



UNIVERSIDAD DE GUAYAQUIL
FACULTAD DE INGENIERIA QUIMICA

TRABAJO DE TITULACION

PREVIO A LA OBTENCION DEL TITULO DE:
INGENIERO QUIMICO

TEMA:

**ANÁLISIS DE LA DEGRADACIÓN DE LOS AGENTES ANTIOXIDANTES
EN EL PROCESAMIENTO DE JUGOS CÍTRICOS EXPENDIDOS EN EL
CANTON GUAYAQUIL.**

A U T O R:

BATIOJA GARCÍA ANA ROXANA
COROZO VALENCIA LIVIA LOURDES

DIRECTOR DE TESIS

Q.F. LUIS FELIPE ZALAMEA MOLINA MSC.

Guayaquil

Ecuador

2014

AGRADECIMIENTOS:

A Mi Dios principio y fin de la sabiduría, mi fiel amigo que está siempre en todos los momentos junto a mí, el que nunca abandona y ante quien me inclino reverente por lo bueno y malo que recibo de su parte día a día.

A mis padres; Amada Valencia y Wilfrido Corozo, mi reconocimiento infinito por su apoyo incondicional tanto espiritual como material junto con mis hermanos; Lenin, Lorena, Lalo y Leonardo y mis 9 sobrinos.

A mi hermana de la Vida, compañera de aula y de tesis Ana Batioja por su amistad incondicional y todo el aguante para conmigo.

A mis otras dos hermanas de la vida y compañeras de aula Verónica Manosalvas e Iliana Moran por su amistad Incondicional.

A mi maestro y director de tesis Q.F. Luis Felipe Zalamea Molina Msc, que nos ayudó en todo y por su paciencia para con nosotras.

A todos mis maestros que en este andar por la vida, influyeron con sus lecciones y experiencias para mi formación personal y profesional.

A todos aquellos que de una u otra forma siempre han estado ahí dándome su apoyo física y moralmente, Marisela, Tulio, Marisol, Madrina Liboria, Mami Lida, Euclides, Clemencia, Iván, Junior, Mariana, Seidy. Gracias.

Livia Lourdes Corozo Valencia.

AGRADECIMIENTOS:

Mi gratitud, principalmente está dirigida a Dios por haberme dado la existencia y la inteligencia para poder alcanzar esta anhelada meta.

Eternamente agradecida con mis padres el Sr. Miguel Batioja y la Sra. Luz María García quienes fueron un pilar fundamental en este camino recorrido que sin ellos fuera sido imposible alcanzar este logro, a mis hermanas Jessica y Karen.

A la Srta. Livia Corozo amiga sincera y compañera de tesis quien siempre estuvo hay para darme esa palabra de aliento.

A los docentes el Q.F. Luis Felipe Zalamea tutor y amigo quien muy acertadamente dirigió este trabajo y al Ing. José Valdez por su tiempo y apoyo incondicional.

A todos los maestros de la Facultad de Ingeniería Química, gracias totales por sus conocimientos impartidos.

Ana Roxana Batioja García

DEDICATORIA.

A Mi Dios principio y fin de la sabiduría, mi fiel amigo que está siempre en todos los momentos junto a mí, el que nunca abandona y ante quien me inclino reverente por lo bueno y malo que recibo día a día.

A mis padres; Amada Valencia y Wilfrido Corozo, mi reconocimiento infinito por su apoyo incondicional tanto espiritual como material junto con mis hermanos; Lenin, Lorena, Lalo y Leonardo y mis 9 sobrinos.

A mi hermana de la Vida y compañera de tesis Ana Batioja por su amistad incondicional y todo el aguante.

A mis otras dos hermanas de la vida, Verónica Manosalvas e Iliana Moran por su amistad Incondicional.

A mi maestro y director de tesis Q.F. Luis Felipe Zalamea Molina Msc. que nos ayudó en todo y por su paciencia para con nosotras.

A todos mis maestros que en este andar por la vida, influyeron con sus lecciones y experiencias para mi formación personal y profesional.

A la Universidad Estatal de Guayaquil “Facultad de Ingeniería Química”

Livia Lourdes Corozo Valencia.

DEDICATORIA.

Está dedicado a mi Dios quién supo guiarme por el buen camino, darme fuerzas para seguir y no desmayar en los problemas que se presentaban, enseñándome a encarar las adversidades sin desfallecer en el intento.

Para mis padres el Sr. Miguel Batioja y la Sra. Luz María García por su apoyo, consejos, comprensión, amor en los momentos difíciles, y ayudarme con los recursos necesarios para estudiar. Me han dado todo lo que soy como persona, valores, principios, carácter, empeño, perseverancia, coraje para conseguir mis objetivos.

A mis hermanas por estar siempre presentes, acompañándome para poderme realizar. A mi sobrino Isaac quien ha sido y es una motivación, inspiración y felicidad.

A mi novio Danny Zamora por estar a mi lado en las buenas y malas; por su comprensión, paciencia y amor, dándome ánimos para seguir adelante.

A mi compañera de tesis Livia Corozo por el sacrificio, esmero y voluntad que tuvimos siempre; en donde nunca se perdió el objetivo principal de alcanzar y terminar con éxito nuestro trabajo de graduación.

Ana Roxana Batioja García

DERECHOS DE AUTORÍA

BATIOJA GARCIA ANA ROXANA y COROZO VALENCIA LIVIA

LOURDES,declaran bajo juramento que el trabajo aquí descrito es de nuestra autoría, que no ha sido previamente presentado para ningún grado o calificación profesional, y que hemos consultado las referencias bibliográficas que se incluyen en este documento.

