen-4 $\alpha$ -ol	23.4803	1590	1.723	
28	$\beta$ -Selinene	23.6275	1649	0.651	
29	$\beta$ -Guaiene	23.6954	1492	0.362	
30	Cadina-3,5-diene	23.7747	-	0.800	
31	Bicyclogermacren	23.8879	1500	8.433	
32	$\gamma$ -Cadinene	24.3182	1513	5.105	
33	$\delta$ -Cadinene	24.5447	1522	14.393	
34	Cadine-1,4-diene	24.7711	-	0.880	
35	$\alpha$ -Cadinene	24.9070	1537	0.681	
36	Geranyl isobutyrate	25.3033	-	0.222	
37	Palustrol	25.7223	1567	0.630	
38	Spathulenol	25.9374	1577	3.127	
39	Epiglobulol	26.0846	-	0.627	
40	Viridiflorol	26.3111	1592	0.842	
41	Ledol	26.5942	1602	0.454	
42	$\alpha$ -Amorphene	27.1490	1483	0.270	
43	Tau.-Muurolol	27.4661	1640	1.787	
44	Guaiac acetate	27.5453	1725	0.489	
45	$\alpha$ -Cadinol	27.7718	1644	1.703	
46	Shyobunol	28.7003	1688	1.250	
47	$\beta$ -Gurjunene	30.7724	-	1.993	
48	Shyobunol	31.7009	1688	0.248	
<b>Total</b>				81.16	

Anexo N°11 Componentes (%) identificados en el aceite esencial de *Schinus molle* L, extraídos a 81.3 °C

Peak N.	Compound	R <sub>t</sub>	AI	%	Amostra
2	1R- $\alpha$ -Pinene	7.4919	-	4.092	AF30
3	Camphene	7.8995	946	0.512	
4	Sabinene	8.6129	969	3.928	
5	L- $\beta$ -Pinene	8.7035	-	0.434	
6	$\beta$ -Pinene	9.1338	974	23.299	
7	$\alpha$ -Phellandrene	9.5527	1002	39.700	
8	o-Cymene	10.1076	1022	2.785	
9	Pseudolimonene	10.2774	1003	22.241	
10	Methyl caprylate	13.1648	1014	0.621	
11	Caryophyllene	21.8610	1003	0.451	
12	<b>Total</b>			96.04	

Peak N.	Compound	R <sub>t</sub>	AI	%	Amostra
1	$\alpha$ -Pinene	6.2561	932	0.365	AF60
2	1R- $\alpha$ -Pinene	7.4920	-	2.146	
3	Camphene	7.8997	946	0.309	
4	Sabinene	8.6130	969	2.971	
5	L- $\beta$ -Pinene	8.7036	-	0.333	
6	$\beta$ -Pinene	9.1339	974	20.808	
7	$\alpha$ -Phellandrene	9.5415	1002	37.432	
8	$\alpha$ -Terpinene	10.1077	1014	3.224	
9	Pseudolimonen	10.2775	1003	23.555	
10	Methyl caprylate	13.1536	1123	1.162	
11	L- $\alpha$ -bornyl acetate	18.0113	1284	0.217	
12	$\beta$ -Elemen	21.0572	1389	0.127	
13	Caryophyllene	21.8611	1417	1.842	
14	$\beta$ -Copaen-4 $\alpha$ -ol	23.4804	1590	0.410	
15	Bicyclogermacren	23.8880	1500	1.205	
16	$\delta$ -Cadinene	24.5221	1522	0.523	
17	<b>Total</b>			94.34	

