

UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA

FACULTAD DE CIENCIAS



TRABAJO DE SUFICIENCIA PROFESIONAL

“Importancia de la espectroscopía infrarrojo en el análisis de identidad de esencias en el proceso de fabricación de fragancias en una empresa de cosméticos”

Para obtener el Título Profesional de:

Licenciado en Química

Elaborado por:

Ivan Benito Delgado Herrada

 [0009-0000-1259-9602](https://orcid.org/0009-0000-1259-9602)

Asesor:

Angélica María Baena Moncada

 [0000-0002-2896-4392](https://orcid.org/0000-0002-2896-4392)

LIMA – PERÚ

2025

Citar/How to cite	Delgado Herrada [1]
Referencia/Reference	[1] I. Delgado Herrada “Importancia de la espectroscopía infrarrojo en el análisis de identidad de esencias en el proceso de fabricación de fragancias en una empresa de cosméticos” [Trabajo de suficiencia profesional]. Lima (Perú): Universidad Nacional de Ingeniería, 2025
Estilo/Style: IEEE (2020)	
Citar/How to cite	(Delgado, 2025)
Referencia/Reference	Delgado, I (2025). “Importancia de la espectroscopía infrarrojo en el análisis de identidad de esencias en el proceso de fabricación de fragancias en una empresa de cosméticos” [Trabajo de suficiencia profesional, Universidad Nacional de Ingeniería]. Repositorio institucional Cybertesis UNI
Estilo/Style: APA (7ma ed.)	

Dedicatoria

A mi familia, quienes son el motor que hace girar mi vida.

Agradecimientos

A todas las personas que me brindaron su apoyo de una u otro forma para poder llevar a cabo este trabajo de suficiencia profesional.

Resumen

El presente trabajo de suficiencia profesional es la respuesta a la velocidad de reacción que se requiere actualmente en todas las industrias, en especial la industria de venta directa como es la de los cosméticos. Haciendo uso de la espectroscópica infrarroja, como análisis de identidad, se busca mejorar el “lead time” de la principal materia prima que participa en el proceso productivo de las fragancias: las esencias.

En una industria muy dinámica como es la cosmética, se requiere asegurar la calidad de los materiales que son utilizados en la producción de fragancias de manera ágil y segura. En este trabajo se propone como método de control el análisis de similitud de los espectros infrarrojo. Se hizo la comparación de los espectros infrarrojos de las diferentes muestras analizadas contra los espectros de patrones establecidos previamente a fin de demostrar que, a través del porcentaje de similitud de los espectros, se puede asegurar que se trata de un mismo material y brindar una rápida respuesta a las solicitudes de planta.

Palabras claves – Espectroscopía infrarroja, control de calidad, proceso, esencias.

Abstract

The present work on professional sufficiency is the response to the speed of reaction currently required in all industries, especially the direct selling industry such as cosmetics. Using infrared spectroscopy, as an identification analysis, we seek to improve the "lead time" of the main raw material that enters the production process of fragrances: the essences.

In a very dynamic industry such as cosmetics, it is necessary to ensure the quality of materials that are used in the production of fragrances in an agile and safe way. In this work we propose as a control method the similarity analysis of infrared spectra. The infrared spectra of the different samples analysed shall be compared against the previously established pattern spectra in order to demonstrate that, through the percentage similarity of the spectra, we can ensure that it is the same material and provide a quick response to plant requests.

Keywords – Infrared spectrometry, quality control, process.

Tabla de contenido

Resumen.....	v
Abstract.....	vi
Introducción.....	xiv
Capítulo I. Parte Introductoria	1
1.1. Generalidades	1
1.2. Descripción del problema de investigación	2
1.3. Objetivos.....	3
1.3.1. Objetivo general	3
1.3.2. Objetivo específico	3
1.4. Hipótesis.....	3
1.5. Antecedentes bibliográficos	3
Capítulo II. Marco Teórico y Marco Conceptual	6
2.1. Marco teórico	6
2.2. Marco conceptual	7
2.2.1. Aceites esenciales.....	7
2.2.2. Linalool.....	7
2.2.3. Hexyl Cinnamal	8
2.2.4. Phenoxanol®.....	9
2.2.5. Acetato de geranilo.....	10
2.2.6. Beta Ionona	11

2.2.7.	Habanolide®.....	11
2.2.8.	Florol	12
2.2.9.	Citronelol	12
2.2.10.	Jasmonal H®.....	13
2.3.	Parámetros fisicoquímicos evaluados en esencias	14
2.3.1.	Densidad	14
2.3.2.	Índice de Refracción.....	17
2.3.3.	Color Gardner o color instrumental.....	19
2.4.	Espectroscopia infrarroja FTIR.....	21
2.4.1.	Momento dipolar.....	21
2.4.2.	El fenómeno de resonancia	22
2.4.3.	Espectrometría de absorción en el infrarrojo medio.....	23
Capítulo III.	Desarrollo del trabajo experimental	25
3.1.	Materiales	25
3.2.	Metodología.....	25
Capítulo IV.	Análisis y discusión de resultados.....	27
4.1.	Resultados experimentales.....	27
4.2.	Análisis de los espectros infrarrojos de los patrones utilizados.	45
4.2.1.	Análisis del espectro infrarrojo de la esencia A lote 0163	45
4.2.2.	Análisis del espectro infrarrojo de la esencia B lote 0377	46
4.2.3.	Análisis del espectro infrarrojo de la esencia C lote.....	47
4.3.	Comparación de los espectros.....	48
4.3.1.	Análisis de comparación de muestras y patrones similares	48

Conclusiones.....	50
Recomendaciones.....	51
Referencias.....	52
Anexos.....	56

Lista de tablas

Tabla 1 *Resumen de las Frecuencias de Grupo para los Grupos Orgánicos*

Funcionales 24

Tabla 2 *Listado de lotes de esencias utilizados en el trabajo de investigación* 26

Tabla 3 *Porcentajes de Similitud de los Espectros de las Muestras de Esencia A Versus Patrón Esencia A Lote 0163* 33

Tabla 4 *Porcentajes de Similitud de los Espectros de las Muestras de Esencia B Versus Patrón Esencia B Lote 0377* 33

Tabla 5 *Porcentajes de Similitud de los Espectros Infrarrojos de las Muestras de Esencia C Versus Espectro Patrón Esencia C Lote 0097* 36

Tabla 6 *Porcentaje de Similitud de los Espectros de las Muestras de Esencia A Versus los Patrones de la Esencia B Lote 0377 y Esencia C Lote 0397* 39

Tabla 7 *Porcentaje de Similitud de los Espectros Infrarrojos de las Muestras de Esencia B Versus los Patrones de la Esencia A Lote 0163 y Esencia C Lote 0397* 42

Tabla 8 *Porcentaje de Similitud de los Espectros de las Muestras de Esencia C Versus los Patrones de la Esencia A Lote 0167 y Esencia B Lote 0377* 45

Lista de figuras

Figura 1	<i>Planta cosméticos ubicada en el Km 31.8 de la Pan. Sur, Lurin. Lima - Perú.</i>	1
Figura 2	<i>Organigrama en el área de calidad</i>	2
Figura 3	<i>Estimación del crecimiento del mercado hacia 2030 a nivel global</i>	7
Figura 4	<i>Enantiómeros del Linalool</i>	8
Figura 5	<i>Estructura Química del Hexyl Cinnamal</i>	9
Figura 6	<i>Estructura del Phenoxanol®</i>	10
Figura 7	<i>Estructura química del acetato de geranilo</i>	10
Figura 8	<i>Estructura de la beta ionona</i>	11
Figura 9	<i>Estructura química del Habanolide®</i>	12
Figura 10	<i>Estructura química del florol</i>	12
Figura 11	<i>Estructura química del Citronellol</i>	13
Figura 12	<i>Estructura Química del 2-Hexyl-3-Fenil-2-Propanal</i>	14
Figura 13	<i>Aerómetro de leche</i>	15
Figura 14	<i>Picnómetro de Vidrio</i>	16
Figura 15	<i>Densímetro D40 de Mettler Toledo</i>	17
Figura 16	<i>Representación de la refracción de un rayo de luz</i>	18
Figura 17	<i>Principio Rector de los Refractómetros</i>	18
Figura 18	<i>Patrones de color Gardner</i>	19
Figura 19	<i>Espacio de color CIELAB</i>	20
Figura 20	<i>Momento dipolar de la molécula de agua</i>	22
Figura 21	<i>Representación gráfica de la obtención de un pico de absorción</i>	23
Figura 22	<i>Espectro IR del patrón de la esencia A lote 0163</i>	28
Figura 23	<i>Espectro IR de patrón de la esencia B lote 0377</i>	29
Figura 24	<i>Espectro IR de patrón de la esencia C lote 0097</i>	30
Figura 25	<i>Comparación de espectros, a) esencia A lote 0143 versus patrón esencia A lote 0163, b) esencia A lote 0216 versus patrón esencia A lote 0163, c) esencia A lote</i>	

0397 versus patrón esencia A lote 0163, d) esencia A lote 0448 versus patrón esencia A lote 01 32

Figura 26 Comparación del espectro de la a) esencia B lote 0044 versus patrón esencia B lote 0377, b) esencia B lote 0106 versus patrón esencia B lote 0377, c) esencia B lote 0399 versus patrón esencia B lote 0377, d) esencia B lote 0861 versus patrón esencia B lote 0377 34

Figura 27 Comparación de espectros a) esencia C lote 0104 versus patrón esencia C lote 0097, b) esencia C lote 0197 versus patrón esencia C lote 0097, c) esencia C lote 0362 versus patrón esencia C lote 0097, d) esencia C lote 0396 versus patrón esencia C lote 0097 35

Figura 28 Comparación del espectro a) esencia A lote 0143 versus patrón esencia B lote 0377, b) esencia A lote 0216 versus patrón esencia B lote 0377, c) esencia A lote 0397 versus patrón esencia B lote 0377, d) esencia A lote 0448 versus patrón esencia B lote 0377 37

Figura 29 Comparación del espectro a) esencia A lote 0143 versus patrón esencia C lote 0097, b) esencia A lote 0216 versus patrón esencia C lote 0097, c) esencia A lote 0397 versus patrón esencia C lote 0097, d) esencia A lote 0448 versus patrón esencia C lote 0097 38

Figura 30 Comparación del espectro a) esencia B lote 0044 versus patrón esencia A lote 0163, b) esencia B lote 0106 versus patrón esencia A lote 0163, c) esencia B lote 0399 versus patrón esencia A lote 0163, d) esencia B lote 0861 versus patrón esencia A lote 016 40

Figura 31 Comparación del espectro a) esencia B lote 0044 versus patrón esencia C lote 0097, b) esencia B lote 0106 versus patrón esencia C lote 0097, c) esencia B lote 0399 versus patrón esencia C lote 0097, d) esencia B lote 0861 versus patrón esencia C lote 0097 41

Figura 32 Comparación del espectro a) esencia C lote 0104 versus patrón esencia A lote 0163, b) espectro de la esencia C lote 0217 versus patrón esencia A lote 0163, c)

espectro de la esencia C lote 0362 versus patrón esencia A lote 0163, d) espectro de la esencia C lote 0396 versus patrón esencia A lote 0163 43

Figura 33 *Comparación del espectro a) esencia C lote 0104 versus patrón esencia B lote 0377, b) esencia C lote 0127 versus patrón esencia B lote 0377, c) esencia C lote 0362 versus patrón esencia B lote 0377, d) esencia C lote 0396 versus patrón esencia B lote 0377..... 44*

Introducción

El análisis de infrarrojo medio es una técnica de espectroscopía ampliamente utilizada para el análisis de diversos materiales. La utilización de esta técnica aplicando un análisis de similitud de espectros es actualmente, ampliamente utilizada en la industria de los alimentos. La necesidad de asegurar la pureza de los materiales comprados para los procesos de producción, y la necesidad que estos sean aprobados para su utilización en los menores tiempos posibles genera la necesidad de buscar técnicas altamente precisas y rápidas.

Capítulo I. Parte Introductoria

1.1. Generalidades

La industria cosmética en Sudamérica ha experimentado un crecimiento exponencial en las últimas décadas, convirtiéndose en un actor clave en el mercado global. El modelo de mercado que manejan generalmente estas empresas es el de venta directa.

Entre las principales industrias cosméticas que encontramos en Sudamérica tenemos a Belcorp cuyas marcas representativas son Ésika, L'Bel y Cyzone; Natura y Yanbal, cuya planta se muestra en la Figura 1. Todas estas tienen una estructura basada en la venta directa a través de consultoras y directoras.

Figura 1

Planta cosméticos ubicada en el Km 31.8 de la Pan. Sur, Lurin. Lima - Perú

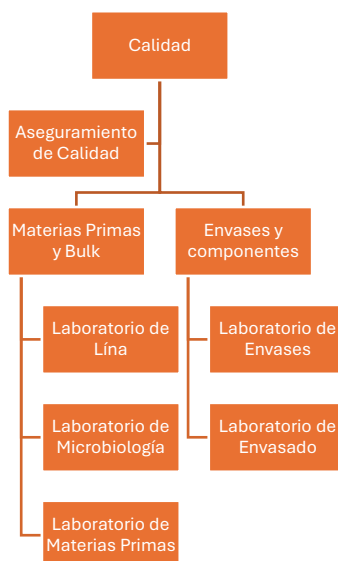


Nota: Tomado del Diario Gestión (Gestión, 2020)

El presente trabajo se realizó en el área de materias primas de una empresa de cosmético, la cual es parte del área de calidad. En la Figura 2 se muestra la estructura de los laboratorios del área de calidad dentro de esta empresa.

Figura 2

Organigrama en el área de calidad



1.2. Descripción del problema de investigación

El control de calidad dentro de la industria cosmética es un costo de calidad de prevención. Este puede generar retrasos en los procesos productivos por los análisis que se realizan durante el proceso de fabricación.

En el proceso de fabricación de fragancia, se controla todas las materias primas que ingresan el proceso productivo como es el caso de las esencias, el alcohol desnaturalizado y el agua utilizada. Esto implica un tiempo de respuesta y un consumo de recursos para tener aprobados los materiales antes de iniciar el proceso productivo.

En una industria en donde se atiende muchas de las veces por reacción, es muy importante contar con los materiales disponibles para poder atender la demanda y evitar roturas de stock, que podría generar disconformidad de parte de nuestros usuarios finales. Es por ello, que se requiere de una metodología rápida y eficiente para asegurar la calidad de las materias primas utilizadas en el proceso productivo, y así, asegurar la calidad final del producto y este esté disponible para su uso en el menor tiempo posible.

De lo antes expuesto, nos planteamos la pregunta: ¿De qué manera, el uso de espectroscopía infrarrojo influye en optimización del proceso de control de calidad de las esencias?

1.3. Objetivos

1.3.1. *Objetivo general*

- Optimizar el proceso de control de calidad de las esencias mediante métodos de espectrometría infrarroja.

1.3.2. *Objetivo específico*

- Demostrar que la metodología infrarroja es adecuada para la identificación de esencias.
- Implementar la metodología infrarroja para la identificación de esencias.

1.4. Hipótesis

Se puede utilizar la espectrofotometría infrarroja como método de análisis de esencias para el control de calidad de las esencias.

1.5. Antecedentes bibliográficos

El concepto de calidad se ha utilizado desde los principios de la civilización. A partir de sus necesidades de supervivencia, los primeros pobladores de la tierra tuvieron que aprender a clasificar que alimentos eran aptos para su consumo y cuáles no. Con el pasar de los siglos, las diversas actividades que desarrollaban requerían de una u otra forma, de toma de decisiones evaluando que opción es la más conveniente y cual la más adecuada para el proceso, como, por ejemplo, los antiguos egipcios, debían trabajar con los mejores productos para poder asegurar la calidad de sus construcciones. Es a principios del siglo XX donde los términos control de calidad y aseguramiento de calidad empiezan a tomar fuerza y a ser estudiados en las universidades más representativas de Estados Unidos. Un pionero en el control de calidad es el Doctor Walter Shewhart, quien, a través de sus gráficos de control, sentó los precedentes del control de calidad. (Elassy, 2015)

En América Latina, el concepto de control de calidad y aseguramiento de calidad va tomando más fuerza. Durante los últimos años, con el acceso a la globalización,

diversas empresas que ingresan al mercado latinoamericano homologan sus requisitos de calidad de estándar mundial, lo que genera un gran aporte a la cultura latinoamericana. El principal objetivo es alcanzar los estándares de calidad establecidos por los clientes y poder satisfacer eficientemente sus necesidades. (Aguilar et al, 2014)

En Perú, son muchas las empresas que actualmente, buscan generar procesos más eficientes con una menor inversión, a fin de poder cumplir con los estándares globales que son requeridos para poder competir con otros productos. Para poder competir, primero deben identificar los requisitos de calidad establecidos por los clientes, alinear sus procesos y sobre todo, tenerlos bajo control, realizar monitoreos constantes y una vez estandarizados, buscar la forma de optimizarlos.