A través de la presente declaración cedemos los derechos de propiedad intelectual a la **UNIVERSIDAD DE GUAYAQUIL FACULTAD DE INGENIERIA QUIMICA**, según lo establecido por la Ley de Propiedad Intelectual y su reglamento.

BATIOJA GARCIA ANA

COROZO VALENCIA LIVIA

CERTIFICACIÓN DE TUTOR

Q.F. Msc Luis Felipe Zalamea Molina certifica haber tutelado la tesis **ANÁLISIS DE LA DEGRADACIÓN DE LOS AGENTES ANTIOXIDANTES EN EL PROCESAMIENTO DE JUGOS CÍTRICOS EXPENDIDOS EN EL CANTON GUAYAQUIL**, que ha sido desarrollada por **BATIOJA GARCIA ANA ROXANA y COROZO VALENCIA LIVIA LOURDES**, previa la obtención del título de Ingeniero en QUIMICA, de acuerdo al **REGLAMENTO PARA LA ELABORACIÓN DE TESIS DE GRADO DE TERCER NIVEL** de la **UNIVERSIDAD DE GUAYAQUIL, FACULTAD DE INGENIERIA QUIMICA**

Q.F. Msc Luis Felipe Zalamea Molina
C.I 0904190055

RESUMEN

Los jugos, néctares, bebidas naturales y artificiales que se comercializan en el cantón Guayaquil con gran publicidad resaltan un sinnúmero de beneficios para la salud. Para comprobar que tan cierto llega a ser esa información, hemos realizado una Investigación Bibliográfica, con un respaldo experimental, siendo el objetivo del trabajo el determinar la actividad antioxidante, evaluada como % de inhibición del DPPH^{*} (radical 2,2-difenol-1-picrilhidrazilo). Se utilizó el Espectrofotómetro GENESYS 10 uv., obteniéndose una actividad antioxidante de las bebidas entre 17 y 68 %, mientras que los zumos puros dieron valores entre 30 al 85 %.

De la misma manera se realizó el análisis por GC/MS con zumo crudo de la naranja y limón, determinando hasta 100 compuestos químicos presentes perfectamente identificados como el limonene, linalool y germacrene y otros.

Los resultados de la naranja dieron 4.759 % de sabinene, 3.976 % limonene, el limón lanzó datos de 16.748 % de limonene, 4.501% alfa terpinol. Descritos de la misma manera en el capítulo 4, dándole un cierre y aportación a nuestro trabajo con las Conclusiones y Recomendaciones Respectivas.

Palabras claves: antioxidante, cromatografía de gases, radicales libres

ABSTRACTS

Juices, nectars, natural and artificial drinks sold in the Guayaquil canton with great publicity highlighted a number of health benefits. To check how true that information becomes. We conducted a literature review, with whose backing Experimental, with the aim of the work done to determine the antioxidant activity. Evaluated as% inhibition of DPPH • (radical 2,2-diphenol-1-picrilhidrazilo). Using the GENESYS 10 UV spectrophotometer. Obtaining a beverage antioxidant activity between 17 and 68%, while those values gave pure juices antioxidant activity of between 30 to 85%.

Likewise the analysis was performed by GC / MS with raw juice of the orange and lemon, determining to 100 chemical compounds identified perfectly. As limonene, linalool and Germacrene and others.

The results of the orange gave 4,759% of sabinene, limonene 3.976%, data released lemon 16.748% of limonene, alpha terpineol 4,501. In the same manner described in Chapter 4, giving closure and contribution to our work with Respective Conclusions and Recommendations.

Keywords: antioxidant, gas chromatography, free radicals.

INDICE GENERAL

AGRADECIMIENTOS:	I
AGRADECIMIENTOS:	II
DEDICATORIA.....	III
DEDICATORIA.....	IV
DERECHOS DE AUTORÍA	V
CAPITULO 1.....	1
INTRODUCCIÓN	1
1.1TEMA.....	1
1.2PROBLEMA	1
1.3DIAGNÓSTICO DEL PROBLEMA	2
1.4LIMITACIÓN	3
1.5OBJETIVOS:	3
1.6IDEA A DEFENDER	4
1.7PREGUNTAS A CONTESTAR.....	4
1.8JUSTIFICACIÓN DEL PROBLEMA (BENEFICIARIOS)	5
1.9HIPÓTESIS.....	6
1.10VARIABLES	7
1.11OPERACIONALIZACIÓN DE LAS VARIABLES	7
CAPITULO 2.....	8
MARCO TEÓRICO	8
2.1 CLASIFICACION DE JUGOS POR SU CONTENIDO DE FRUTA	8
2.2 FUNCIÓN Y CAUSA DE LOS ANTIOXIDANTES	10
2.3 MÉTODOS PARA MEDIR LA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE	10
2.4 CANTIDAD DE MILIGRAMOS PRESENTES EN FRUTAS CRUDAS... ..	12
2.5 FACTORES QUE AFECTAN LA DEGRADACIÓN:	14
2.6 ADITIVOS QUE CONTIENEN LOS JUGOS PROCESADOS	15
2.7NORMA DE CALIDAD JUGOS	16
CAPÍTULO 3.....	20
EXPERIMENTACIÓN	20