Peak N.	Compound	R <sub>t</sub>	AI	%	Amostra
1	1r- $\alpha$ -pinene	7.4916	932	1.342	AF120
2	Camphene	7.8992	946	0.206	
3	Sabinene	8.6126	969	1.995	
4	(-)- $\beta$ -pinene	8.7032	-	0.237	
5	$\beta$ -pinene	9.1335	974	15.761	
6	$\alpha$ -phellandrene	9.5524	1002	30.634	
7	<i>p</i> -cymene	10.1073	1020	2.833	
8	Pseudolimonene	10.2884	1003	21.029	
9	$\gamma$ -terpinene	11.1716	1054	0.163	
10	Terpinolene	12.0775	1086	0.256	
11	Linalool	12.4172	1095	0.162	
12	Methyl caprylate	13.1419	1123	1.784	
13	Terpinen-4-ol	14.8064	1174	0.208	
14	Methyl 6-methyloctanoate	15.2593	-	0.175	
15	Sabinyl acetate	15.5537	1289	0.170	
16	Methyl citronellate	17.2295	1257	0.226	
17	Bornyl acetate	18.0108	1284	0.502	
18	Methyl geranate	19.0752	1322	0.146	
19	Copaene	19.8792	1373	0.293	
20	Nerol acetate	20.1622	1359	0.189	
21	Copaene II	20.6491	1373	0.239	
21	$\beta$ -elemen	21.0568	1389	0.479	
22	$\beta$ -Maaliene	21.5890	1381	1.461	
23	Caryophyllene	21.8607	1417	4.967	
24	Aromandendrene	22.3816	1439	0.272	
25	1,1,4,8-tetramethyl-cis,cis,4,7,10-cycloundecatriene	22.7666	-	1.042	
26	Alloaromadendrene	22.9591	1455	0.449	
27	$\gamma$ -Muurolene	23.3327	1500	0.268	
28	$\beta$ -Copaen-4 $\alpha$ -ol	23.4799	1590	1.541	
29	$\beta$ -Selinene	23.6271	1649	0.186	
30	$\beta$ -Guaiene	23.6951	1492	0.175	
31	Bicyclogermacren	23.8876	1500	4.524	
32	$\gamma$ -Cadinene	24.3065	1513	0.576	
33	$\beta$ -Cadinene	24.5217	-	2.116	
34	Spathulenol ou Espatulenol	25.9371	1577	0.511	
35	Tau-Cadinol	27.4657	1638	0.138	
36	Shyobunol	28.7112	1688	0.368	
	<b>Total</b>			91.02	

Peak N.	Compound	R <sub>t</sub>	AI	%	Amostras
1	$\alpha$ -Pinene	6.0251	932	4.869	AF240
2	1R- $\alpha$ -Pinene	7.4919	-	0.661	
3	Sabinene	8.6129	969	0.845	
4	L- $\beta$ -Pinene	8.7035	-	0.123	
5	$\beta$ -Pinene	9.1337	974	8.584	
6	$\alpha$ -Phellandrene	9.5414	1002	16.825	
7	$\alpha$ -Terpinene	9.8924	1014	0.160	
8	<i>p</i> -cymene	10.1075	1020	1.663	
9	D-limonene	10.2774	1024	12.042	
10	$\gamma$ -Terpinene	11.1719	1054	0.230	
11	Terpinolene	12.0778	1086	0.186	
12	Methyl caprylate	13.1335	1123	1.145	
13	Terpinen-4-ol	14.8066	1174	0.487	
14	Sabinyl acetate	15.5540	1289	0.347	
16	3(10)-Caren-4-ol, acetoacetic acid ester	16.6184	-	0.159	
17	Methyl citronellate	17.2185	1257	0.280	
18	L- $\alpha$ -bornyl acetate	18.0111	1284	0.551	
19	Methyl geranate	19.0528	1322	0.208	
20	$\alpha$ -Cubebene	19.8794	1348	0.778	
21	Nerol acetate	20.1625	1359	0.571	
22	Copaene	20.6494	1373	0.707	
23	$\beta$ -Elemen	21.0570	1389	1.162	
24	$\beta$ -Maaliene	21.5892	1381	1.844	
25	Caryophyllene	21.8723	1417	7.517	
26	$\beta$ -Copaen-4 $\alpha$ -ol	22.0988	1590	0.236	
27	Carotol	22.2913	1594	0.181	
28	Aromandendrene	22.3819	1439	0.778	
29	Copaene II	22.5630	1373	0.379	
30	Cadina-3,5-diene	22.6649	-	0.333	
31	1,1,4,8-tetramethyl-cis,cis,4,7,10-cycloundecatriene	22.7668	-	2.059	
32	Alloaromadendrene	22.9593	1455	1.107	
33	Geranyl 2-methylbutyrate	23.1179	1601	0.177	
34	$\delta$ -Cadinene	23.2537	1522	0.341	
35	$\gamma$ -Muurolene	23.3330	1500	0.997	
36	$\beta$ -Copaen-4 $\alpha$ -ol II	23.4802	1590	3.310	
37	$\beta$ -Selinene	23.6274	1649	0.671	
38	$\beta$ -Guaiene	23.7067	1492	0.412	
39	Cadina-3,5-diene II	23.7859	-	0.446	
40	Bicyclogermacrene	23.8992	1500	10.562	
41	8-Isopropenyl-1,5-dimethyl-cyclodeca-1,5-diene $\gamma$ -Cadinene	24.1256	1513	0.399	
42	$\gamma$ -Cadinene	24.3181	1513	2.717	
43	$\beta$ -Cadinene	24.5333	-	7.797	
44	Cedr-8-ene	24.7997	1410	0.587	
45	$\alpha$ -Cadinene	24.8956	1537	0.356	
46	Neryl isobutyrate	25.3259	1490	0.111	
47	$\beta$ -Germacrene	25.4391	1559	0.189	
48	Palustrol	25.7222	1567	0.395	
49	Germacrene D-4-ol	25.8807	1574	0.583	
50	Espatulenol	25.9373	1577	0.723	
51	Epiglobulol	26.0845	-	0.279	
52	Viridiflorol	26.3110	1592	0.408	
53	Ledol	26.5941	1602	0.240	
54	T-Muurolol	27.4660	1640	0.566	
56	$\alpha$ -Cadinol	27.7717	1644	0.518	
57	Shyobunol	28.7002	1688	1.429	
58	2-Hydroxy-2,4,4-trimethyl-3-(3-methylbuta-1,3-dienyl)cyclohexanone	29.2437	-	0.111	
59	$\beta$ -Gurjurene	30.7723	-	1.616	
	<b>Total</b>			86.24	