En la industria cosmética, es importante tener todos los procesos estandarizados, debido al impacto de los productos comercializados en la salud de los clientes. Es por ello, que se debe asegurar la calidad desde la recepción de las materias primas, durante el proceso de fabricación, hasta el envasado y entrega al cliente. Por ello, el aseguramiento de la calidad en todos estos procesos es primordial para lograr competir en un amplio mercado con productos de calidad.

El uso del porcentaje de similitud de espectros infrarrojos ha sido utilizado en diferentes investigaciones como una forma de caracterizar los compuestos obtenidos en diferentes procesos de síntesis o extracción.

En su trabajo de tesis, Meza (2016), realiza la extracción de almidón de los residuos de una peladora de papa, para la elaboración de bioplástico. Para caracterizar el almidón obtenido en el proceso de extracción, se realizó la comparación del espectro leído versus el espectro del almidón soluble de la base de datos de Shimadzu, obteniendo un 89.8% de similitud, considerado aceptable para este trabajo de investigación.

En otras investigaciones, también se hace uso de patrones comerciales electrónicos, Por ejemplo, el quitosano, importante polisacárido obtenido de la quitina,

también ha sido caracterizado por espectroscopía de infrarrojo con Transformada de Fourier (FTIR), comparando los espectros obtenidos versus un patrón comercial de la casa Sigma Aldrich (Molina et al., 2017).

Capítulo II. Marco Teórico y Marco Conceptual

2.1. Marco teórico

La industria cosmética es un sector en constante crecimiento, el cual fue afectado por la pandemia, la cual ejerció un duro golpe durante los años 2020 y 2021. Es importante mencionar que la industria cosmética no solo genera un impacto social, sino también en el medio ambiente.

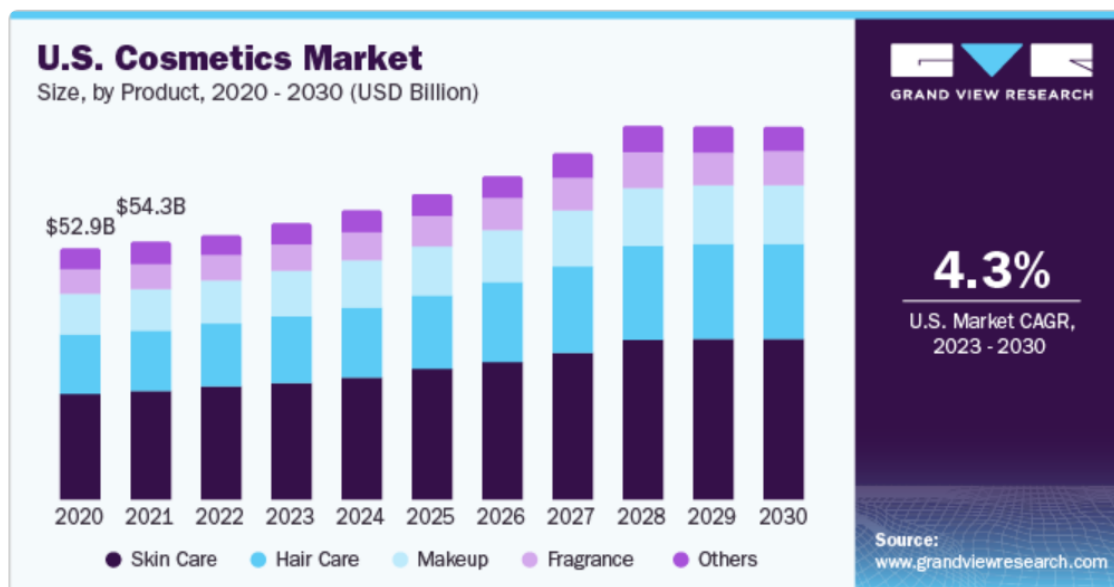
Debemos saber, primero, que la cosmética es una rama de las ciencias de salud que se encarga de mejorar el aspecto personal, cuidando y mejorando la belleza del cabello y la piel de las personas. Tenemos una gran variedad de productos cosméticos que forman parte de los portafolios de las grandes empresas cosméticas a nivel mundial.

Según el Reglamento CE n o 1223/2009 del Parlamento Europeo y del consejo (2009), se define a un producto cosmético como “toda sustancia o mezcla destinada a ser puesta en contacto con las partes superficiales del cuerpo humano (epidermis, sistema piloso y capilar, uñas, labios y órganos genitales externos) o con los dientes y las mucosas bucales, con el fin exclusivo o principal de limpiarlos, perfumarlos, modificar su aspecto, protegerlos, mantenerlos en buen estado o corregir los olores corporales”

La industria cosmética, actualmente está experimentando un proceso recuperación económica luego de ser golpeada por la pandemia. De acuerdo con un informe de Grand View Reserch (2023), el mercado mundial de cosméticos se valora en 262.21 mil millones de dólares en 2022 y se espera un crecimiento aproximado de 4.2% desde el 2023 hasta el 2030. Este crecimiento, que podemos observar en la Figura 3, se base en la utilización de productos naturales en las nuevas formulaciones cosméticas, la mayor preocupación de las personas por el cuidado personal, la percepción de envejecimiento de las personas.

Figura 3

Estimación del crecimiento del mercado hacia 2030 a nivel global



Nota: Tomado de (Reaserch, 2023)

2.2. Marco conceptual

2.2.1. Aceites esenciales

Se define como aceites esenciales a la compleja mezcla que se puede obtener de diversas plantas mediante diferentes tipos de extracción química y tienen como característica principal, un aroma característico. La principal fuente de obtención de aceites esenciales son las plantas aromáticas de las cuales se puede extraer el aceite esencial de diversas partes de la planta. (Ortuño, 2006)

El nombre de aceites esenciales se debe a que su apariencia física es similar a los aceites grasos. Los aceites esenciales son mezclas complejas formadas principalmente por hidrocarburos llamados terpenos y otros compuestos oxigenados. Estos compuestos le dan a cada aceite su aroma característico (Gil & Sáez, 2005).

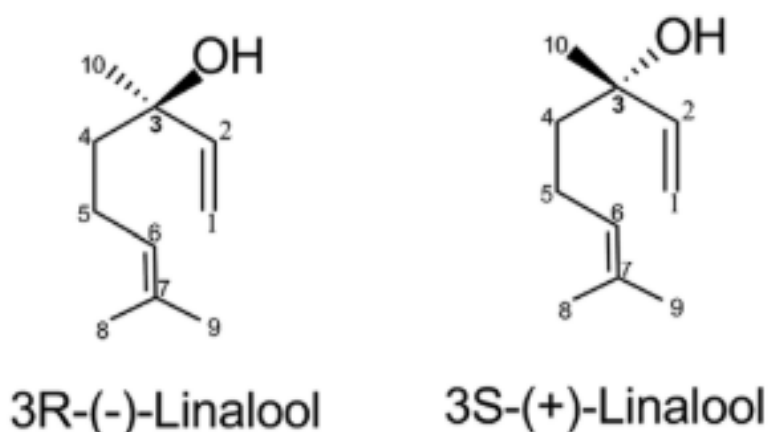
2.2.2. Linalool

El Linalool es un compuesto químico clasificado como monoterpeno acíclico con un grupo alcohol. Este monoterpeno puede ser obtenido de distintas plantas y frutos en la naturaleza. En su estructura química encontramos un carbono quiral en C₃, lo que

genera que tenga dos enantiómeros, los cuales poseen propiedades organolépticas distintas: el (3S)-(+)-linalool, que confiere un olor dulce, floral, con ligeras notas cítricas y el (3R)-(-)-linalool, caracterizado por un aroma amaderado similar a la lavanda. (Aprotosoiaie, et al, 2013). En la Figura 4 podemos observar la estructura de los enantiómeros del Linalool.

Figura 4

Enantiómeros del Linalool



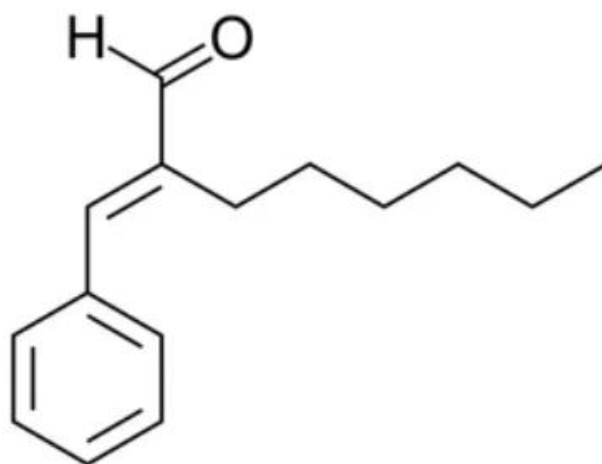
Nota: Tomado de (Aprotosoiaie et al., 2013)

2.2.3. Hexyl Cinnamal

El Hexil Cinnamal es un compuesto orgánico con aroma floral similar a la violeta. Este compuesto es un alergeno altamente conocido, sin embargo, su presenta un bajo nivel de sensibilización a la piel, por lo que es utilizado frecuentemente en estudios como control para determinar actividad de otros alergenosen. (Basketter,et al., 2014). Su estructura se muestra en la Figura 5, donde se puede apreciar la presencia de un grupo aldehído y un anillo aromático.

Figura 5

Estructura Química del Hexyl Cinnamal



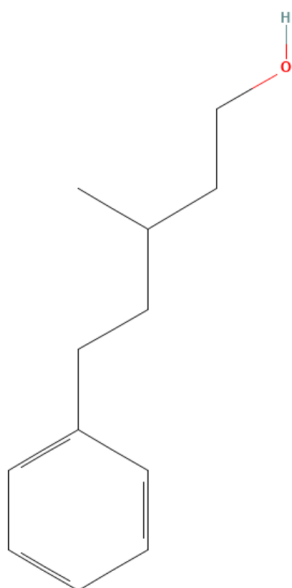
Nota: Tomado de (Shutterstock, 2024)

2.2.4. *Phenoxanol®*

El 3-metil 5-fenil penta-1-ol es un compuesto químico orgánico utilizado en la industria de la perfumería debido a su característico olor fresco floral similar al de una rosa. Una característica de este compuesto, el cual apreciamos en la Figura 6, es que puede formar distintos enantiómeros, sin embargo, aún no se han reportado características sensoriales de estos. (Mateoli et al., 2007) Adicional a ello tiene un olor que tiende a ser duradero por lo que algunas veces es usado como fijador de fragancias.

Figura 6

Estructura del Phenoxanol®



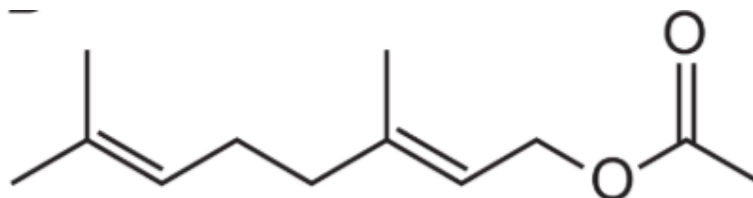
Nota: Tomado de (NIH, 2024)

2.2.5. Acetato de geranilo

El acetato de geranilo, el cual se puede observar en la Figura 7, es un monoterpeno que se encuentran en los aceites esenciales extraídos de diferentes plantas. Aparte de sus características organolépticas por los que es comúnmente usado en perfumería, este monoterpeno presenta acción farmacológica en el tratamiento de cáncer de colon y cáncer de estómago. (Qi et al., 2018)

Figura 7

Estructura química del acetato de geranilo



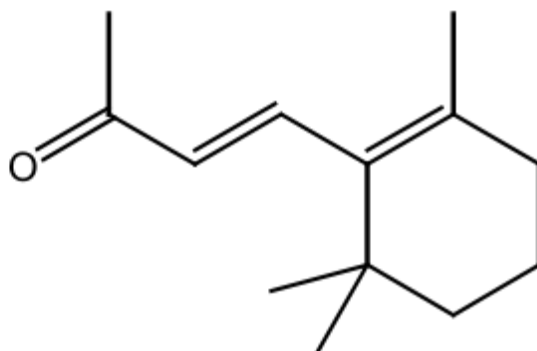
Nota: Tomado de (Qi et al., 2018)

2.2.6. **Beta Ionona**

La beta-ionona, también conocida como β -ionona o 4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexenil)-3-buten-2-ona, es un compuesto que se encuentra en pequeñas cantidades en la naturaleza. Esta cetona cíclica o cicloalquenona, que se muestra en la Figura 8, posee un anillo de 6 carbonos, un grupo carbonilo y 3 enlaces dobles, los que les confieren sus propiedades. Este producto entra en concentraciones de 2% al 4% en las formulaciones cosméticas. Se caracteriza por su olor maderoso y a violeta. (Lalko, et al., 2007)

Figura 8

Estructura de la beta ionona



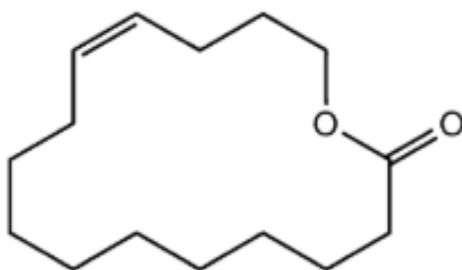
Nota: Tomado de (Lalko et al., 2007)

2.2.7. **Habanolide®**

Conocido como 1,7,7-trimetil-3-(4-metilfenil)-3-hidroxibenzo[b]furan-2-ona, es una lactona furoacetona, muy utilizado en la industria cosmética. Se caracteriza por su aroma almizcle, ligeramente floral con toques de madera. (Teixeira et al., 2012). Su estructura se puede observar en la Figura 9.

Figura 9

Estructura química del Habanolide®



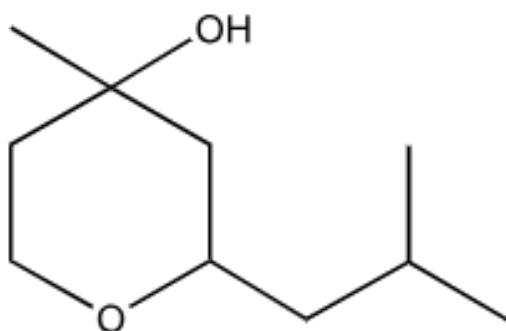
Nota: Tomado de (Teixeira et al., 2012)

2.2.8. Florol

Es un compuesto, cuya estructura se puede observar en la Figura 10, muy estable utilizado para la preparación de perfumes. Tiene una nota floral fresca que no cambia el carácter de las fragancias, lo que la hace un compuesto ideal para reemplazar los aldehídos florales menos estables.

Figura 10

Estructura química del florol



Nota: Tomado de (Firmenich, 2021)

2.2.9. Citronelol

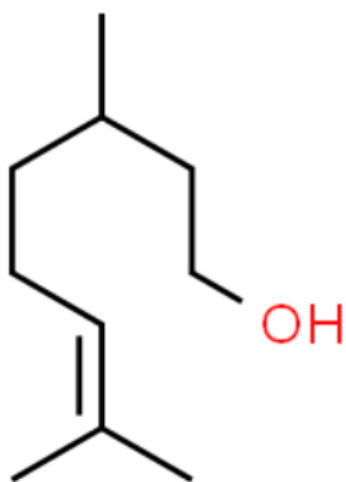
El citronelol es un alcohol monoterpreno que se encuentra en la naturaleza en las plantas del género *Cymbopogon*. Este tiene un agradable olor floral, fresco, el cual tiene buena perduración por la poca permeabilidad de este compuesto en la piel. Adicional a

su agradable aroma, se ha demostrado que funciona muchas funciones farmacológicas. Entre ellas, una de las más importantes es que funciona como anticonvulsivo. (Santos et al., 2018)

Químicamente hablando, 3,7-dimethyl-6-Octen-1-ol es un monoterpenoide acíclico y un alcohol terciario, cuya estructura se puede observar en la Figura 11.

Figura 11

Estructura química del Citronellol



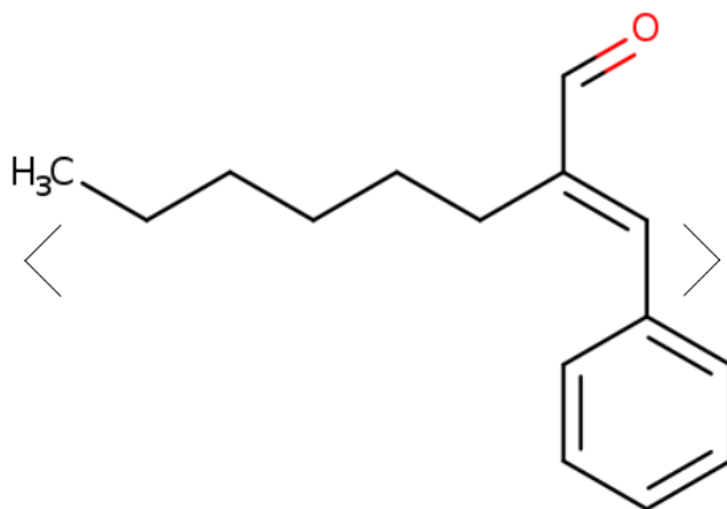
Nota: Tomado de (Royal Society of Chemistry, 2024)

2.2.10. Jasmonal H®

Químicamente, el Jasmonal H® es el compuesto 2-Hexyl-3-Fenil-2-Propanal es un aldehído con un olor característico a jazmín y floral. Es utilizado en perfumería y también, en algunas ocasiones como saborizante. (Scentree, 2023). Este compuesto posee un anillo bencénico en su estructura, como podemos observar en la Figura 12.