3.1 METODOLOGIA.....	20
3.2 CALCULO DE LA INHIBICIÓN DE RADICALES LIBRES POR LA ACTIVIDAD DE LOS FLAVONOIDES PRESENTE EN LAS MUESTRAS MEDIANTE LA PRUEBA DEL DPPH.	20
3.3 PREPARACIÓN DE LAS MUESTRAS	21
3.4 PREPARACIÓN DE LA SOLUCIÓN DEL REACTIVO (DPPH)	23
3.5 RECTA DE CALIBRACIÓN DEL REACTIVO	24
CAPÍTULO 4.....	27
ANÁLISIS DE RESULTADO	27
4.1 RESULTADOS DE LAS PRUEBAS OBTENIDAS POR EL METODO DE DPPH PARA LA DETERMINACION DE ANTIOXIDANTES.....	27
4.2 CROMATOGRAFIA.....	57
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	70
CONCLUSIONES	70
RECOMENDACIONES.....	71
BIBLIOGRAFÍA	72

INDICÉ DE FIGURAS Y CUADROS

FIGURA 2.1 CLASIFICACIÓN DE LOS JUGOS.....	8
FIGURA 3.1 PREPARACIÓN DE LA MUESTRAS	22
FIGURA 3.2 PROCESO DE PASTEURIZACIÓN A ESCALA EXPERIMENTAL	22
FIGURA 3.3 MUESTRAS DE JUGOS COMERCIALES Y EN POLVO.....	23
FIGURA 3.4 EXTRACTOS METANOL + DPPH	24
CUADRO ESTADISTICO PORCENTAJESDE ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE.....	55

CAPITULO 1

INTRODUCCIÓN

1.1 TEMA

Análisis de la degradación de los agentes antioxidantes en el procesamiento de jugos cítricos expendidos en Guayaquil.

1.2 PROBLEMA

Mickey Díaz Uribe, profesor de Marketing de la Universidad Católica de Santiago de Guayaquil, señala que el consumo per cápita de jugos, en el país, se sitúa en alrededor de 33.5 litros al año y muestra un crecimiento de hasta el 50% en los últimos cinco años. "Esto ha abierto una oportunidad a los negocios de preparación de jugos naturales y Guayaquil tiene mayor potencial para este mercado por sus altas temperaturas.

Durante el procesamiento de jugos embotellados y solubles se pierde cierto porcentaje de agentes antioxidantes debido a los tratamientos térmicos presentes en cada uno de estos, incluso durante el procesamiento de zumo crudo de cierto cítricos los agentes antioxidantes son extremadamente sensibles a variables como la temperatura o el material que los contiene.

Por eso en el caso del zumo crudo de fruta, el jugo pasteurizado, y el jugo como producto final se puede calcular el grado de pérdida de agente

antioxidante debido a la serie de variables que sufren durante la línea de producción.

1.3 DIAGNÓSTICO DEL PROBLEMA

Ciertos agentes antioxidantes son sensibles a cambios elevados de temperaturas, a la oxidación por el aire e incluso al tratamiento con objetos metálicos ya que se produce una reacción oxidativa, que afecta a los metabolitos que contienen las frutas.

Esto es importante ya que en el proceso de producción de los jugos se utilizaron diferentes parámetros de tiempo y temperatura que van a afectar los componentes del producto.

Sin embargo, existen metabolitos secundarios presentes en los cítricos como el limonene y el linalool también beneficiosos para el ser humano que son más resistentes a los cambios térmicos, pero que están en menor cantidad y que han sido detectados mediante la cromatografía gaseosa GC/MS.

1.4 LIMITACIÓN

Se trabajó con jugos, bebidas y néctares naturales y artificiales adquiridos en diferentes comercios del cantón Guayaquil.

Para poder realizar la Cromatografía Gaseosa nos trasladamos a la Hacienda Young Living, donde se nos facilitó el equipo para realizar dicho análisis.

1.5 OBJETIVOS:

1.5.1 Objetivo General

- Determinar la degradación de los agentes antioxidantes de los jugos cítricos, mediante la técnica espectrofotométrica del DPPH.

1.5.2 Objetivos Específicos

- Valorar la capacidad antioxidante en los jugos de frutas.
- Verificar efectos y causas de los porcentajes de inhibición de los jugos.
- Muestrear y analizar bebidas, néctares y jugos naturales y artificiales mediante reactivo DPPH utilizando el espectrofotómetro Genesys 10.

- Determinar componentes químicos mediante cromatografía gaseosa con espectrofotometría de masa (GC/MS) a muestras de jugos cítricos naturales.
- Analizar las causas de la degradación de los agentes antioxidantes en el procesamiento de los jugos cítricos artificiales.

1.6 IDEA A DEFENDER

El jugo embotellado y el soluble sufren cambios térmicos que degradan a los agentes antioxidantes y mediante el método de DPPH podemos medir y cuantificar su pérdida comparando con muestras de zumo puro.

1.7 PREGUNTAS A CONTESTAR

- ¿Cuáles son las causas posibles de la deterioración de los antioxidantes en el procesado de jugos naturales?
- Efectos en la determinación de antioxidantes con los cambios de temperatura que se dan en el procesamiento de los jugos?
- ¿Por qué utilizamos el DPPH para comprobar los beneficios que tienen o que presentan los productos de nuestra investigación?
- ¿Por qué agregan ácido ascórbico a todas las bebidas cítricas?

- Los zumos puros tienen mayor poder antioxidante que las bebidas y néctares?

1.8 JUSTIFICACIÓN DEL PROBLEMA (BENEFICIARIOS)

Debido a la gran demanda del consumo excesivo de jugos cítricos en nuestro país específicamente en el cantón Guayaquil, ponemos en conocimiento este proyecto con el único fin de colaborar en la mejora de calidad de vida, salud y bienestar de los consumidores.

Los consumidores se beneficiaran al conocer los verdaderos aportes que ofrecen los jugos, bebidas y néctares en el mercado, en cuanto a la capacidad de antioxidantes presentes en estos.