ESCUELA DE

**POSGRADO**

UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN CRISTÓBAL  
DE HUAMANGA

## CONSTANCIA DE ORIGINALIDAD N°0104-2025-UNSCH-EPG/OGH

El que suscribe; responsable verificador de originalidad de trabajo de tesis de Posgrado en segunda instancia para la **Escuela de Posgrado – UNSCH**; en cumplimiento a la Resolución De Consejo Directivo N°109-2024-UNSCH-EPG/CD, Reglamento de Originalidad de trabajos de Investigación de la UNSCH, otorga lo siguiente:

### CONSTANCIA DE ORIGINALIDAD

<b>AUTOR</b>	Bach. Jesus Javier PANIAGUA SEGOVIA
<b>DENOMINACIÓN DEL PROGRAMA DE ESTUDIOS</b>	MAESTRÍA EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA QUÍMICA
<b>GRADO ACADÉMICO QUE OTORGA</b>	MAESTRO
<b>DENOMINACIÓN DEL GRADO ACADÉMICO</b>	MAESTRO(A) EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA QUÍMICA, MENCIÓN EN INGENIERÍA EN GESTIÓN Y DESARROLLO DE LOS RECURSOS NATURALES
<b>TÍTULO DE TESIS</b>	Grupos funcionales y componentes volátiles del aceite esencial de frutos de molle ( <i>Schinus molle</i> L), que se generan en la extracción por arrastre de vapor
<b>EVALUACIÓN DE ORIGINALIDAD</b>	14% de similitud
<b>N° DE TRABAJO</b>	2769807871
<b>FECHA</b>	03 de octubre de 2025

Por tanto, según los artículos 12, 13 y 17 del Reglamento de Originalidad de Trabajos de Investigación, es procedente otorgar la constancia de originalidad con depósito.

Se expide la presente constancia a solicitud del interesado para los fines que crea conveniente.

03 de octubre de 2025.