Figura 12

Estructura Química del 2-Hexyl-3-Fenil-2-Propanal



Nota: Tomado de (Scentspiracy, 2024)

2.3. Parámetros fisicoquímicos evaluados en esencias

El control de calidad dentro del proceso industrial de fabricación de perfumes es muy importante para asegurar la calidad de los productos entregados a los consumidores. Este se lleva a cabo desde la recepción de las materias primas, como es el caso de las esencias, el alcohol desnaturalizado o el agua purificada que ingresa en los procesos de elaboración hasta el control del producto en proceso y el producto terminado antes del envasado y después del envasado.

Los principales parámetros que se controla dentro del proceso de producción de perfumes son los que se muestran a continuación:

2.3.1. Densidad

La densidad es definida como el cociente entre la masa y el volumen. La densidad es una propiedad termo física que se vincula directamente a otras propiedades físicas que son utilizadas para comprender la naturaleza y comportamiento de los líquidos como es la viscosidad, el coeficiente de expansión térmica o la tensión superficial. (Wang, et al., 2024)

Para la medición de la densidad existen distintos métodos entre los que encontramos:

Areómetro: Este instrumento trabaja en función del principio de flotabilidad en función de la masa postulado por Arquímedes. Este es un flotador que contiene un vástago graduado como se observa en la Figura 13, cuyo nivel de inmersión varía de acuerdo con la densidad del líquido en el que es sumergido.

Figura 13

Aerómetro de leche



Nota: Los aerómetros se rigen según distintas normas internacionales dependiendo del uso que se les dará. En el caso del aerómetro de la imagen, es un aerómetro de leche conforme a la norma NF B 35-522. Tomado de (Biolab, 2024)

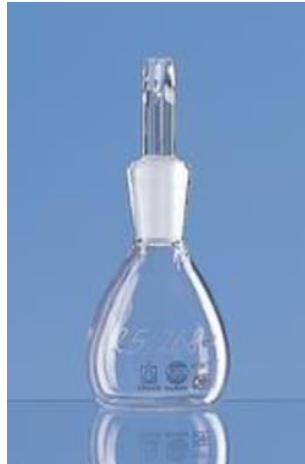
Una desventaja que presentan estos instrumentos es que se requiere de una gran cantidad de muestra (más de 100 mL.) para ser utilizados. Además, es difícil de leer en el caso de muestras oscuras o muy viscosas.

Picnómetro: Este instrumento, que se muestra en la Figura 14, se basa en el principio de gravimetría. El volumen del picnómetro es determinado con agua, y luego se coloca la muestra dentro de este, se pesa y conociendo los valores de masa y volumen, se puede calcular la densidad. Este instrumento es más preciso que el areómetro, sin embargo,

es una técnica que requiere de mucho tiempo y personal calificado por lo complicado de la operación de pesaje.

Figura 14

Picnómetro de Vidrio



Nota: Tomado de (Fisher Scientific , 2024)

Oscilador de tubo en U: Este método se basa en el principio que la frecuencia de oscilación de un material está en función de la masa. Esta metodología es utilizada actualmente en los densímetros digitales, como el mostrado en la Figura 15, en los cuales, la muestra se llena en un capilar en forma de U y es inducida por oscilaciones piezoeléctricas o magnéticas. Este principio permite mediciones más precisas, requiere de menores volúmenes y para la industria son muy útiles ya que las mediciones se pueden automatizar.

Figura 15

Densímetro D40 de Mettler Toledo



Nota: El densímetro D40 de Mettler Toledo utiliza el principio de oscilador de tubo en U para realizar las mediciones de densidad en distintos tipos de muestras fluidas. Tomado de (Mettler Toledo, 2024)

2.3.2. Índice de Refracción

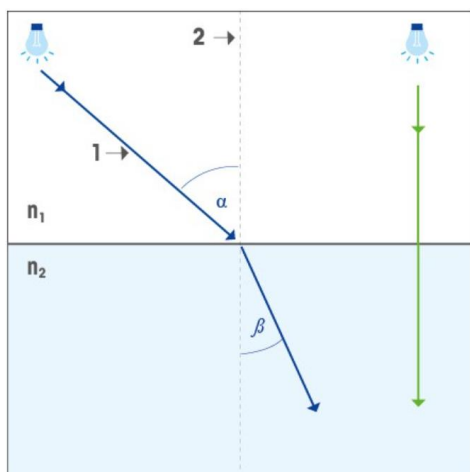
El índice de refracción es una propiedad óptica que se define como el cociente de la velocidad de la luz en el aire y la velocidad de la luz en la sustancia que estamos analizando. (Tipler & Mosca, 2005)

Este parámetro fisicoquímico, basado en la ley de Snell, es utilizado en la industria para poder asegurar la pureza y concentración de muestras líquidas y adicional puede ser utilizado para caracterizar diferentes muestras de acuerdo con las necesidades que requiera cada industria como: alimentos y bebidas (grados Brix para medir contenido de azúcar) y productos químicos (punto de congelación, concentraciones entre otros)

La ley de Snell, cuya representación se muestra en la Figura 16, es una relación matemática que postula que existe una relación entre los ángulos de incidencia y de refracción con los índices de refracción de los medios que participan. La relación que existe entre estos es según la fórmula que se muestra en la figura

Figura 16

Representación de la refracción de un rayo de luz

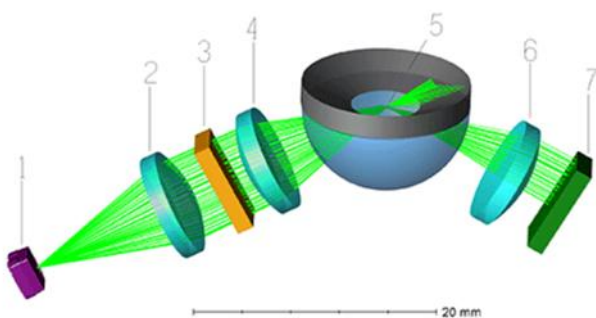


Nota: Tomado de (Mettler Toledo, 2024)

Actualmente, para las mediciones de índice de refracción, las empresas utilizan refractómetros digitales, los cuales se desarrollaron según la ley de Snell. Estos equipos cuentan con una fuente de luz, la cual normalmente es un diodo emisor de luz (LED). Este haz de luz pasa por un filtro de polarización, un filtro de interferencia y unas lentes focales llegando al prisma de zafiro donde se encuentre depositada la muestra. La luz reflejada pasa por otra lente focal hasta llegar al sensor óptico, el cual determinará el ángulo crítico. Una representación de este recorrido puede ser observada en la Figura 17.

Figura 17

Principio Rector de los Refractómetros



Nota: “La fuente de luz (1) es un diodo emisor de luz (LED). El haz de LED emitido pasa

a través de un filtro de polarización (2), un filtro de interferencia (3) y lentes focales (4) antes de llegar a la muestra a través del prisma de zafiro (5).

La luz reflejada (ángulo de incidencia > ángulo crítico) se desvía mediante una lente (6) al sensor óptico de CCD (7) que determina el ángulo crítico". Tomado de (Mettler Toledo, 2024)

2.3.3. Color Gardner o color instrumental

El color es un atributo organoléptico importante dentro del control de calidad de las esencias como de las fragancias. La medición de color de forma sensorial no es objetiva y nos puede llevar a errores, por ello la importancia de trabajar con una técnica que nos permita estandarizar los parámetros de control con respecto al color.

La escala de color Gardner, mostrada en la Figura 18, fue diseñada para la medición de aceites, barnices y distintas resinas que se caracterizan por tener coloración del amarillo al marrón. Es por ello, que esta escala va del 1 al 18 siendo el 1 un amarillo tenue y el 18 un marrón oscuro.

Figura 18

Patrones de color Gardner

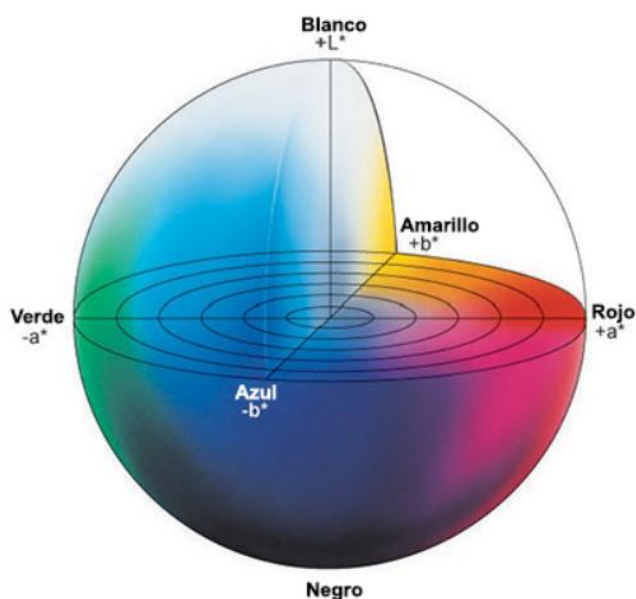


Nota: Esta escala establece una gradación de amarilleamiento del 1 al 18, siendo 1 amarillo claro y 18 marrón oscuro. Tomado de (EYCOS, 2024)

Otra escala utilizada para poder estandarizar los colores es la escala CIELAB, el cual es un espacio, como podemos observar en el Figura 19, utilizado para poder expresar el color utilizando algún tipo de anotación. Las coordenadas $L^*a^*b^*$ se diseñaron en base a la teoría de oposición de color, la cual nos indica que un color rojo no puede ser verde al mismo tiempo, y de forma similar, un color amarillo no puede ser azul en el mismo instante. Por tanto, L^* indica luminosidad y, a^* y b^* son las coordenadas cromáticas.

Figura 19

Espacio de color CIELAB



Nota: El espacio de color $L^*a^*b^*$ fue modelado en base a una teoría de color oponente que establece que dos colores no pueden ser rojo y verde al mismo tiempo o amarillo y azul al mismo tiempo. Tomado de (Konica Minolta, 2024)

Para la medición de color podemos utilizar colorímetros o espectrofotómetros que nos aseguren lecturas en el rango visible de longitudes de onda entra 400nm y 700 nm. Estos instrumentos de mediciones pueden detectar diferencias que no son perceptibles por el ojo humano.

2.4. Espectroscopia infrarroja FTIR

La espectroscopia infrarroja es una técnica no destructiva, que es utilizada para la identificación de sustancias, así como para obtener información acerca de las estructuras moleculares de estas. (Velandia, 2017)

Esta técnica es utilizada en la industria y en la investigación científica para la identificación de las estructuras y la composición molecular de las muestras.

El principio de esta técnica no destructiva es la incidencia de un rayo de luz infrarroja sobre una muestra. La luz infrarroja se absorbe a determinadas frecuencias específicas que están asociadas a las energías de enlace vibratorio interatómico de las moléculas. El enlace absorbe energía cuando existe equivalencia entre la energía de enlace vibratorio y la radiación infrarroja.

El resultado del análisis de una muestra por espectrofotometría infrarroja FTIR es un espectro de absorción de infrarrojo, el cual nos proporcionará abundante información acerca de la estructura y composición molecular de la muestra. Al ser cada banda de absorción característico de un tipo de enlace, y al tener cada estructura molecular diferentes enlaces, podemos decir que el espectro de absorción de infrarrojo es la “huella digital” de esta muestra.

2.4.1. *Momento dipolar*

Para poder entender el principio de la absorción de radiación del infrarrojo en distintas muestras, tenemos que explicarlo a través del concepto de momento dipolar. El momento dipolar es la propiedad eléctrica más importante asociada a la distribución de cargas dentro de una molécula. Esta es consecuencia de la distribución asimétrica de los electrones dentro de una molécula. Para poder medir el momento dipolar, consideramos el producto de dos variables, las cargas y la distancia entre los dos átomos. (Val-Castillo, 2024)

Figura 20

Momento dipolar de la molécula de agua



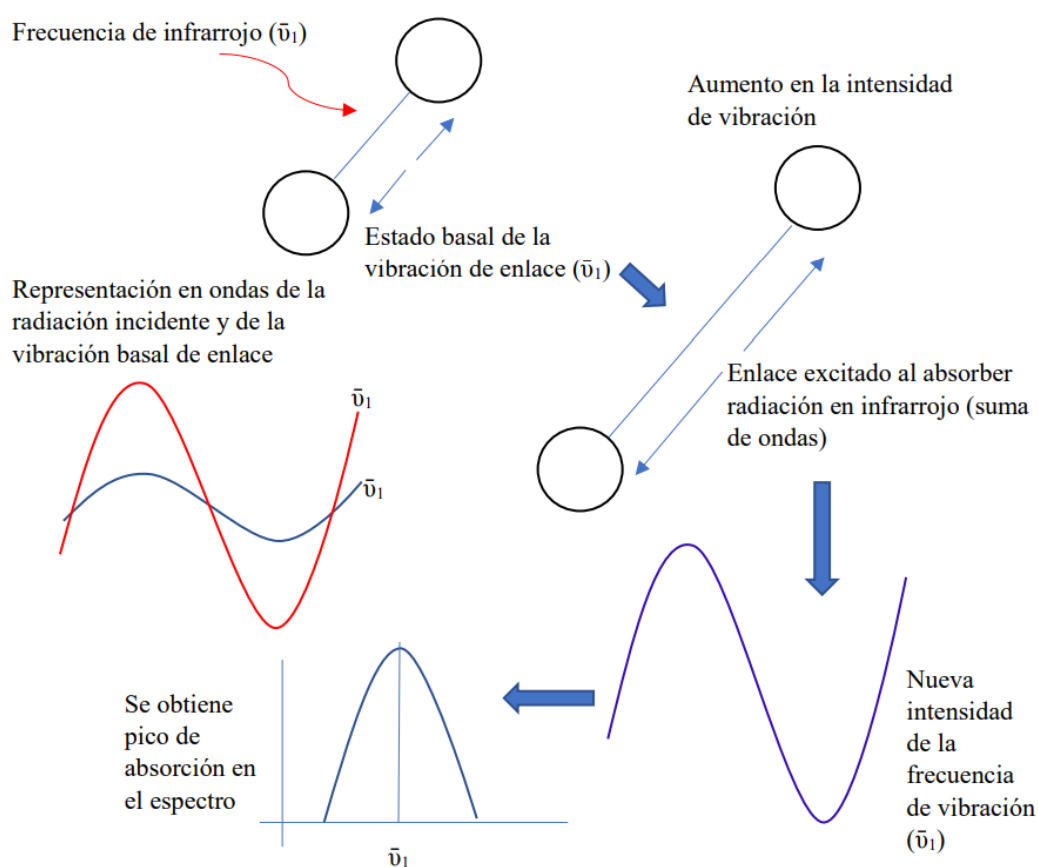
Nota: Tomado de (Blog PUCP, 2024)

2.4.2. El fenómeno de resonancia

Otro requerimiento importante para que pueda existir la absorción de energía en el espectro infrarrojo es que las frecuencias de vibración basal de enlace y la frecuencia de la radiación infrarroja incidente absorbida tengan frecuencias similares como se observa en la Figura 21. Este fenómeno de alineamiento de ambas frecuencias es conocido como resonancia. Así, cuando un enlace absorbe energía infrarroja, la energía vibracional del enlace aumenta generando una banda en el espectro infrarrojo. Este es el principio utilizado en la espectroscopía infrarroja. Por ello, dependiendo de la banda que se genera o de la energía de incidencia, se puede tener información acerca de los enlaces que se encuentran en la muestra. (Mondragón, 2020)

Figura 21

Representación gráfica de la obtención de un pico de absorción



Nota: "Representación gráfica de la obtención de un pico de absorción a partir de un enlace atómico en un espectro de infrarrojo y su relación con la resonancia de frecuencia basal de enlace ($\bar{\nu}_1$) y frecuencia de infrarrojo incidente ($\bar{\nu}_1$)". Tomado de (Mondragón, 2020)

2.4.3. Espectrometría de absorción en el infrarrojo medio

La espectrometría de absorción en el infrarrojo medio es una de las principales técnicas utilizadas para poder predecir las estructuras de los compuestos químicos. Estas se basan en las absorbancias de radiación infrarrojo en diferentes longitudes de onda asociados al tipo de estructura y por ende a variables como masa de los átomos participantes de los enlaces y de la constante de fuerza de los enlaces entre ellos. Esta rara vez permanece constante debido a la influencia de otras vibraciones de estos mismos átomos y de otros átomos. (Skoog et al., 2008)

A continuación, se presenta los principales grupos funcionales y las frecuencias a las cuales absorben en la región del infrarrojo medio:

Tabla 1

Resumen de las Frecuencias de Grupo para los Grupos Orgánicos Funcionales

Enlace	Tipo de compuesto	Frecuencia (cm ⁻¹)
C-H	Alcanos	2850 - 2950
		1340 - 1370
C-H	Alquenos	3010 - 3085
		675 - 995
C-H	Alquinos	3300
C-H	Anillos aromáticos	3010 - 3100
		690 - 900
O-H	Alcoholes monoméricos, fenoles	3590 - 3650
	Alcoholes con puente hidrógeno	3200 - 3600
	Ácidos carboxílicos monoméricos	3500 - 3650
	Ácidos carboxílicos con puente hidrógeno	2500 - 2700
N-H	Aminas, amidas	3300 - 3500
C=C	Alquenos	1610 - 1680
C=C	Anillos aromáticos	1500 - 1600
C=C	Alquinos	2100 - 2260
C-N	Aminas, amidas	1180 - 1360
C=N	Nitrilos	2210 - 2280
C-O	Alcoholes, éteres, ácidos carboxílicos, ésteres	1050 - 1300
	Alcoholes, cetonas, ácidos carboxílicos, ésteres	1690 - 1760

Nota: Tomado de (Skoog, Holler, & Crouch, 2008)

Capítulo III. Desarrollo del trabajo experimental

3.1. Materiales

Para llevar a cabo la presente investigación, se trabajó con un espectrofotómetro Infrarrojo de la marca Perkin Elmer, modelo Frontier IR, con el software Spectrum S para realizar las lecturas de los espectros infrarrojos. El software Spectrum S está diseñado para proporcionar un entorno seguro en el que la configuración de los instrumentos y la recopilación y distribución de datos se controlan de acuerdo con los requisitos de 21 CFR parte 11.