En adición ciertos compuestos químicos como el linalool tienen diversos usos como síntesis de la vitamina e “Casabianca H, Graff JB, Faugier V, Fleig F, Grenier C (1997) Enantiomeric distribution studies of linalool and linalylacetate”.

El limonene, es usado en clínicas para disolver los cálculos biliares además se está realizando pruebas que sustentan la actividad del limonene en efectos anti cancerígenos “Alternative Medicine Review Volume 12, Number 3, 2007”.

El ácido cítrico en el jugo no tiene valor nutricional, pero es necesario para un buen metabolismo. Según Reginald H. Garrett y Charles M. Grisham, autores del libro "Biochemistry", el ácido cítrico es fundamental en el suministro de energía a las células mediante la conversión de los carbohidratos, las proteínas y los ácidos grasos en agua y dióxido de carbono. Este proceso se conoce como el ciclo del ácido cítrico.

Los estudiantes de la facultad de Ingeniería Química que se beneficiarán con los datos investigativos que arrojen las pruebas en los productos, para realizar nuevas propuestas de estudio.

1.9 HIPÓTESIS

Existe pérdida de agentes antioxidantes en el jugo embotellado y zumo crudo de frutas.

Detectar y cuantificar la presencia de metabolitos secundarios en muestras de cítricos mediante GC/MS.

Los productos sucedáneos en polvo de bebidas poseen la misma cantidad de antioxidantes que los procesados líquidos.

1.10 VARIABLES

Independiente._ la temperatura de tratamiento en la producción de los jugos.

Dependiente._ la capacidad antioxidante medida a los productos.

1.11 OPERACIONALIZACIÓN DE LAS VARIABLES

VARIABLE	DEFINICIÓN	NIVEL DE MEDICIÓN	MÁXIMO PERMISIBLE	INSTRUMENTO DE MEDICIÓN	INFLUENCIA	NORMA O MÉTODO
Independiente	Temperatura	° c	85 ° c	Termómetro	Degradación de vitamina c	
Dependiente	Medición de antioxidantes	Intervalo entre 50 y 150 µl	200 µl	Espectrofotómetro Genesys 10 UV	Conservación del producto	Método DPPH

Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

CAPITULO 2

MARCO TEÓRICO

Los jugos a base de frutas se pueden clasificar en jugos, néctares y bebidas, se diferencian entre si básicamente por el contenido de la fruta en el producto final; así un jugo es más concentrado que un néctar y un néctar a su vez es más concentrado que una bebida. Las bebidas tienen un 10 % de jugo de fruta y un 90 % de agua y aditivos, contienen un sabor que capta la atención del consumidor pero esto no equipara a los beneficios de los jugos de frutas naturales.

Los néctares contienen un 25 % de jugo de fruta y un 75 % de agua y aditivos. Los jugos contienen un 100% de jugo natural, se aplica únicamente para frutas como naranja, manzana y uva. (Almeida y Flores, 2007)

2.1 Clasificación de jugos por su contenido de fruta



Figura 2.1 clasificación de los jugos

2.1.1 Bebida

Es el producto elaborado de la misma manera que los néctares, pero cuyo contenido de fruta es aún menor, a las cuales se le adiciona azúcar y otros edulcorantes, agua y aditivos como vitamina c, colorantes y saborizantes artificiales. Entre esta definición se encuentran los citrus punch, algunas gaseosas y los te saborizados, entre otras.

2.1.2 Néctar

Es un producto que contiene parte de la pulpa de la fruta finamente tamizada, a la que se ha añadido una cierta cantidad de agua potable, azúcares (edulcorantes en caso de dietéticos), ácido cítrico y diferentes condimentos.

2.1.3 Jugo

Como tal es el líquido obtenido al exprimir frutas frescas, maduras y limpias, sin diluir, concentrar o fermentar. También se consideran jugos los productos obtenidos a partir de jugos concentrados, clarificados, congelados o deshidratados a los cuales se les ha agregado solamente agua en cantidad tal que restituya la eliminada en su proceso.

2.2 Función y causa de los antioxidantes

La evidencia científica acumulada durante las dos últimas décadas indica que más allá de las promesas iniciales de retardar el envejecimiento, los antioxidantes al ser consumido bajo la forma de alimentos tienen un importante potencial para reducir el desarrollo de aquellas enfermedades (cardiovasculares, tumorales y neuro-degenerativas) que actualmente afectan mayormente a la población, dichas enfermedades son atribuidas a un estrés oxidativo que es provocado por el bajo consumo de antioxidantes o la inhibición de las enzimas antioxidantes. Como resultado de tal reconocimiento los antioxidantes han pasado a ser crecientemente considerados como “moléculas cuyo consumo es sinónimo de salud”.

Un antioxidante es un radical libre capaz de retardar o prevenir la oxidación de dicha molécula. (portalantioxidantes.com)

2.3 Métodos para medir la actividad antioxidante

Los métodos indirectos más utilizados son los que cuantifican la capacidad captadora de radicales libres que tiene un compuesto, como por ejemplo los métodos DPPH y ABTS en los que se utilizan radicales coloreados y se determina la capacidad antioxidante mediante la cuantificación de la decoloración de los radicales

2.3.1 - Método ABTS

Según la metodología desarrollada el radical $ABTS^{•+}$ se obtiene tras la reacción de ABTS (7 mM) con persulfato potásico (2,45 mM, concentración final) incubados a temperatura ambiente ($\pm 25^{\circ}C$) y en la oscuridad durante 16 h. Las muestras filtradas (antocianos) se diluyen con etanol hasta que se produce una inhibición del 20 al 80%, en comparación con la absorbancia del blanco, tras añadir 20 μL de la muestra. La absorbancia se mide de forma continua transcurridos 7 minutos. El antioxidante sintético de referencia.