  
UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN CRISTÓBAL DE HUAMANGA  
ESCUELA DE POSGRADO  
Dr. Oscar Gutiérrez Huaman  
Director (e)

CC:  
Archivo  
OGH/rjcg

# Grupos funcionales y componentes volátiles del aceite esencial de frutos de molle (*Schinus molle* L), que se generan en la extracción por arrastre de vapor

*por* Jesus Javier PANIAGUA SEGOVIA

---

**Fecha de entrega:** 03-oct-2025 09:57a. m. (UTC-0500)

**Identificador de la entrega:** 2769807871

**Nombre del archivo:** TESIS\_-\_PANIAGUA\_SEGOVIA.docx (13.86M)

**Total de palabras:** 27099

**Total de caracteres:** 146514

# Grupos funcionales y componentes volátiles del aceite esencial de frutos de molle (*Schinus molle* L), que se generan en la extracción por arrastre de vapor

## INFORME DE ORIGINALIDAD

14%

INDICE DE SIMILITUD

11%

FUENTES DE INTERNET

7%

PUBLICACIONES

6%

TRABAJOS DEL ESTUDIANTE

## FUENTES PRIMARIAS

1	Submitted to Universidad Nacional de San Cristóbal de Huamanga	4%
	Trabajo del estudiante	
2	<a href="http://hdl.handle.net">hdl.handle.net</a>	2%
	Fuente de Internet	
3	<a href="http://repositorio.unsch.edu.pe">repositorio.unsch.edu.pe</a>	1%
	Fuente de Internet	
4	<a href="http://docplayer.es">docplayer.es</a>	1%
	Fuente de Internet	
5	<a href="http://www.repositorio.usac.edu.gt">www.repositorio.usac.edu.gt</a>	1%
	Fuente de Internet	
6	<a href="http://tesis.ucsm.edu.pe">tesis.ucsm.edu.pe</a>	1%
	Fuente de Internet	
7	Submitted to unsaac	1%
	Trabajo del estudiante	
8	<a href="http://revistas.unsaac.edu.pe">revistas.unsaac.edu.pe</a>	<1%
	Fuente de Internet	

---

9	Vítor H. Rodrigues, Marcelo M.R. de Melo, Vico Tenberg, Rui Carreira, Inês Portugal, Carlos M. Silva. "Similarity analysis of essential oils and oleoresins of Eucalyptus globulus leaves produced by distinct methods, solvents and operating conditions", Industrial Crops and Products, 2021 Publicación	<1 %
10	<a href="http://repositorio.unsaac.edu.pe">repositorio.unsaac.edu.pe</a> Fuente de Internet	<1 %
11	<a href="http://eprints.uanl.mx">eprints.uanl.mx</a> Fuente de Internet	<1 %
12	<a href="http://repositorio.udea.edu.co">repositorio.udea.edu.co</a> Fuente de Internet	<1 %
13	<a href="http://vsip.info">vsip.info</a> Fuente de Internet	<1 %
14	<a href="http://repositorio.uwiener.edu.pe">repositorio.uwiener.edu.pe</a> Fuente de Internet	<1 %
15	<a href="http://www.alkimed.es">www.alkimed.es</a> Fuente de Internet	<1 %
16	<a href="http://www.slideshare.net">www.slideshare.net</a> Fuente de Internet	<1 %
17	<a href="http://dspace.ueb.edu.ec">dspace.ueb.edu.ec</a> Fuente de Internet	<1 %

---

18	<a href="http://idoc.pub">idoc.pub</a> Fuente de Internet	<1 %
19	<a href="http://pmc.ncbi.nlm.nih.gov">pmc.ncbi.nlm.nih.gov</a> Fuente de Internet	<1 %
20	<a href="http://ricaxcan.uaz.edu.mx">ricaxcan.uaz.edu.mx</a> Fuente de Internet	<1 %
21	Submitted to Universidad Francisco de Paula Santander Trabajo del estudiante	<1 %
22	<a href="http://ciatec.repositorioinstitucional.mx">ciatec.repositorioinstitucional.mx</a> Fuente de Internet	<1 %
23	<a href="http://doi.org">doi.org</a> Fuente de Internet	<1 %
24	<a href="http://repositorio.unap.edu.pe">repositorio.unap.edu.pe</a> Fuente de Internet	<1 %
25	<a href="http://repositorio.upla.edu.pe">repositorio.upla.edu.pe</a> Fuente de Internet	<1 %
26	Submitted to Universidad Wiener Trabajo del estudiante	<1 %
27	<a href="http://es.slideshare.net">es.slideshare.net</a> Fuente de Internet	<1 %
28	<a href="http://repositorio.unsa.edu.pe">repositorio.unsa.edu.pe</a> Fuente de Internet	<1 %