Para poder demostrar que el análisis por espectrofotometría infrarrojo es ideal para la caracterización de esencias, se trabaja con 3 tipos de esencias: esencia A, esencia B y esencia C. Para cada tipo de esencia, se realizó la lectura por espectroscopía infrarroja de un lote patrón y cuatro lotes de línea. Se realizó la comparación en el software obteniéndose un porcentaje de similitud en los espectros.

3.2. Metodología

Para poder probar la hipótesis, se trabajó con 3 esencias distintas: esencia A, esencia B y esencia C. Para cada tipo de esencia se contó con una muestra patrón y cuatro muestras de línea, las cuales fueron analizadas en el espectrofotómetro y luego comparadas entre sí para ver el porcentaje de similitud entre los espectros. Para considerar que se trata de la misma esencia, se propone como porcentaje de similitud mínimo 99.00%

En la Tabla 2 se puede observar las esencias y los lotes que participaron en esta prueba.

Tabla 2

Listado de lotes de esencias utilizados en el trabajo de investigación

	Esencia A	Esencia B	Esencia C
M. Patrón (lote)	0163	0377	0097
M. Línea (lote)	0143	0044	0104
M. Línea (lote)	0216	0106	0197
M. Línea (lote)	0397	0399	0362
M. Línea (lote)	0448	0861	0396

Capítulo IV. Análisis y discusión de resultados

4.1. Resultados experimentales

Una vez diseñado el experimento, inicialmente se leyeron los espectros de los patrones de las esencias A (figura 22), esencia B (figura 23) y esencia C (figura 24).

Figura 22

Espectro IR del patrón de la esencia A lote 0163

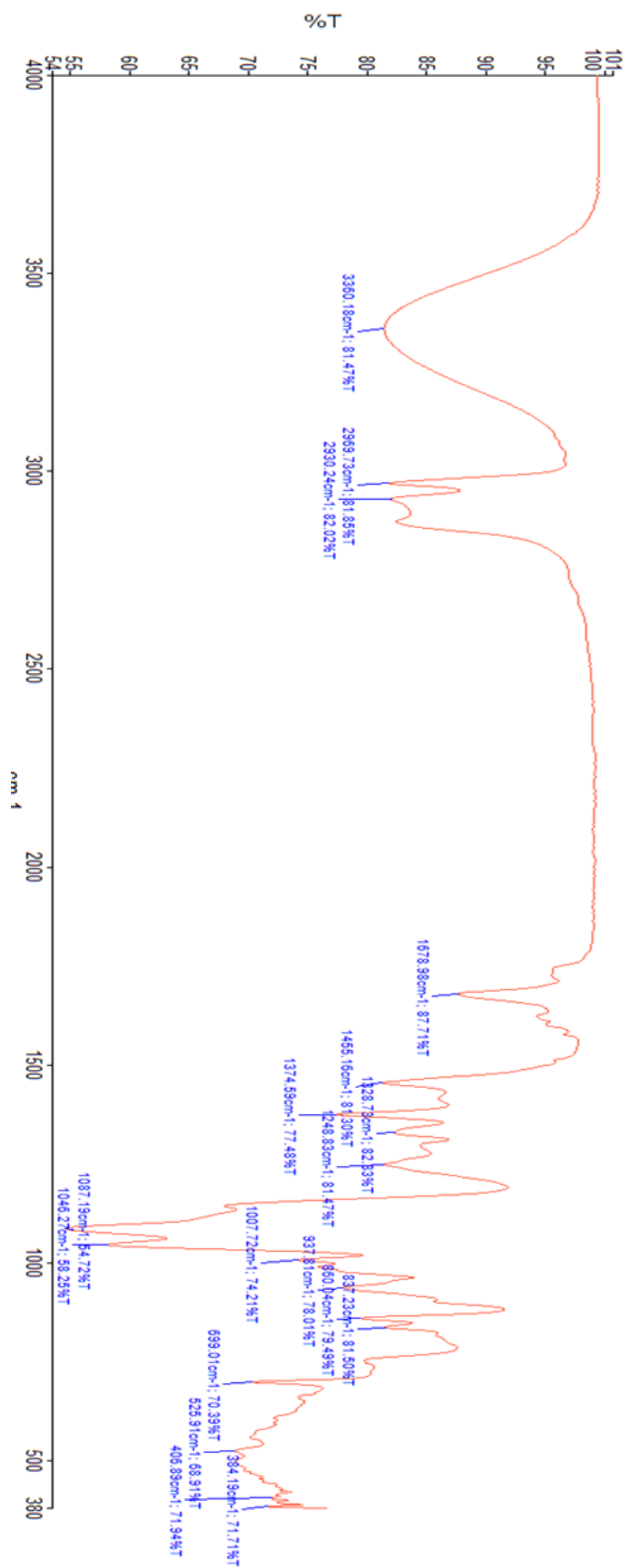


Figura 23

Espectro IR de patrón de la esencia B lote 0377

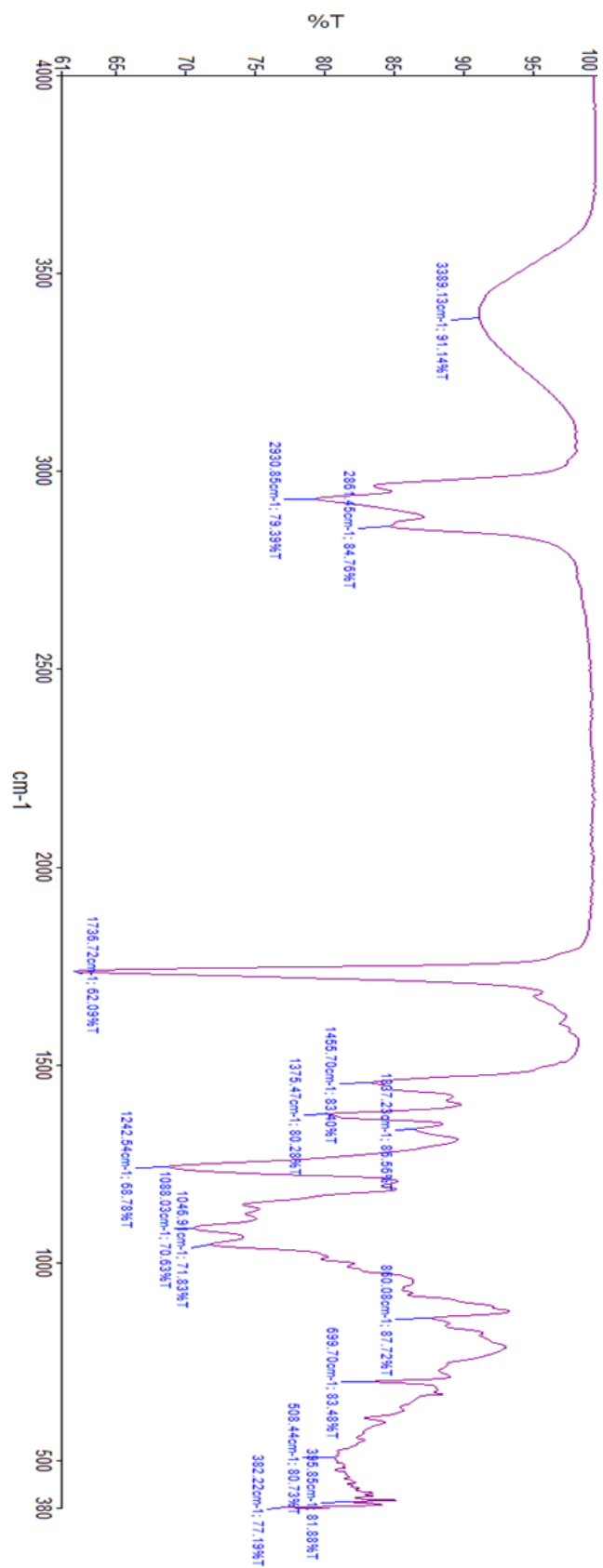
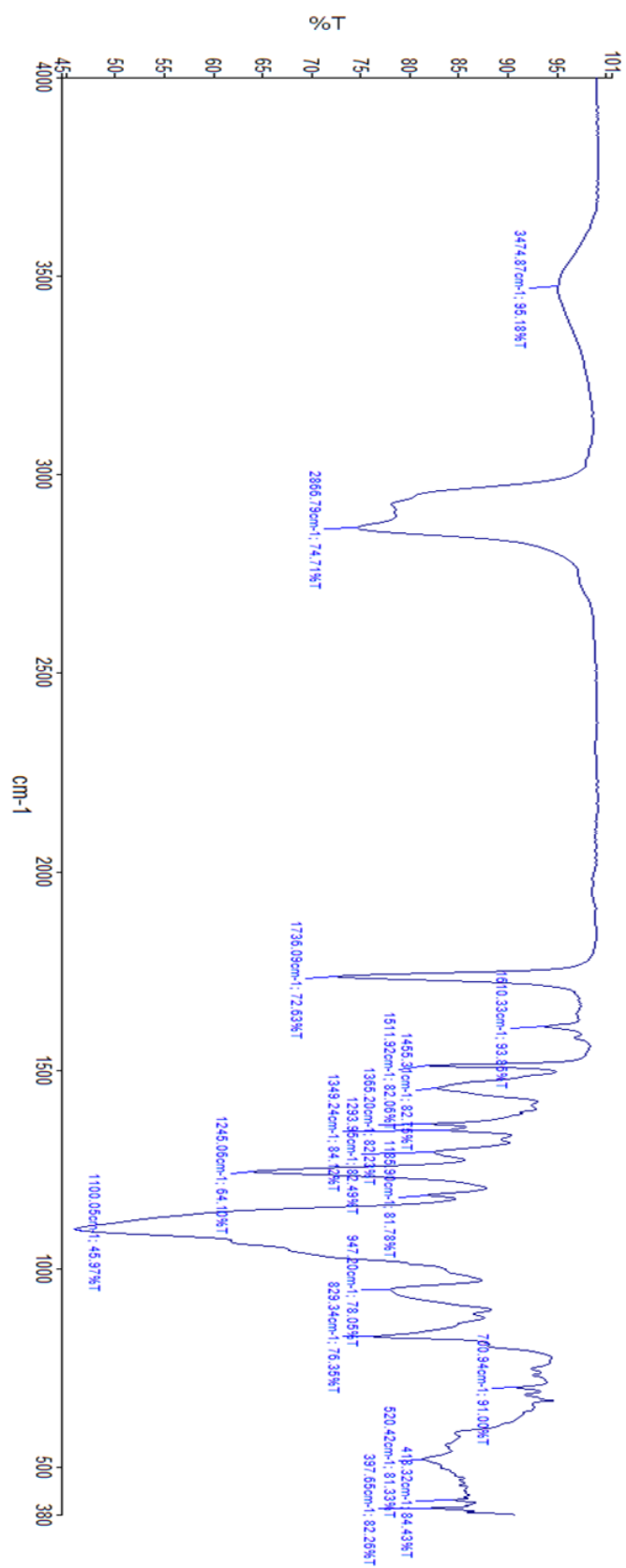


Figura 24

Espectro IR de patrón de la esencia C lote 0097

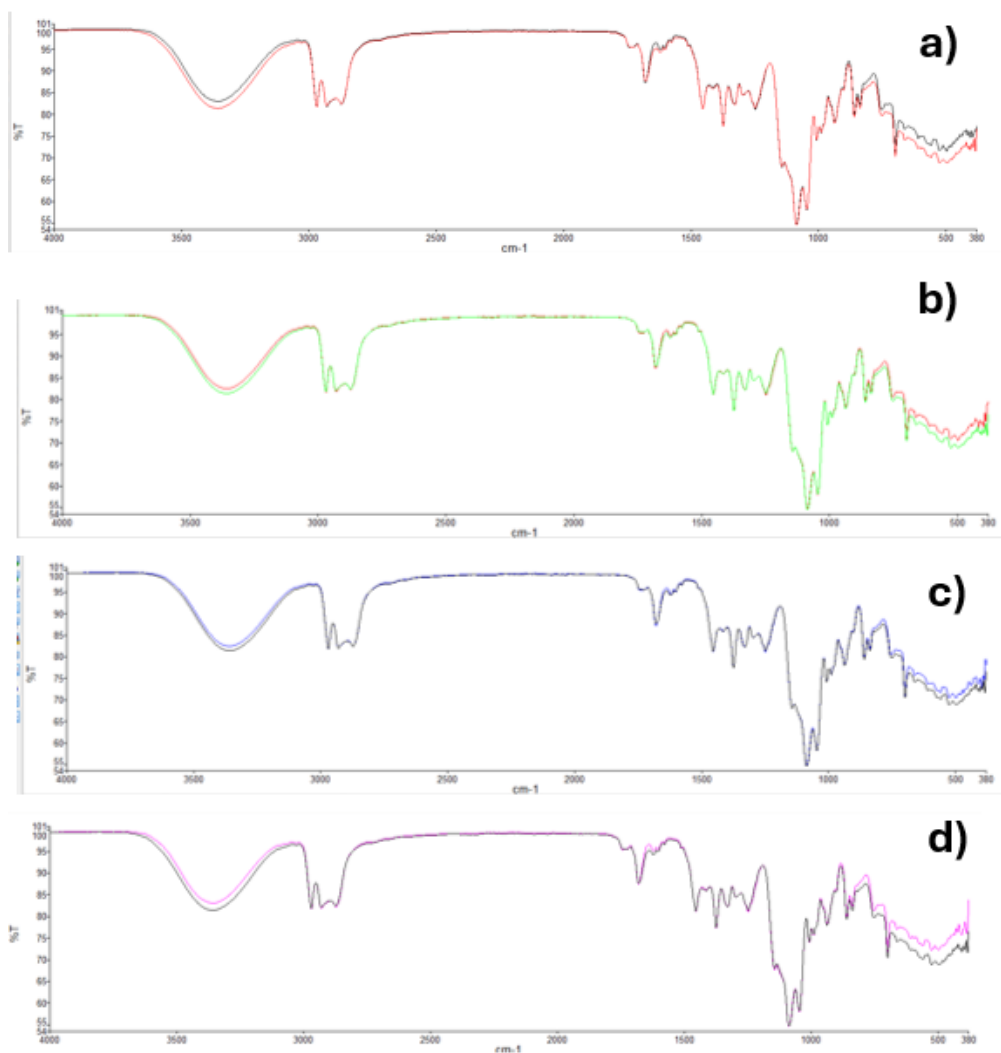


Una vez diseñado el experimento, se procedió a leer los espectros de las 12 esencias de línea en mención y se procedió a comparar el porcentaje de similitud de cada espectro contra los patrones electrónicos ya establecidos.

A continuación, se muestra las comparaciones de los lotes 0143; 0216; 0397 y 0448, todos ellos de la esencia A contra el espectro de la esencia A lote patrón 0163.

Figura 25

Comparación de espectros, a) esencia A lote 0143 versus patrón esencia A lote 0163, b) esencia A lote 0216 versus patrón esencia A lote 0163, c) esencia A lote 0397 versus patrón esencia A lote 0163, d) esencia A lote 0448 versus patrón esencia A lote 01



Así tenemos que los porcentajes de similitud de los espectros de los cuatro lotes de línea de la esencia A contra el patrón lote 0163 se encuentran por encima del 99.00% de similitud. Los resultados se muestran en la tabla 3.