2.3.2 - Método DPPH

Este método se basa en la reducción de la absorbancia medida a 517nm del radical $DPPH^{\bullet}$, por antioxidantes. La medida de la absorbancia del radical $DPPH^{\bullet}$ 100 μM (3,9 ml) disuelto en metanol al 80%, a la longitud de onda de 517 nm. Se añade 0,1 mL de la muestra o patrón, la mezcla se homogeniza cuidadosamente, y se mantiene en la oscuridad durante 30 minutos.

2.3.3 - Método DMPD

Este se basa en añadir 1 mL de la disolución de DMPD 100 mM a 100 mL de disolución tamponada con ácido acético/ acetato de sodio 0,1 M (pH 5,25). Tras la adición de 0,2 mL de una disolución de cloruro férrico 0,05 M (concentración final de 0,1 mM) se forman radicales cationes coloreados ($DMPD^{\bullet+}$). Un mililitro de esta disolución se traslada a una cubeta midiéndose su absorbancia, comprendida entre 0,90 ($\pm 0,1$), a 506 nm. Se añade 50 μL

de una disolución patrón de antioxidante o de muestras diluidas y transcurridos diez minutos (a 25°C) se hace otra medida de absorbancia a 506 nm. La disolución tamponada de acetato se utiliza como blanco de referencia.

2.4 Cantidad de miligramos de vitamina C presentes en frutas crudas

Principales frutas que son utilizadas en la producción de jugos, bebidas y néctares:

Alimento	Porción	Vitamina C
		mg. (miligramos)
naranja	1 copa (220 ml)	124
Frutillas	1 copa (220 ml)	105
moras	1 taza (180 g.)	30

Fuente: www.mejorconsalud.com

En la siguiente tabla se establecen la ingesta diaria recomendada de vitamina C según el Departamento de Nutrición del IOM (Instituto de Medicina) y USDA (Departamento de Agricultura de Estados Unidos) tanto para infantes, niños y adultos.

2.4.1 Dosis diarias recomendadas de vitamina C

Edad	Hombres	Mujeres
	(mg/día)	(mg/día)
0 a 12 meses	ND	
1 a 3 años	15	
4 a 8 años	25	
9 a 13 años	45	45
14 a 18 años	75	65
19 a 50 años	90	75
>50 años	90	75
Embarazo		80 a 85
Lactancia		115

Fuente: www.mejorconsalud.com

Un nuevo estudio realizado por investigadores de la Universidad de Santiago de Compostela probó por medio de una nueva técnica que separa e identifica los elementos químicos de un producto, que la cantidad de Vitamina C que se indica en las etiquetas de los jugos envasados es siempre mayor a la que realmente se está consumiendo.

Se encontró que la Vitamina C se pierde por oxidación en los contenedores de jugos de frutas por aire residual que se queda atrapado dentro del contenedor durante su producción.

2.5 Factores que afectan la degradación:

Principalmente esto se da en el proceso de pasteurización que es el método de someter los alimentos a altas temperaturas y acto seguido a temperaturas bajas, y de ese modo se eliminan las bacterias presentes tanto las que resisten frío o calor, pero a su vez este proceso afecta irreversiblemente a las características físicas y químicas de la materia prima. Debido a esto se puede decir que:

Los antioxidantes son sensibles a distintos factores extrínsecos al alimento como:

- La temperatura
- La luz
- La presencia de oxígeno

Así como a factores intrínsecos:

- pH del alimento
- Presencia de componentes de elementos de transición y de cualquier otro factor que facilite la oxidación. Esto hace que las vitaminas sufran pérdidas y/o cambios en su estructura durante los procesos tecnológicos y culinarios que determinan una menor disponibilidad y/o una pérdida de valor nutritivo.

Para revertir estas pérdidas se determina que los jugos cítricos deben ser sometidos a un proceso UHT que consiste en: un tratamiento a alta temperatura por el cual los productos están expuestos a una temperatura muy alta (de media 140°C) durante 4 segundos. La ventaja del sistema del

UHT comparado con el sistema de esterilización clásico es la mejor retención de las propiedades originales del producto consiguiendo un equilibrio ideal entre sabor fresco y tiempo de conservación.

2.6 Aditivos que contienen los jugos procesados

- **Dióxido de sulfuro.**- se usa de manera tradicional como antioxidante y antimicrobiano y es capaz de inhibir el pardeamiento (oscurecimiento), pero estudios realizados por distintos organismos de salud revelan que su ingesta afecta a las personas asmáticas, causa dermatitis y reduce el valor nutricional de las vitaminas.
- **Ácido benzoico.**- Conservante sintético que se utiliza para prevenir levaduras y bacterias, En estudios con animales provocó ataques epilépticos y su acumulación en el organismo se puede producir un riesgo de cáncer.
- **Ácido ascórbico.**- actúa como antioxidante, se obtiene de forma natural por extracción de frutas y vegetales o de forma sintética por fermentación bacteriana de glucosa seguido por una oxidación química. No se ha encontrado ningún efecto secundario. No se recomienda consumir más de 10 mg/día porque podría provocar diarreas y cálculos renales.

- **Tartrazina.-** Colorante sintético es de color amarillo. Se obtiene derivado del petróleo, causa hiperactividad en niños, insomnio e intolerancia en personas alérgicas.
- **Sorbitol.-** Edulcorante sintético utilizado como sustituto de azúcar, su uso provoca flatulencias, diarrea y puede agravar el síndrome del intestino irritable. No está permitido su uso en alimentos para niños menores de 1 año porque puede causar diarreas severas.
- **Acesulfame-k.-** Potenciador del sabor y edulcorante sintético que endulza 200 veces más que el azúcar. Como tiene sabor amargo, podría ser cancerígeno (con mayor incidencia de cáncer sobre los hombres) y estar unido a problemas neurológicos

2.7 Norma De Calidad Jugos

La norma ecuatoriana vigente para todo lo que es jugos, pulpas, concentrados, néctares, bebidas de frutas y vegetales es la norma NTE INEN2 337:2008.