---

Excluir citas

Activo

Excluir coincidencias

< 30 words

Excluir bibliografía

Activo



**ACTA DE SUSTENTACIÓN DE TESIS PARA OPTAR  
EL GRADO ACADÉMICO DE MAESTRO(A) EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA QUÍMICA, MENCIÓN EN  
INGENIERÍA EN GESTIÓN Y DESARROLLO DE LOS RECURSOS NATURALES  
RESOLUCIÓN DIRECTORAL N°00219-2025-UNSCH-EPG/D.**

Siendo las 09:00 a.m. del 16 de abril de 2025 se reunieron en el auditorium de la Escuela de Posgrado de la Universidad Nacional de San Cristóbal de Huamanga, el Jurado Examinador y Calificador de Tesis, presidido por el **Dr. EMILIO GERMAN RAMIREZ ROCA** Director (e) de la Escuela de Posgrado, el **Mg. EUSEBIO DE LA CRUZ FERNANDEZ** Director de la Unidad de Posgrado de la Facultad de Ingeniería Química y Metalurgia, e integrado por los siguientes miembros: **Dra. ALCIRA INERE CORDOVA MIRANDA** y el **Msc. HERNAN PEDRO QUISPE MISAICO**; para la sustentación oral y pública de la tesis titulada: **GRUPOS FUNCIONALES Y COMPONENTES VOLÁTILES DEL ACEITE ESENCIAL DE FRUTOS DE MOLLE (SCHINUS MOLLE L), QUE SE GENERAN EN LA EXTRACCIÓN POR ARRASTRE DE VAPOR**, presentado por el **Bach. JESUS JAVIER PANIAGUA SEGOVIA**. Teniendo como asesor al **Mtro. ABRAHAN FERNANDO TREJO ESPINOZA**.

Acto seguido se procedió a la exposición de la tesis, con el fin de optar el Grado Académico de **MAESTRO(A) EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA QUÍMICA, MENCIÓN EN INGENIERÍA EN GESTIÓN Y DESARROLLO DE LOS RECURSOS NATURALES**. Formuladas las preguntas, éstas fueron absueltas por el graduando.

A continuación, el Jurado Examinador y Calificador de Tesis procedió a la votación, la que dio como resultado el siguiente calificativo: DECISIVA ( 17 ).

**CALIFICACION (x)**

Aprobado(a) por Unanimidad.	X
Aprobado(a) por Mayoría.	-
Desaprobado(a) por Unanimidad.	-
Desaprobado(a) por Mayoría.	-

(x) Marcar con aspa.

Luego, el presidente del Jurado recomienda que la Escuela de Posgrado proponga que se le otorgue al **Bach. JESUS JAVIER PANIAGUA SEGOVIA**, el Grado Académico de **MAESTRO(A) EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA QUÍMICA, MENCIÓN EN INGENIERÍA EN GESTIÓN Y DESARROLLO DE LOS RECURSOS NATURALES**. Siendo las 10:50 a.m. hrs. se levanta la sesión.

Se extiende el acta en la ciudad de Ayacucho, a las 10:50 a.m. hrs. del 16 de abril de 2025.

.....  
**Dr. EMILIO GERMAN RAMIREZ ROCA**  
Director(e) de la Escuela de Posgrado.

.....  
**Mg. EUSEBIO DE LA CRUZ FERNANDEZ**  
Director de la UPG-FIQM

.....  
**Dra. ALCIRA INERE CORDOVA MIRANDA**  
Miembro.

.....  
**Msc. HERNAN PEDRO QUISPE MISAICO**  
Miembro.

.....  
**Dr. JOSE ALARCON GUERRERO**  
Secretario Docente.

**Observaciones:**

.....