Tabla 3

Porcentajes de Similitud de los Espectros de las Muestras de Esencia A Versus Patrón Esencia A Lote 0163

Lote	Patrón	% Similitud
0143	0163	99.7253
0216	0163	99.8025
0397	0163	99.8252
0448	0163	99.7205

De forma similar se trabajó con la esencia B. Se realizaron las lecturas de las muestras por espectroscopía infrarroja y se procedió a realizar la comparación de espectros. Las figuras 26 a-d muestran las comparaciones de los lotes 0044; 0106; 0399 y 0861 versus el patrón esencia B lote 0377. En la tabla 4, se observa los valores de porcentaje de similitud de los espectros de las esencias de los cuatro lotes de línea B versus el patrón lote 0377.

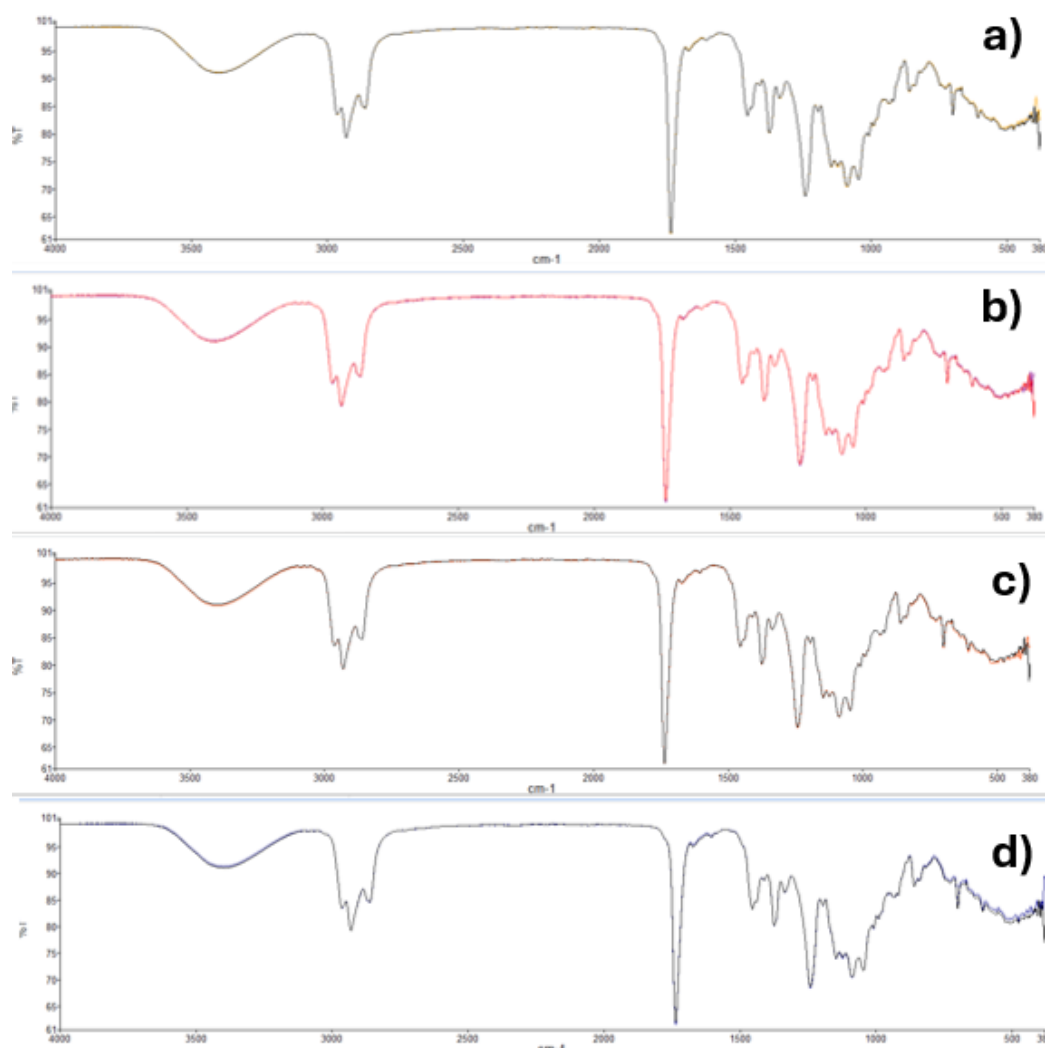
Tabla 4

Porcentajes de Similitud de los Espectros de las Muestras de Esencia B Versus Patrón Esencia B Lote 0377

Lote	Patrón	% Similitud
0044	0377	99.7253
0106	0377	99.8025
0399	0377	99.8252
0861	0377	99.7205

Figura 26

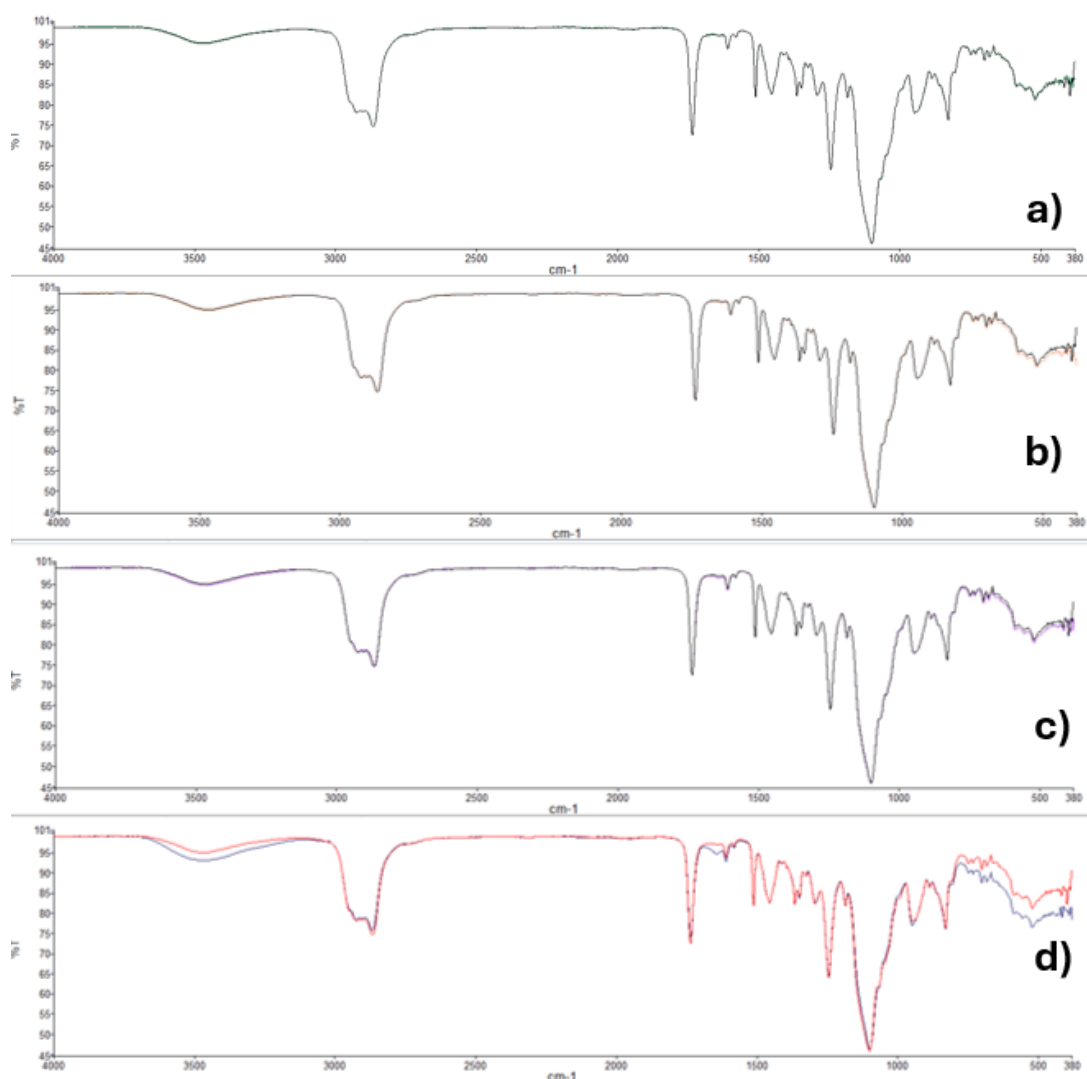
Comparación del espectro de la a) esencia B lote 0044 versus patrón esencia B lote 0377, b) esencia B lote 0106 versus patrón esencia B lote 0377, c) esencia B lote 0399 versus patrón esencia B lote 0377, d) esencia B lote 0861 versus patrón esencia B lote 0377



Para la esencia C se realizó el mismo ejercicio de comparación de los espectros de infrarrojo medio de las cuatro esencias de línea (lote 0127, lote 0362, Lote 0104 y lote 0396) y se compararon versus el patrón lote 0097. La comparación de los espectros de las muestras y patrón de la esencia C se muestran en las figuras 27a-d

Figura 27

Comparación de espectros a) esencia C lote 0104 versus patrón esencia C lote 0097, b) esencia C lote 0197 versus patrón esencia C lote 0097, c) esencia C lote 0362 versus patrón esencia C lote 0097, d) esencia C lote 0396 versus patrón esencia C lote 0097



Los resultados obtenidos de la comparación de las muestras de esencia C versus el patrón lote 0097 se muestra en la tabla 5

Tabla 5

*Porcentajes de Similitud de los Espectros Infrarrojos de las Muestras de Esencia C
Versus Espectro Patrón Esencia C Lote 0097*

Lote	Patrón	% Similitud
0104	0097	99.7253
0197	0097	99.8025
0362	0097	99.8252
0396	0097	99.7205

Como segunda etapa de la investigación, se procedió a comparar los espectros de las esencias A versus los patrones de las esencias B y esencias C obteniéndose los siguientes espectros.

Figura 28

Comparación del espectro a) esencia A lote 0143 versus patrón esencia B lote 0377, b) esencia A lote 0216 versus patrón esencia B lote 0377, c) esencia A lote 0397 versus patrón esencia B lote 0377, d) esencia A lote 0448 versus patrón esencia B lote 0377

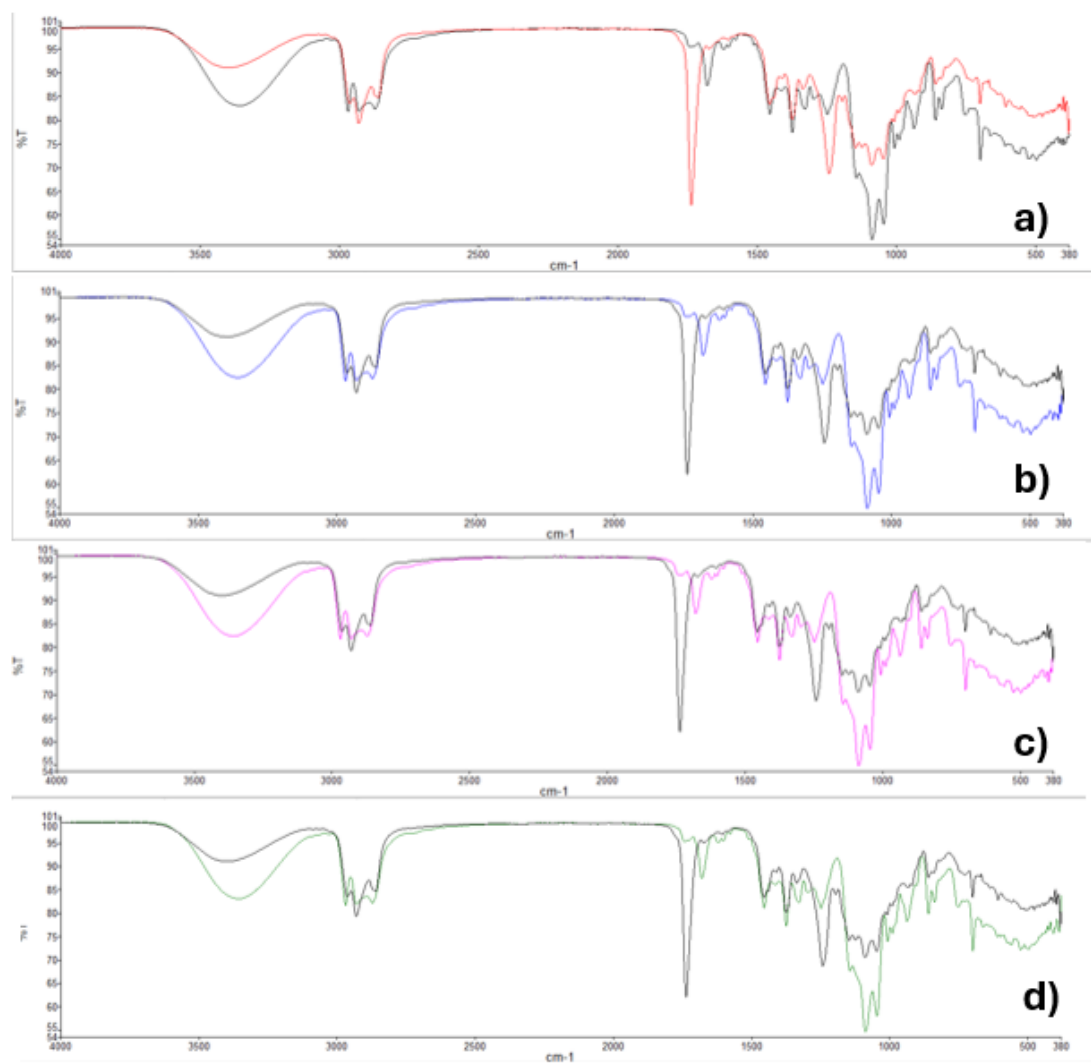
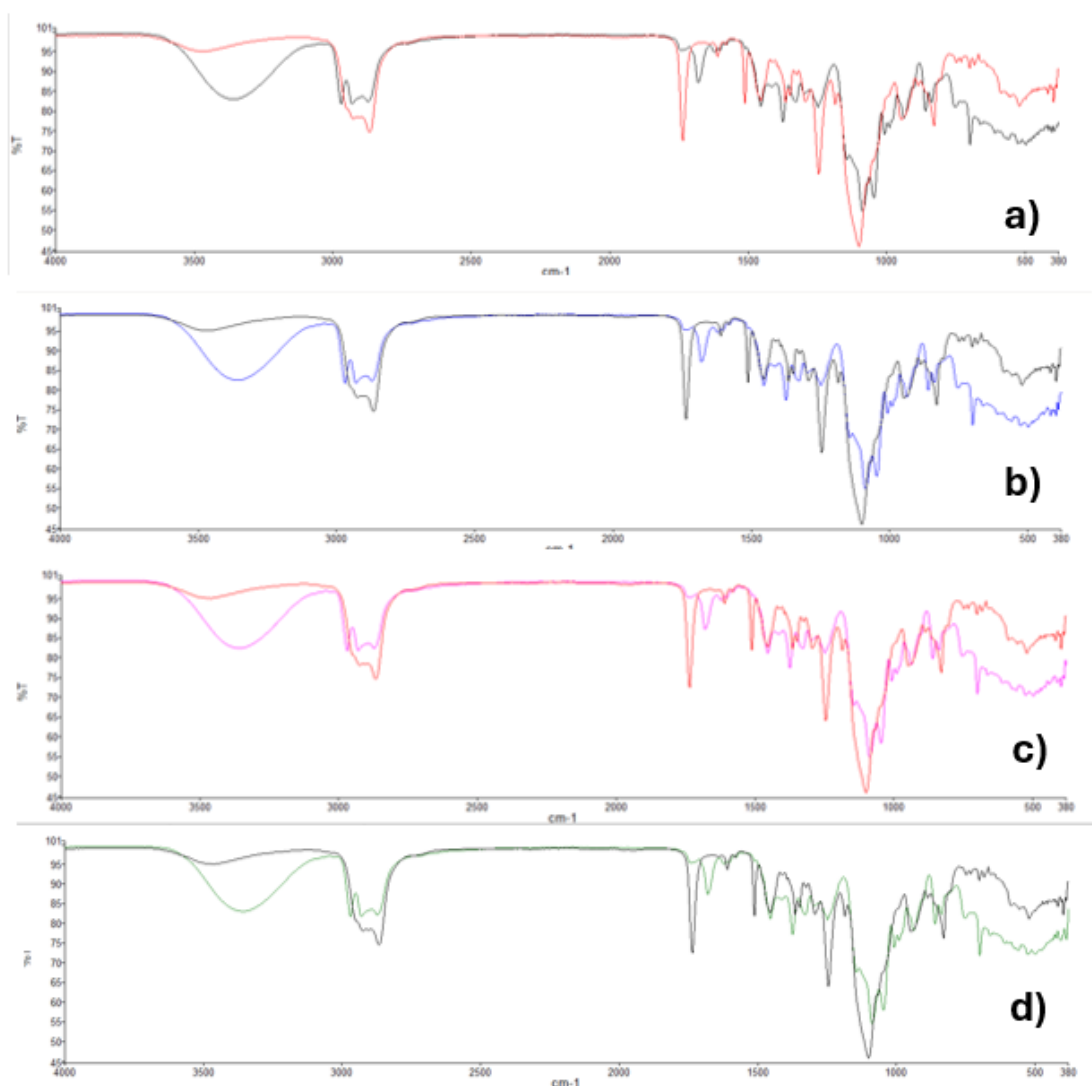


Figura 29

Comparación del espectro a) esencia A lote 0143 versus patrón esencia C lote 0097, b) esencia A lote 0216 versus patrón esencia C lote 0097, c) esencia A lote 0397 versus patrón esencia C lote 0097, d) esencia A lote 0448 versus patrón esencia C lote 0097



El resultado del porcentaje de similitud de los espectros infrarrojos al comparar las muestras de esencia A versus los patrones de la esencia B y la esencia C se muestra en la tabla 6

Tabla 6

Porcentaje de Similitud de los Espectros de las Muestras de Esencia A Versus los Patrones de la Esencia B Lote 0377 y Esencia C Lote 0397

Lote	%	%
	Similitud Esencia B	Similitud Esencia C
0143	42.3407	32.8799
0216	42.1917	32.8286
0397	42.1862	32.7144
0448	42.3103	32.9192

A continuación, para las muestras de la esencia B realizamos la misma comparación, pero esta vez con los patrones de las esencias A y C obteniendo los espectros infrarrojos que se muestran a continuación.