2.7.1 DISPOSICIONES ESPECÍFICAS

- El jugo y la pulpa debe ser extraído bajo condiciones sanitarias apropiadas, de frutas maduras, sanas, lavadas y sanitizadas, aplicando los principios de Buenas Prácticas de Manufactura,(BPM).

- La concentración de plaguicidas no deben superar los límites máximos establecidos en el Codex Alimentario (Volumen 2) y el FDA (Part. 193).
- Los principios de buenas prácticas de manufactura deben propender reducir al mínimo la presencia de fragmentos de cáscara, de semillas, de partículas gruesas o duras propias de la fruta.
- Los productos deben estar libres de insectos o sus restos, larvas o huevos de los mismos.
- Los productos pueden llevar en suspensión parte de la pulpa del fruto finamente dividida.
- No se permite la adición de colorantes artificiales y aromatizantes (con excepción de lo indicado en 4.7 y 4.9), ni de otras sustancias que disminuyan la calidad del producto, modifiquen su naturaleza o den mayor valor que el real.
- Únicamente a las bebidas de fruta se pueden adicionar colorantes, aromatizantes, saborizantes y otros aditivos tecnológicamente necesarios para su elaboración establecidos en la NTE INEN 2 074.
- Como acidificante podrá adicionarse jugo de limón o de lima o ambos hasta un equivalente de 3 g/l como ácido cítrico anhidro.
- Se permite la restitución de los componentes volátiles naturales, perdidos durante los procesos de extracción, concentración y tratamientos térmicos de conservación, con aromas naturales.

- Se permite utilizar ácido ascórbico como antioxidante en límites máximos de 400 mg/kg.
- Se puede adicionar enzimas y otros aditivos tecnológicamente necesarios para el procesamiento de los productos, aprobados en la NTE INEN 2 074, Codex Alimentario, o FDA o en otras disposiciones legales vigentes.
- Se permite la adicción de los edulcorantes aprobados por la NTE INEN 2 074, Codex Alimentario, y FDA o en otras disposiciones legales vigentes.
- Sólo a los néctares de fruta pueden añadirse miel de abeja y/o azúcares derivados de frutas.
- Se pueden adicionar vitaminas y minerales de acuerdo con lo establecido en la NTE INEN 1 334-2 y en las otras disposiciones legales vigentes.
- La conservación del producto por medios físicos puede realizarse por procesos térmicos: pasteurización, esterilización, refrigeración, congelación y otros métodos adecuados para ese fin; se excluye la radiación ionizante.
- La conservación de los productos por medios químicos puede realizarse mediante la adición de las sustancias indicadas en la tabla 15 de la NTE INEN 2 074.

- Los productos conservados por medios químicos deben ser sometidos a procesos térmicos.
- Se permite la mezcla de una o más variedades de frutas, para elaborar estos productos y el contenido de sólidos solubles (°Brix), será ponderado al aporte de cada fruta presente.
- Puede añadirse jugo obtenido de la mandarina *Citrus reticulata* y/o híbridos al jugo de naranja en una cantidad que no exceda del 10% de sólidos solubles respecto del total de sólidos solubles del jugo de naranja.
- Puede añadirse jugo de limón (*Citrus limon*(L.) Burm. f. *Citrus limonum* Rissa) o jugo de lima (*Citrus aurantifolia*(Christm.), o ambos, al jugo de fruta hasta 3 g/l de equivalente de ácido cítrico anhidro para fines de acidificación a jugos no endulzados.
- Puede añadirse jugo de limón o jugo de lima, o ambos, hasta 5 g/l de equivalente de ácido cítrico anhidro a néctares de frutas.

CAPÍTULO 3

EXPERIMENTACIÓN

3.1 METODOLOGIA

- Preparación de las muestras adicionando metanol para producir los extractos.
- Determinación de la capacidad antioxidante utilizando el Espectrofotómetro Génesis 10.
- Comparación y análisis de los resultados obtenidos en el ensayo realizado espectrofotométricamente.
- Análisis mediante GC/MS de los componentes del zumo crudo de la naranja y limón utilizando el equipo AGILEN.

3.2 Calculo de la inhibición de radicales libres por la actividad de los flavonoides presente en las muestras mediante la prueba del DPPH.

Se realizó la experimentación para determinar la actividad inhibidora de los radicales libres mediante el método DPPH que se llevó a cabo en el laboratorio de Microbiología de la facultad de Ingeniería Química. Usando un equipo de espectrofotometría a una banda de luz establecidas determino el porcentaje de inhibición de las muestras de jugos.

Las muestras se prepararon de acuerdo a un orden:

- Zumo de fruta sin pasteurizar

- Zumo de fruta pasteurizado
- Bebida de frutas comerciales
- Bebida en polvo comercial

Equipo

- Espectrofotómetro génesis 10 uv
- Computador con programa DATALYSE

Reactivos

- Solución de DPPH 0.1 mili molar (0.019716 g de DPPH / 500 ml de alcohol metílico)
- Alcohol metílico
- Muestra

3.3 Preparación de las muestras

- Las muestras son preparadas en este caso se extrae el zumo de los diversos cítricos para la experimentación.