Figura 30

Comparación del espectro a) esencia B lote 0044 versus patrón esencia A lote 0163, b) esencia B lote 0106 versus patrón esencia A lote 0163, c) esencia B lote 0399 versus patrón esencia A lote 0163, d) esencia B lote 0861 versus patrón esencia A lote 016

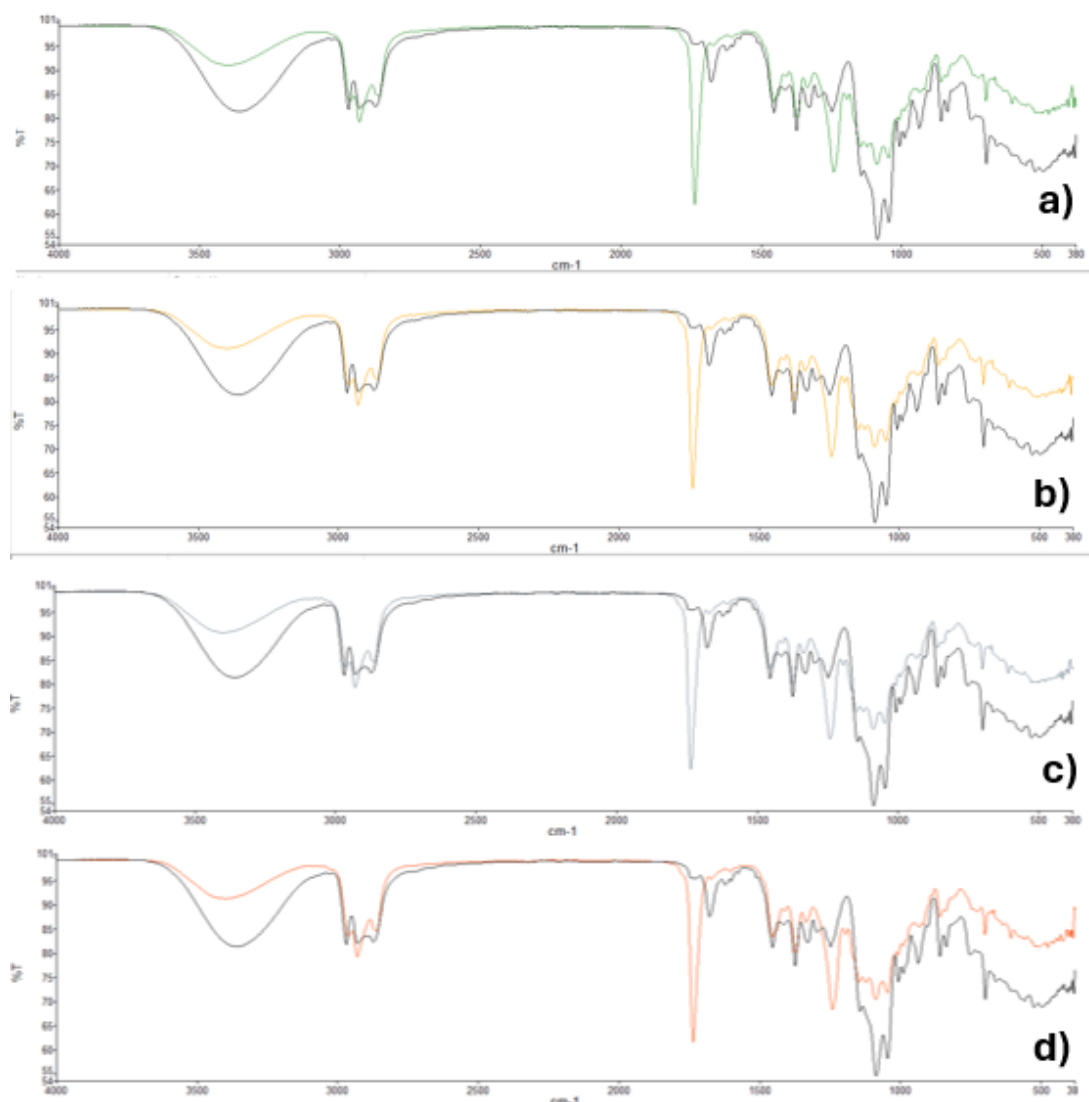
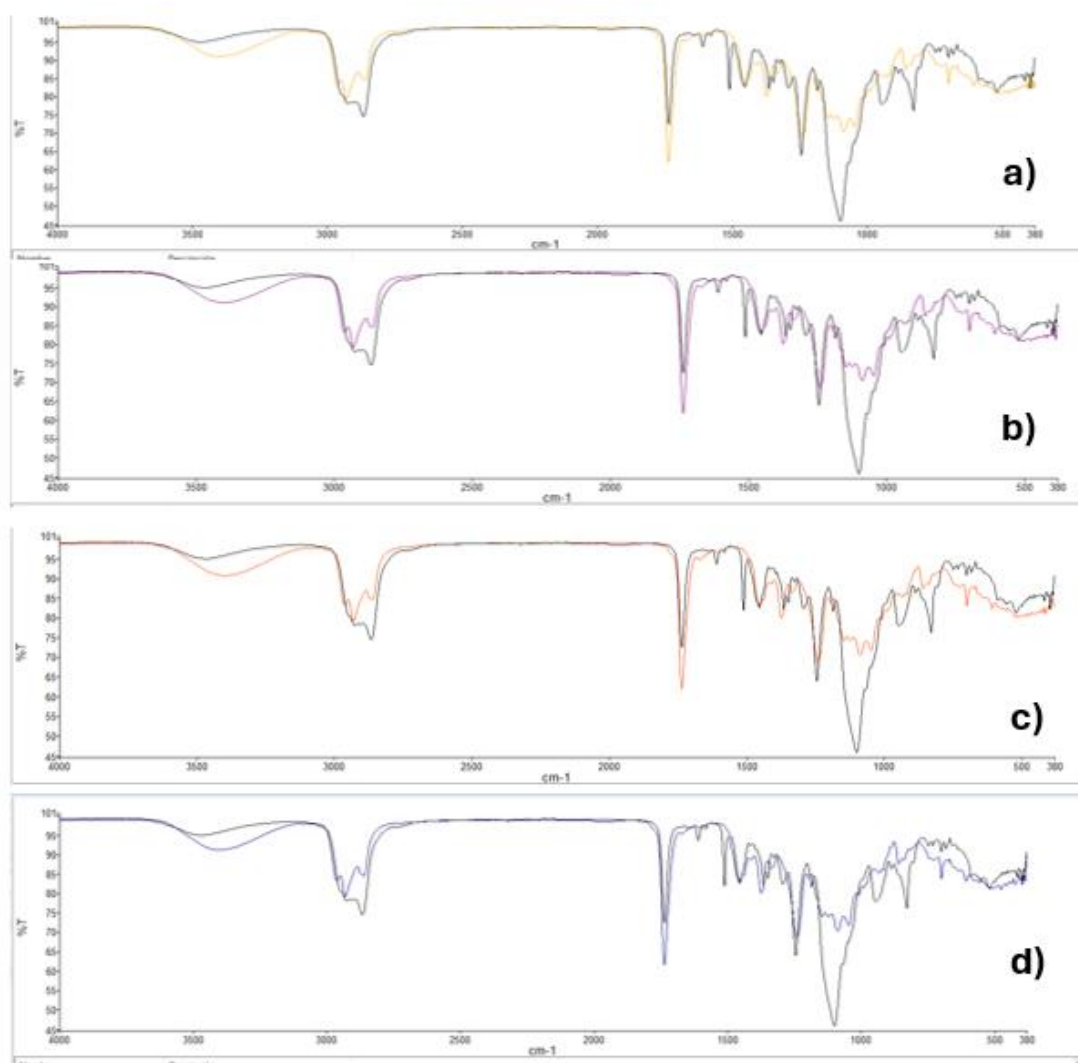


Figura 31

Comparación del espectro a) esencia B lote 0044 versus patrón esencia C lote 0097, b) esencia B lote 0106 versus patrón esencia C lote 0097, c) esencia B lote 0399 versus patrón esencia C lote 0097, d) esencia B lote 0861 versus patrón esencia C lote 0097



Los resultados de las comparaciones de los espectros infrarrojos de los lotes de línea de la esencia B versus los patrones de la esencia A y la esencia C se muestran en la tabla 7

Tabla 7

*Porcentaje de Similitud de los Espectros Infrarrojos de las Muestras de Esencia B
Versus los Patrones de la Esencia A Lote 0163 y Esencia C Lote 0397*

Lote	%	%
	Similitud Esencia A	Similitud Esencia C
0044	41.7076	68.3847
0106	41.3654	68.4161
0399	41.7176	68.2793
0861	41.2671	68.4953

Por último, se realizó la comparación de los espectros infrarrojos de las esencias de línea de la esencia C contra los espectros infrarrojos de los patrones de la esencia A y la esencia B, obteniéndose las comparaciones que se muestran a continuación.

Figura 32

Comparación del espectro a) esencia C lote 0104 versus patrón esencia A lote 0163, b) espectro de la esencia C lote 0217 versus patrón esencia A lote 0163, c) espectro de la esencia C lote 0362 versus patrón esencia A lote 0163, d) espectro de la esencia C lote 0396 versus patrón esencia A lote 0163

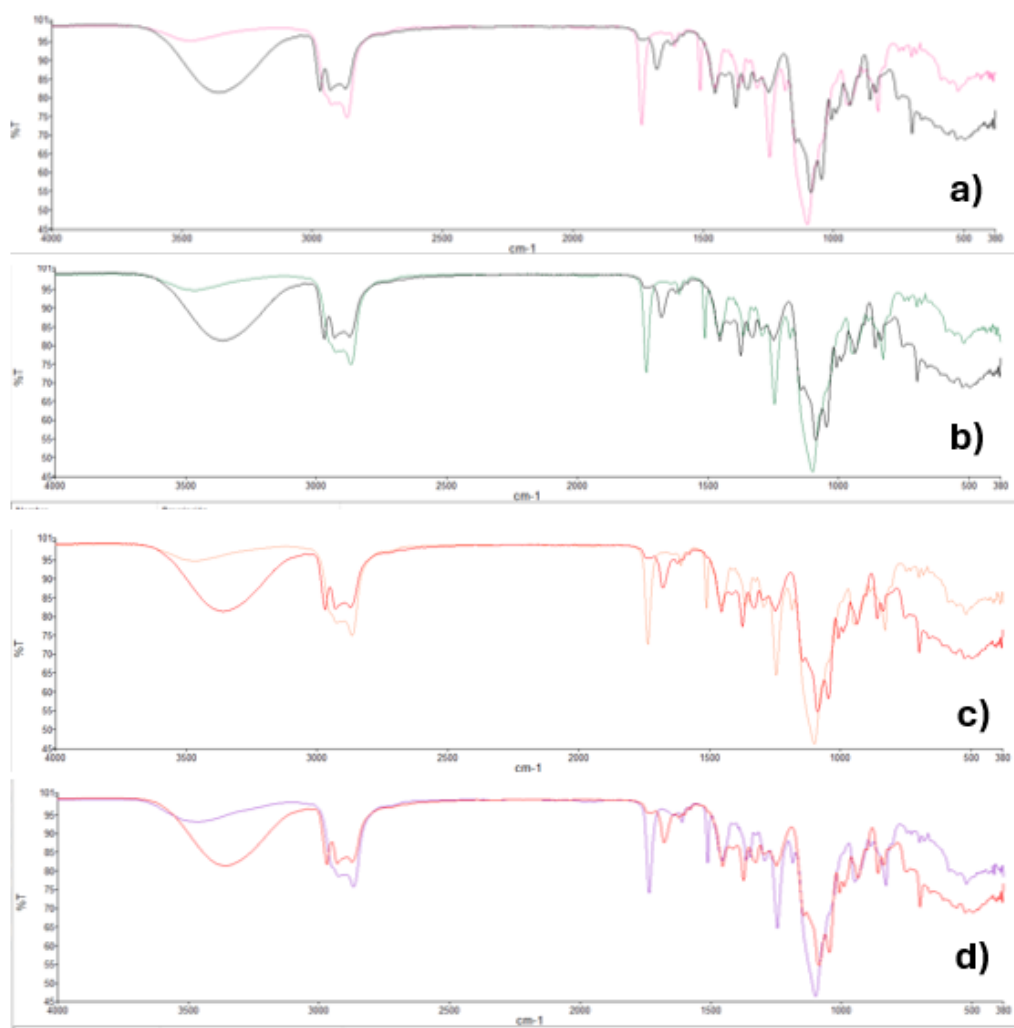
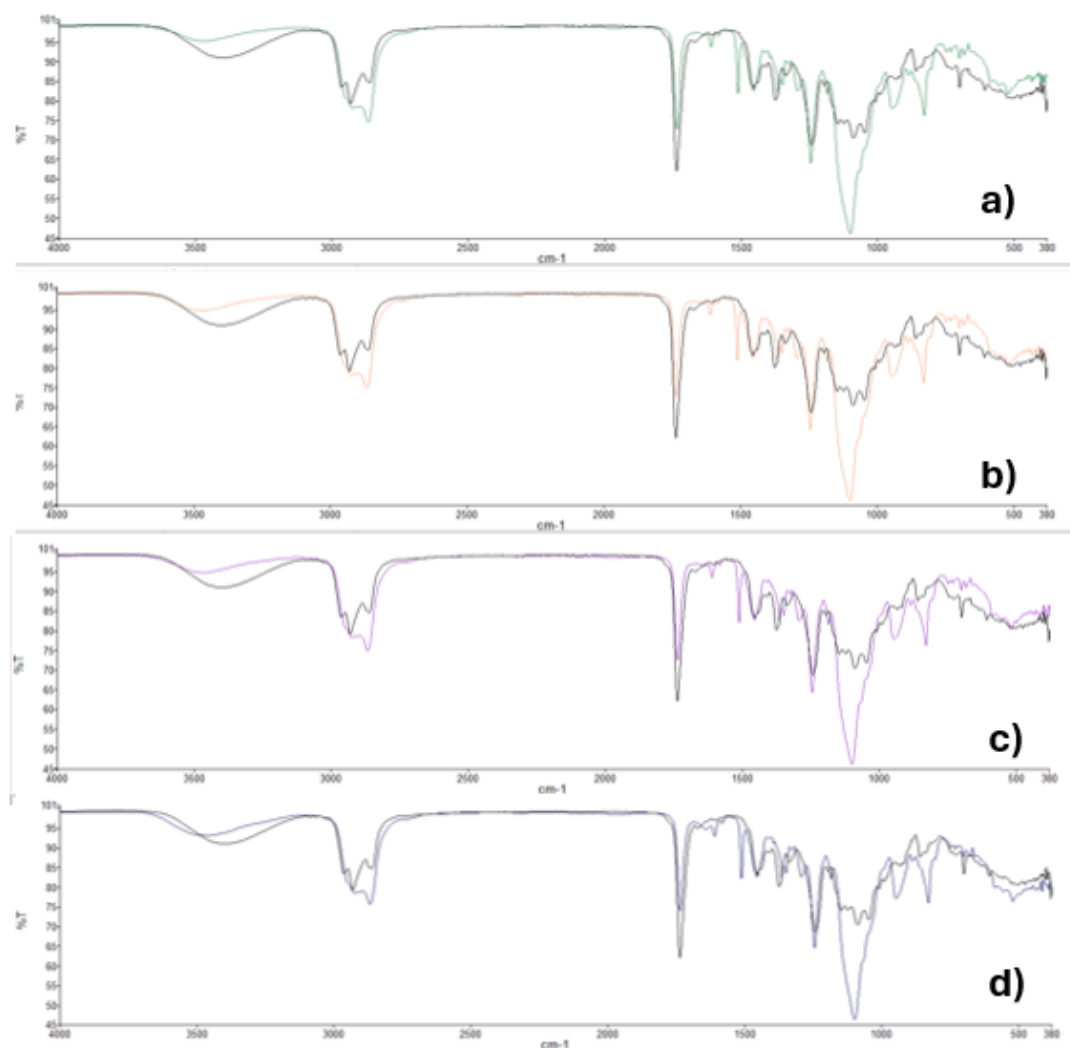


Figura 33

Comparación del espectro a) esencia C lote 0104 versus patrón esencia B lote 0377, b) esencia C lote 0127 versus patrón esencia B lote 0377, c) esencia C lote 0362 versus patrón esencia B lote 0377, d) esencia C lote 0396 versus patrón esencia B lote 0377



Los porcentajes de similitud de los espectros de las esencias de C con respecto al patrón de la esencia A y el patrón de la esencia B se muestran a continuación.

Tabla 8

Porcentaje de Similitud de los Espectros de las Muestras de Esencia C Versus los Patrones de la Esencia A Lote 0167 y Esencia B Lote 0377

Lote	%	%
	Similitud Esencia A	Similitud Esencia B
0104	32.1614	68.2102
0197	32.3449	68.2689
0362	32.2318	68.453
0396	32.6587	66.9387

4.2. Análisis de los espectros infrarrojos de los patrones utilizados.

4.2.1. Análisis del espectro infrarrojo de la esencia A lote 0163

La esencia A es una mezcla de distintos compuestos aromáticos que le dan sus características organolépticas, y estos se verán reflejados en el espectro infrarrojo del compuesto que se muestra en la figura 22.

En esta mezcla, tenemos principalmente la presencia del linalool, un monoterpeno que se caracteriza por la presencia de dos unidades de isopropeno. Debido a su estructura molecular, podemos atribuir en el espectro una absorbancia alrededor de 1248 cm^{-1} que podría estar asociada al estiramiento del enlace C-O del grupo hidróxilo (-OH) presente en el linalool. También se identifica una banda de absorbancia alrededor de 1374 cm^{-1} que es característica de las vibraciones de deformación del grupo metilo (CH_3) y metileno (CH_2). Identificamos una banda en 1678 cm^{-1} que podría atribuirse al estiramiento del enlace C=C del grupo alqueno presente. Por último, identificamos bandas en el rango de los 2800 cm^{-1} y 3000 cm^{-1} que podrían deberse a las vibraciones de estiramiento C-H de los grupos metilo, metileno y vinilo.

Otro compuesto importante que encontramos en esta mezcla es el Hexil Cinnamal. Este compuesto orgánico pertenece a la familia de los aldehídos aromáticos. Este compuesto presente vibraciones de estiramiento C=O del enlace carbonilo que es

característico del aldehído, que lo vemos alrededor de los 1678 cm^{-1} . Alrededor de los 1600 cm^{-1} podemos observar una pequeña absorbancia característica de las vibraciones de estiramiento de los enlaces $\text{C}=\text{C}$ del anillo aromático. A los 2960 cm^{-1} aproximadamente, encontramos absorbancias debido a las deformaciones de los enlaces $\text{C}-\text{H}$ del anillo aromático. Por último, alrededor de los 1450 cm^{-1} encontramos absorbancias que pueden ser atribuidas a las deformaciones de los enlaces $\text{C}-\text{H}$ en la cadena alifática.

Continuando con el análisis del espectro, también encontramos la presencia del bencil acetato. Este compuesto es un éster aromático que presenta un anillo aromático que se encuentra unido a un grupo acetato. Esta estructura molecular nos permite presumir que alrededor de los 1678 cm^{-1} tenemos bandas correspondientes al enlace $\text{C}=\text{O}$ del grupo carbonilo. También presenta aproximadamente en 1248 cm^{-1} absorbancia que puede ser atribuida al enlace $\text{C}-\text{O}$.

4.2.2. Análisis del espectro infrarrojo de la esencia B lote 0377

La esencia B es una mezcla de distintos compuestos orgánicos en distintas proporciones para poder alcanzar la nota adecuada. El espectro infrarrojo de esta esencia se muestra en la imagen 23.

Uno de los compuestos que contiene la esencia B es el coranol. Este alcohol terciario con un anillo de ciclohexano presenta absorción alrededor de los 2930 cm^{-1} que se podría deber a la vibración de estiramiento de los enlaces $\text{C}-\text{H}$. También observamos absorbancias en 1450 cm^{-1} . Estas absorbancias podrían deberse a las deformaciones de los enlaces $\text{C}-\text{H}$ del anillo de ciclohexano.

Otro compuesto presente es el 4-tert-Butylcyclohexil acetato, conocido comercialmente como Vertenex®. Este compuesto cuyo principal grupo es un grupo éster presenta un anillo de ciclohexilo con un sustituyente terbutilo y un grupo acetato. En el espectro observamos un pico sobresaliente alrededor de los 1736 cm^{-1} que se presume corresponde al grupo éster, que se caracteriza por la vibración de estiramiento del enlace $\text{C}=\text{O}$. También observamos un pico definido alrededor de los 1455 cm^{-1} que

se puede atribuir a la absorbancia de los enlaces C-C del anillo ciclohexilo. Otros picos que encontramos que se encuentran entre los 2861 y 2930 cm^{-1} pueden atribuirse a los enlaces C-H de los grupos metil, los enlaces del ciclohexilo, y los grupos metileno y metilo.

En igual proporción que el Vertenex®, se encuentra el acetato de etil linalilo. Este también presenta un grupo funcional éster -COO- cuyas vibraciones características del enlace C=O se podrían representar por el pico presente a las 1736 cm^{-1} . La presencia de los enlaces C-H de los grupos metil, metileno y metino, y de la cadena lateral terpénica pueden verse representadas por los picos entre 2800 cm^{-1} y 2900 cm^{-1} .

4.2.3. *Análisis del espectro infrarrojo de la esencia C lote*

La esencia C, cuyo espectro se encuentra en la figura 24, dentro de sus componentes mayoritarios cuenta con el etil linalool. Este alcohol terpénico presenta el grupo oxidrilo (-OH). La presencia de este grupo genera una banda ancha que podría ser atribuida a la banda que se encuentra en 3474 cm^{-1} . También la presencia de los enlaces C-H de los metilos, metinos y cadena lateral terpénica nos da una absorbancia debido a las vibraciones de estiramiento que podría estar representada por la banda que se encuentra en 2866 cm^{-1} .

Otro compuesto presente en la esencia C es el conocido comercialmente como Verdox®. Este compuesto es el acetato de 2 tert-butilciclohexilo, un éster cíclico. La presencia del grupo éster presenta una vibración del enlace carbonilo (C=O) que estaría representada por la banda que se observa en 1736 cm^{-1} . Los enlaces C-H generan absorbancia debido a las vibraciones de estiramiento que podrían representarse por la banda que se encuentra en los 2866 cm^{-1} . Por último, este compuesto presenta un anillo de ciclohexano, el cual presenta absorbancias posiblemente en la banda que se encuentra en 1455 cm^{-1} .

El -metil-5-fenilpentanol, también se encuentra presente en esta esencia. Este alcohol tiene una cadena alifática y un anillo aromático. El anillo aromático que se encuentra presente presenta vibraciones de los enlaces C=C los cuales pueden ser

representados por la banda que aparece en los 1610 cm^{-1} .

Para el caso del acetato de geranilo, que también se encuentra presente en la esencia C, la presencia del grupo funcional éster ($-\text{COO}-$) es probable que esté representada por la banda que se encuentra a los 1736 cm^{-1} . También se esperan absorancias debida a las vibraciones de estiramiento de los dobles enlaces $\text{C}=\text{C}$ alrededor de los 1610 cm^{-1} .

4.3. Comparación de los espectros

4.3.1. *Análisis de comparación de muestras y patrones similares*

Como se puede apreciar en la tabla 3, se compararon los espectros de las muestras de esencia A lote 0143, lote 0216, lote 0397 y lote 0448, versus el espectro del patrón esencia A lote 0163, y se evidenció que el porcentaje de similitud de las muestras es mayor al 99%. No se evidencia presencia de distintas estructuras moleculares a las identificadas en el inicio.

De la misma forma, en la tabla 4 y en la tabla 5 podemos encontrar los resultados de las comparaciones de similitud de los espectros infrarrojos de las esencias B de lote 004, lote 0106 lote 099 y lote 0861 versus el patrón lote 0377, y de las esencias C lote 0104, lote 0197, lote 0362 y lote 0396 versus el patrón de la esencia C lote 0097 respectivamente. En todas estas comparaciones, el porcentaje de similitud de los espectros es mayor al 99%. Este margen de error de 1% puede atribuirse a distintas concentraciones de humedad o porcentajes de participación de algunos componentes que pueden modificar mínimamente la absorancia a las distintas bandas características para cada grupo funcional.

Adicionalmente, se realizaron pruebas individuales para cada lote de las esencias A, esencias B y esencias C. Se compararon los espectros de los cuatro lotes de línea de las esencias A versus el patrón de la esencia B lote 0377 y esencia C lote 0097. Como se muestra en la tabla 6, el porcentaje de similitud de los espectros de la esencia A versus el patrón B tienen un 42% de similitud y versus el patrón C un porcentaje de similitud de 32%.

Las mayores diferencias entre los espectros de las esencias A y el patrón de la esencia B se encuentra alrededor de los 3400 cm^{-1} , que es la banda de correspondiente al grupo hidroxilo (-OH). Esta diferencia podría atribuirse a una diferencia en porcentaje de humedad entre cada muestra. Otros picos que se observan predominantes en los espectros de la esencia B con referencia al espectro de la esencia A son los que se encuentra alrededor de los 1700 cm^{-1} y 1800 cm^{-1} . Esta absorbancia es característica de la presencia de grupos funcionales éster. Como se explicó anteriormente, ambas esencias presentan compuestos con grupos funcionales éster, sin embargo, en la esencia B se encuentran más compuestos que en la esencia A con este grupo presente, motivo por el que el pico se observa más grande. Además, debemos considerar que los picos no salen siempre en la misma frecuencia, ya que dependen de las interacciones que tengan con otros grupos funcionales u otros compuestos presentes en la mezcla. También es importante mencionar que la zona entre los 1200 cm^{-1} y los 700 cm^{-1} se denomina región de huella digital, y en estos casos es única para cada compuesto, lo cual también lo evidenciamos en la comparación de espectros.

Con respecto a las diferencias entre los espectros de las esencias A de línea versus el espectro del patrón C, encontramos diferencias alrededor de los 3400 cm^{-1} , que es la banda de correspondiente al grupo hidroxilo (-OH). Esta diferencia podría atribuirse a una diferencia en porcentaje de humedad al igual que en el caso de las esencias A versus el patrón de la esencia B. También se observa diferencias marcadas alrededor de los 1600 cm^{-1} y los 1800 cm^{-1} , que al igual que el caso anterior, puede atribuirse a una diferencia en la presencia de compuestos con grupo éster.

Con respecto a la comparación entre las esencias B y el patrón C, encontramos un porcentaje de similitud en promedio de 68%. Esta diferencia con respecto a la comparación de los espectros de la esencia A versus el patrón de la esencia B y el patrón de la esencia C, se puede evidenciar visualmente donde observamos que en la banda de los 1700 cm^{-1} aproximadamente los picos son similares por la elevada presencia de compuestos con grupos funcionales éster en ambos compuestos.

Conclusiones

Después de las pruebas realizadas con las esencias A, esencias B y esencias C, se ha demostrado que el análisis de espectroscopia infrarroja es una técnica útil para la identificación de esencias en el proceso de control de calidad de las materias primas. La correlación entre espectros nos permite identificar las esencias y poder aprobarlas en un menor tiempo, mejorando los tiempos de aprobación y agilizando la producción de fragancias.

Luego de demostrada la hipótesis, se implementó un método de ensayo para el análisis de identidad de materias primas por análisis de espectroscopia infrarrojo, el cual es compartido en el anexo 01.

Recomendaciones

A partir de lo realizado en el presente trabajo, dependiendo de la naturaleza química de la materia prima a analizar, se recomienda extender este análisis de identidad para que sea realizado a materiales orgánicos, u otras materias primas a fin de utilizar esta metodología como reemplazo de los métodos tradicionales cualitativos de identidad, a partir de patrones preestablecidos.

Referencias

- Aguilar, A., Rojas, V., Cabral, A., Alvarado, L., & De la Cruz, I. (2014). Adaptación de la técnica "Control Total de la Calidad" al sector agroalimentario de la carne. *Revista Mexicana de Agronegocios* 35(), 1145 - 1153.
- Aprotosoiaie, A., Hancianu, M., Costache, I., & Miron, A. (2013). Linalool: a review on a key odorant molecule with valuable biological properties. *Flavour and Fragrance Journal*, 193-219. doi:<https://doi.org/10.1002/ffj.3197>
- Basketter, D., White, I. R., McFadden, J. P., & Kimber, I. (2014). Hexyl cinnamal: consideration of skin-sensitizing properties and suitability as a positive control. *Cutaneous and Ocular Toxicology*, 227–231. doi:<https://doi.org/10.3109/15569527.2014.933973>
- Biolab. (2024). *Biolab [Figura]*. Obtenido de <https://www.ddbiolab.com:https://www.ddbiolab.com/product/0ZAGE-01-01>
- Blog PUCP. (2024). <http://blog.pucp.edu.pe/blog/quimicageneral/quimica-1> [Figura]. Obtenido de [http://blog.pucp.edu.pe/blog/quimicageneral/quimica-1/:](http://blog.pucp.edu.pe/blog/quimicageneral/quimica-1:) <http://blog.pucp.edu.pe/blog/quimicageneral/quimica-1/unidad-3-enlace-quimico/3-4-enlace-covalente/3-4-5-polaridad-de-moleculas/>
- Elassy, N. (2015). The concept of quality, quality assurance and quality enhancement. *Quality Assurance in Education*, 250-261.
- Europea, P. E. (30 de Noviembre de 2009). Reglamento (CE) N°1233/2009 del Parlamento Europeo y del Consejo de 30 de noviembre de 2009 sobre los productos cosméticos.
- EYCOS, L. (2024). *Color Gardnes. Patrones de color [Fotografía]*. Obtenido de www.laboratorioseyco.com/: <https://www.laboratorioseyco.com/color-gardner/>
- Firmenich. (2021). *Molecule [Imagen]*. Obtenido de Firmenich: <https://www.firmenich.com/product/florolr-pe-966458-0>
- Fisher Scientific . (2024). *Fisher Scientific [Figura]*. Obtenido de <https://www.fishersci.es:https://www.fishersci.es>

<https://www.fishersci.es/es/es/browse/90207033/picn%C3%B3metros?page=1>

Gestión, D. (19 de 07 de 2020). *El cierre obedece a la crisis generada por el coronavirus [Fotografía]*. Obtenido de Diario Gestión: <https://gestion.pe/economia/empresas/yanbal-anuncia-el-cierre-total-de-su-planta-de-joyeria-en-el-peru-nndc-noticia/>

Gil, E., & Sáez, A. (2005). Evaluación a escala de planta piloto del proceso industrial para la obtención de aceite esencial de Cardamomo, bajo la filosofía cero emisiones. *Universidad EAFIT*.

Konica Minolta. (2024). *Entendiendo el espacio de color CIE L*a*b* [Imagen]*. Obtenido de <https://sensing.konicaminolta.us/>: <https://sensing.konicaminolta.us/mx/blog/entendiendo-el-espacio-de-color-cie-lab/>

Lalko, J., Lapczynski, A., McGinty, D., Bhatia, S., Letizia, C., & Api, A. (2007). Fragrance material review on β -ionone. *Food and Chemical Toxicology*, 241-247.

Mateoli, H., Ciappa, A., Bovo, S., Bertoldini, M., & Scrivanti, A. (2007). Asimetric catalysis in fragrance chemistry: a new synthetic approach to enantipure Phenoxanol, Citralis, and Citralis Nitrile. *Tetrahedron: Asymmetry*, 797-802.