Figura 3.1 Preparación de la muestras

- Unas muestras de zumo se pasteurizan para la determinación de flavonoides



Figura 3.2 Proceso de Pasteurización a escala experimental

- Las muestras luego se coloca en tubos de ensayo y se les adicional metanol para producir los extractos metanolicos, estos se dejan reposar 24 horas a una temperatura controlada en la refrigeradora.



Figura 3.3 Muestras de jugos comerciales y en polvo

3.4 Preparación de la Solución del Reactivo (DPPH)

Se procede elaborar una dilución de 2,2-difenil-1-picril-hidracilo en metanol (grado reactivo), para obtener una solución de DPPH con una concentración de 0.1mM.

3.5 Recta de Calibración del Reactivo

- Se calibra el espectrofotómetro colocando cantidades exactas de DPPH con metanol y se corre una prueba que nos da una recta de calibración.



Figura 3.4 Extractos metanol + DPPH

- Se carga las cubetas con aproximadamente 2 ml de los extractos.



- Se introduce en los compartimientos del espectrofotómetro genesys 10 uv

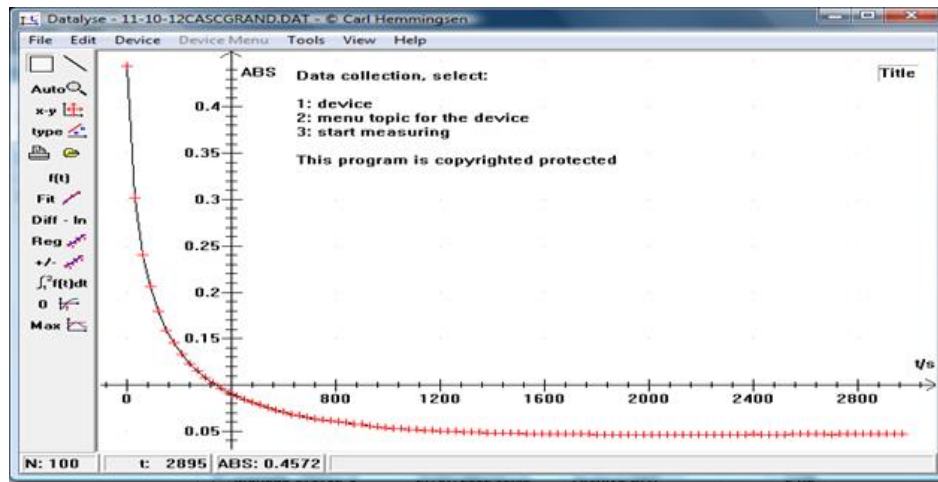


- Se introduce la data en el programa DATALYSE y se realiza la corrida

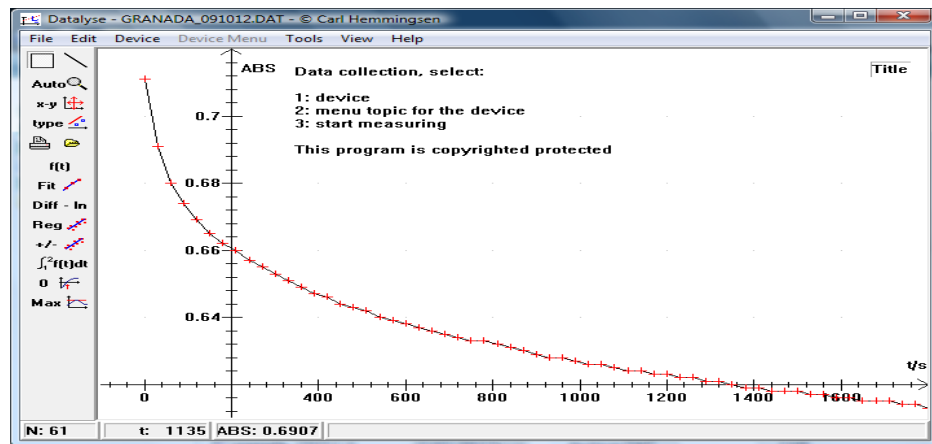
CELL NAMBER	1
WAVELENGTH	517
No. OF MEAS	30
TIME/MEAS	30

Datos requerido por el DATALYSE para realizar la corrida

- Se realiza la corrida y se obtiene dos posibles resultados:
El objetivo es tener una curva “estabilizada” que significa que el grafico se forma una línea recta de lo contrario la gráfica no está estabilizada, y se realizara un tanteo de la dosis a analizar hasta estabilizar la curva.



Curva estabilizada



Curva no estabilizada

CAPÍTULO 4

ANÁLISIS DE RESULTADO

4.1 RESULTADOS DE LAS PRUEBAS OBTENIDAS POR EL METODO DE DPPH PARA LA DETERMINACION DE ANTIOXIDANTES.

Porcentaje de actividad antioxidante y DPPH remanente en cada una de las pruebas

$$\text{Actividad Antioxidante} = \frac{(\text{Abs control} - \text{Abs muestra})}{\text{Abs control}} \times 100$$

Abs control= Lectura de reactivo puro (DPPH = 1,182)
Abs muestra= Absorbancia inicial del estudio

$$\%DPPH \text{ rendimiento} = \left(\frac{\text{Abs muestra}}{\text{Abs control}} \right) \times 100$$