Mettler Toledo. (2024). <https://www.mt.com> [Figura]. Obtenido de <https://www.mt.com>: https://www.mt.com/mx/es/home/products/Laboratory_Analytics_Browse/density-meter/easyplus-density-meters/easy-d40.html/mx/es/home/products/Laboratory_Analytics_Browse/density-meter/easyplus-density-meters/easy-d40.html

Mettler Toledo. (2024). <https://www.mt.com> [Figura]. Obtenido de <https://www.mt.com>: https://www.mt.com/es/es/home/applications/Application_Browse_Laboratory_Analytics/Refractive_index/definition_and_measurement/snells-law.html

Mettler Toledo. (2024). <https://www.mt.com/es> [Figura]. Obtenido de <https://www.mt.com/es>: https://www.mt.com/es/es/home/applications/Application_Browse_Laboratory_A

nalytics/Refractive_index/definition_and_measurement.html

- Meza, P. (2016). Elaboración de bioplásticos a partir de almidón residual obtenido de peladoras de papa y determinación de su biodegradabilidad a nivel de laboratorio. Perú: Universidad Nacional Agraria la Molina.
- Molina, J., Colina, M., Rincón, D., & Vargas, J. (2017). Efecto del uso de quitosano en el mejoramiento del cultivo de arroz. *Revista de Investigación Agraria y Ambiental*, 151 - 165.
- Mondragón, P. (2020). Principios y aplicaciones de la espectroscopía de infrarrojo en el análisis de alimentos y bebidas. En P. Mondragón, *Principios y aplicaciones de la espectroscopía de infrarrojo en el análisis de alimentos y bebidas*. Obtenido de <https://ciatej.repositorioinstitucional.mx/jspui/bitstream/1023/722/1/Infrarrojo%20Cap%203.pdf>
- NIH. (2024). *Chemical structure of 3-Methyl-5-phenylpentan-1-ol [Figura]*. Obtenido de <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>:
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/3-Methyl-5-phenylpentan-1-ol#section=Spectral-Information>
- Ortuño, M. (2006). *Manual práctico de aceites esenciales, aromas y perfumes*. España: Aiyana Ediciones.
- Qi, F. Y. (2018). Geraniol and geranyl acetate induce potent anticancer effects in colon cancer Colo-205 cells by inducing apoptosis, DNA damage and cell cycle arrest. *J BUON*, 23(2), 346-352.
- Reaserch, G. V. (2023). *Grand View Research*. Obtenido de Grand View Research: <http://www.grandviewresearch.com/industry-analysis/cosmetic-market#>
- Royal Society of Chemistry. (2024). <https://www.chemspider.com> [Figura]. Obtenido de <https://www.chemspider.com>: <https://www.chemspider.com/Chemical-Structure.13850135.html>
- Santos, P., Matos, J., Picot, L., & Almeida, J. (12 de Noviembre de 2018). Citronellol, a

- monoterpene alcohol with promising pharmacological activities - A. *Food and Chemical Toxicology*, 459-469. doi: <https://doi.org/10.1016/>
- Scentree. (2023). <https://www.scentree.co>. Obtenido de <https://www.scentree.co:https://www.scentree.co/en/map/General>
- Scentspiracy. (2024). *Scentspiracy [Figura]*. Obtenido de <https://www.scentspiracy.com/:https://www.scentspiracy.com/fragrance-ingredients/p/jasmonal-h>
- Shutterstock. (2024). www.shutterstock.com. Obtenido de <https://www.shutterstock.com/es/image-vector/hexyl-cinnamal-chemical-structure-cinnamaldehyde-common-1807077013>
- Skoog, D., Holler, J., & Crouch, S. (2008). Principios de Analisis Instrumental. En D. Skoog, J. Holler, & S. Crouch, *Principios de Analisis Instrumental* (págs. 459-469). Mexico DF: Cengage Learning.
- Teixeira, M., Rodríguez, O., & Rodrigues, A. (2012). Prediction Model for the Odor Intensity of Fragrance Mixtures: A Valuable Tool for Perfumed Product Design. *American Chemical Society*, 963-971.
- Tipler, P., & Mosca, G. (2005). *Física para la ciencia y la tecnología*. Barcelona: Reverte.
- Val-Castillo, O. (19 de Febrero de 2024). El sentido del momento dipolar. *Real Sociedad Española de Química*, 32-35. doi:10.62543/rseq.aq.1963
- Velandia, J. (2017). Identificación de polímeros por espectroscopía infrarroja. *ONTARE Facultad de Ingeniería Universidad EAN*, 115-140.
- Wang, L., Chang Cho, Y., Lee, Y.-H., Jonghyum, J., & Woo, J. (2024). Density measurement and uncertainty evaluation of elemental and alloy liquids using electrostatic levitation. *Journal of Molecular Liquids* 396x.
- YANBAL. (Diciembre de 2023). www.yanbal.com. Obtenido de Yanbal International: <https://www.yanbal.com/pe/corporate/quienes-somos?from=menu>

Anexos

Anexo 1: Metodología para el análisis por espectrometría infrarrojo de esencia	1
--	---

Anexo 01. Metodología para el análisis por espectrometría infrarrojo de esencia.

Identificación de materiales por absorción infrarrojo medio

1. Alcance

Establecer las actividades para realizar el análisis de identificación por absorción infrarroja media de materiales, realizando un barrido completo en todo el alcance del rango de onda (4000 – 400) cm^{-1} , mediante la comparación entre una muestra y un patrón de un mismo material, con la finalidad de determinar que ambos espectros se correlacionan. Aplica para materiales cuya especificación técnica lo requiera.

- Materias primas
- Productos en proceso
- Producto terminado
- Envases y componentes

2. Documento de referencia

- USP vigente <854>

3. Definiciones

3.1. Espectroscopía en infrarrojo medio

La espectroscopía de infrarrojo medio es un método instrumental que se usa para medir la absorción de la radiación electromagnética sobre el intervalo de número de onda de 4000 cm^{-1} a 400 cm^{-1} . La absorción de fotones ocasiona la promoción de moléculas de un estado fundamental de su estado vibratorio a un estado vibratorio excitado.

4. Principio

Identificación de grupos funcionales de materiales orgánicos mediante espectros característicos formados por absorción de radiación infrarrojo de las vibraciones de los enlaces químicos del material mediante la espectroscopia de infrarrojo media por transformada de Fourier (FTIR)

5. Recursos

- Espectrofotómetro infrarrojo medio marca Perkin Elmer
- Espátulas
- Mortero
- Alcohol 96%

6. Puntos de control

- Cumplimiento del plan de aseguramiento metrológico
- Verificar la identificación correcta de la muestra y el patrón
- Seguir las BPL
- Asegurar las condiciones ambientales de 18°C a 25°C y no superar el 80% de humedad

7. Medidas de seguridad y ambientales

- Limpiar el equipo cuando ocurra algún derrame de algún material
- Para muestras no peligrosas, usar lentes de seguridad, guantes de latex y uniforme completo
- Para muestras no peligrosas: Usar lentes de seguridad, guantes de nitrilo, respirador para vapores orgánicos y uniforme completo.
- Cualquier consulta adicional sobre la muestra y reactivos, ver la hoja de seguridad correspondiente.
- Disponer los residuos según la guía de manejo de residuos en los laboratorios.

8. Procedimiento analítico

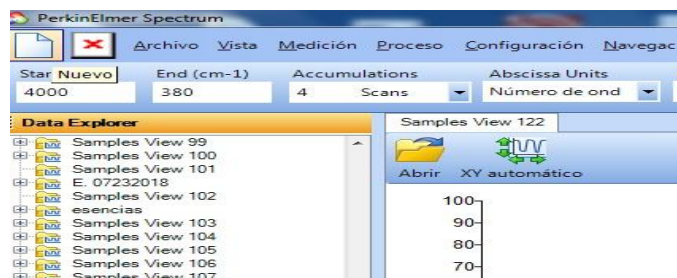
8.1. Acciones previas

- Verificar la limpieza del equipo antes del uso.
- Verificar la limpieza de los materiales antes de su uso.

8.2. Acciones operativas

- a. Homogenizar la muestra

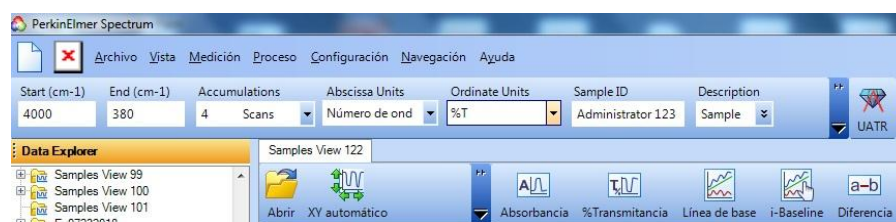
- b. Crear una carpeta nueva donde se leerán los espectros obtenidos en ese momento.



- c. Realizar un barrido de fondo antes de analizar muestras haciendo Clic en Fondo, como muestra la siguiente imagen.

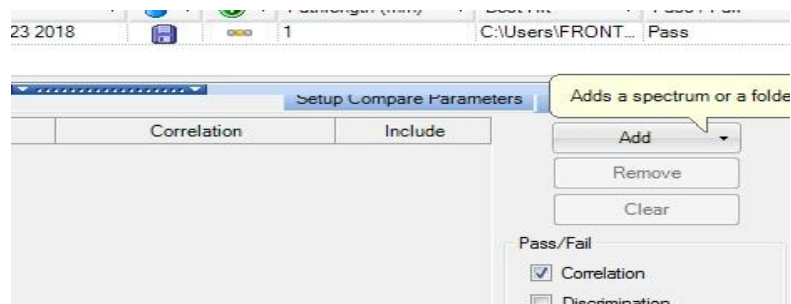


- d. Verificar los parámetros definidos:
- Rango de lectura: (380 – 4000) cm⁻¹
 - Número de scan: 4
 - Unidad de Abscisa: Número de onda
 - Unidad de Ordenada: Transmitancia %

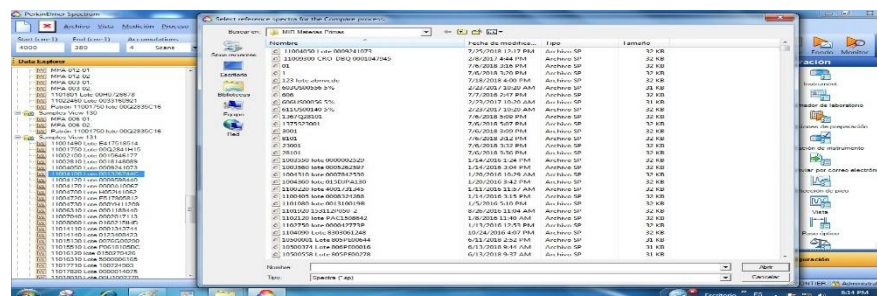


- e. En Sample ID: Identificar las lecturas indicando por lo menos el código y lote de material.
- f. Colocar una determinada cantidad de muestra o patrón sobre el UATR sample plate, verificando de cubrir toda la superficie del diamante

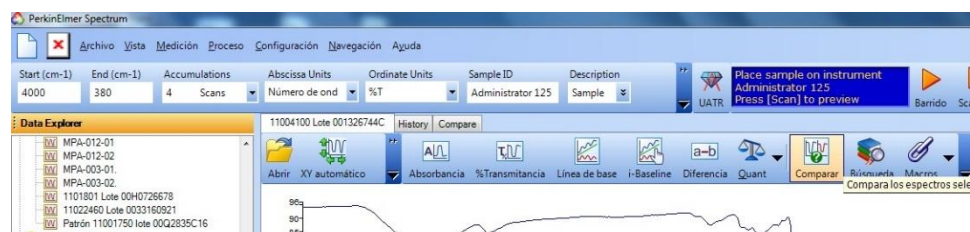
- g. Dar Clic en Barrido.
- h. Dar Clic en guardar.
- i. Comparación de espectros
- j. Agregar el patrón con el cual se realizará la(s) comparaciones, dando clic en Add/ Single spectrum/ patrón



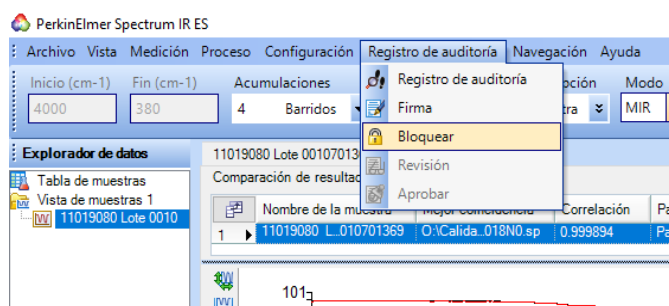
- k. Seleccionar la lectura que se desea comparar con el patrón previamente seleccionado



- l. Dar clic en el icono: comparar



- m. Ir a pista de auditoría y dar clic en bloquear espacio de trabajo.

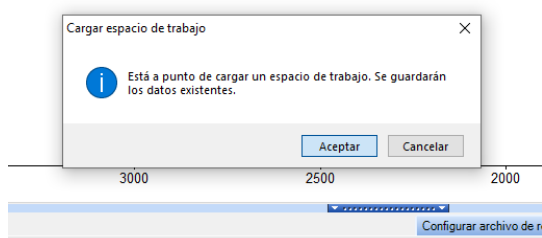


n. Firmar con usuario y contraseña.

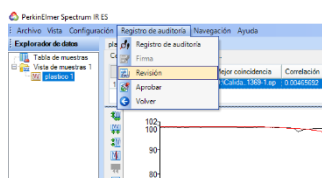
8.3. Revisión y aprobación de espacios de trabajo

Para la revisión y aprobación de los espacios de trabajo, los usuarios designados deben cargar los espacios de trabajo, para esto deben seguir los siguientes pasos:

- Ir a registro de auditoria.
- Dar Clic en revisión o aprobación según corresponda.
- En la ventana espacio de trabajo seleccionar para revisar o aprobar según corresponda.
- En ID de creado seleccionar al analista del cual se desea cargar el espacio de trabajo.
- Seleccionar el espacio de trabajo y dar clic en “cargar espacio de trabajo”. Le parecerá el siguiente mensaje.



- Dar clic en aceptar y firmar, le cargará el espacio de trabajo.
- Dirigirse a registro de auditoria y dar clic en revisión o aprobación según corresponda.

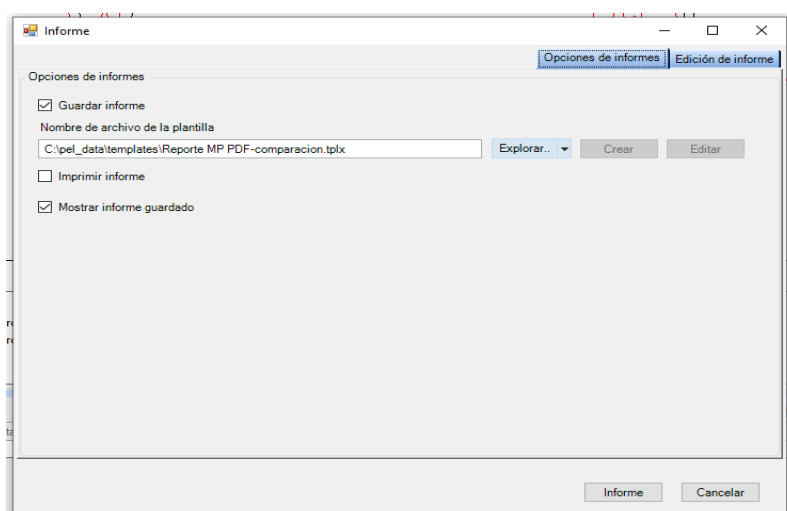


a. Firmar.

8.4. Generación de reportes

Para la generación de reportes de comparación seguir los siguientes pasos.

- Dirigirse a la ventana Archivo / Informe ES.
- Cargar la plantilla correspondiente como se muestra en la siguiente imagen.



c. Dar clic en informe. Le aparecerá el reporte en pdf.

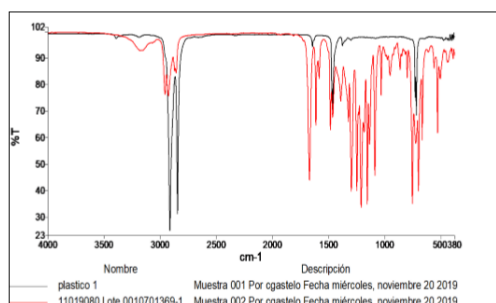
PerkinElmer Spectrum IR ES 10.6.2

UNIQUE - YANBAL



INFORME DE ENSAYO

Fecha de emisión: 20/11/2019 12:45:10



Espectro de origen			
Nombre de la muestra	Descripción	Correlación	Pasa/Falla
plastico 1	Muestra 001 Por ogastelo Fecha miércoles, noviembre 20 2019	0.0046569	Falla

Referencias comparadas		
Nombre de la muestra	Correlación	Pasa/Falla
O:\Calidad Peru\Análisis Infrarrojo\11019080 Lote 0010701369-1.sp	0.00465692	Falla

9. Cálculos y presentación de resultados

9.1. Cálculos

No aplica

9.2. Presentación de resultados

Comparación con un patrón: Reporte en PDF de la comparación de los espectros infrarrojos de la muestra vs patrón indicando el factor de correlación.

Comparación con las bibliotecas: Búsqueda en la librería con el porcentaje de coincidencia más alto

10. Criterios de aceptación / rechazo

Aceptación: Los factores de corrección de la muestra versus el patrón deben ser mayor o igual a 0.99; registrar como resultado CONFORME (C).

Rechazo: Los factores de correlación de las muestras versus el patrón deben ser menores a 0.99; registrar como resultado NO CONFORME (NC).