Abs muestra = Absorbancia inicial del estudio
Abs control = Lectura de reactivo puro (DPPH = 1,182)

$$\%Inhibición = \left(\frac{abs_i - abs_f}{abs_i} \right) \times 100$$

abs_i= Absorbancia inicial del estudio
abs_f= Absorbancia final del estudio

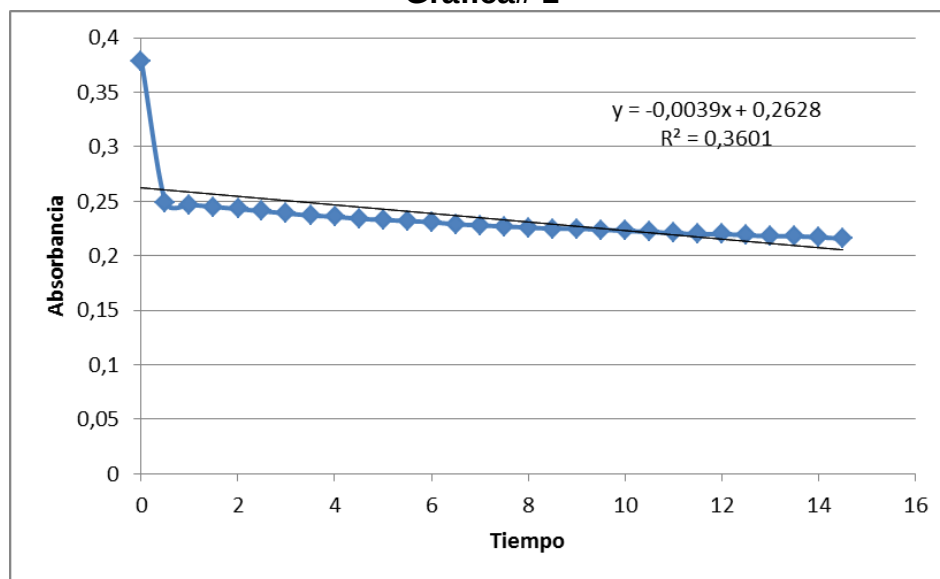
Prueba # 1: 100ulzumo naranja; 14/09/2013;

Aa (Actividad antioxidante) = 67.93 %

DPPH rem = 32.06 %

% inhibición= 43.00

Gráfica# 1



Tabla# 1: lecturas

t/min	ABS	5,00035	0,233	10,5009167	0,222
0,00103333	0,379	5,50055	0,232	11,0001167	0,221
0,5002	0,249	6,00083333	0,231	11,5003667	0,22
1,00048333	0,247	6,5	0,229	12,0006167	0,22
1,50071667	0,245	7,00026667	0,228	12,50085	0,219
2,00093333	0,243	7,5005	0,227	13,00005	0,218
2,50013333	0,241	8,00075	0,226	13,5003	0,218
3,00038333	0,239	8,50101667	0,225	14,0005167	0,217
3,50065	0,237	9,00016667	0,225	14,5007833	0,216
4,00086667	0,236	9,50043333	0,224		
4,50008333	0,234	10,0007	0,223		

Fuente: Análisis Espectrofotométrico zumo crudo de naranja

Elaborado por:Batioja Ana, Corozo Livia

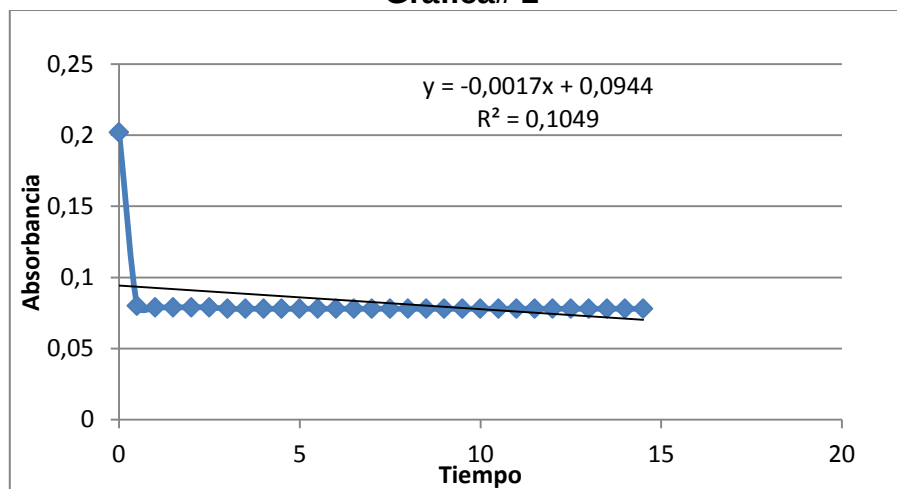
Prueba # 2: 200 µl de muestra ,14/09/13 zumo de naranja.

Aa(Actividad antioxidante) = 82.91 %

DPPH rem = 17.09%

% inhibición= 61.38

Gráfica# 2



Tabla# 2

muestra de naranja con 200µl		
t/s	t/min	ABS
0,062	0,00103333	0,202
30,015	0,50025	0,08
60,029	1,00048333	0,079
90,045	1,50075	0,079
120,059	2,00098333	0,079
150,011	2,50018333	0,079
180,026	3,00043333	0,078
210,041	3,50068333	0,078
240,055	4,00091667	0,078
270,007	4,50011667	0,078
300,02	5,00033333	0,078
330,036	5,5006	0,078
360,051	6,00085	0,078
390,004	6,50006667	0,078

420,017	7,00028333	0,078
450,032	7,50053333	0,078
480,048	8,0008	0,078
510,062	8,50103333	0,078
540,013	9,00021667	0,078
570,027	9,50045	0,078
600,043	10,0007167	0,078
630,058	10,5009667	0,078
660,009	11,00015	0,078
690,024	11,5004	0,078
720,037	12,0006167	0,078
750,052	12,5008667	0,078
780,005	13,0000833	0,078
810,019	13,5003167	0,078
840,035	14,0005833	0,078
870,05	14,5008333	0,078

Fuente: Análisis Espectrofotométrico zumo crudo de naranja

Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

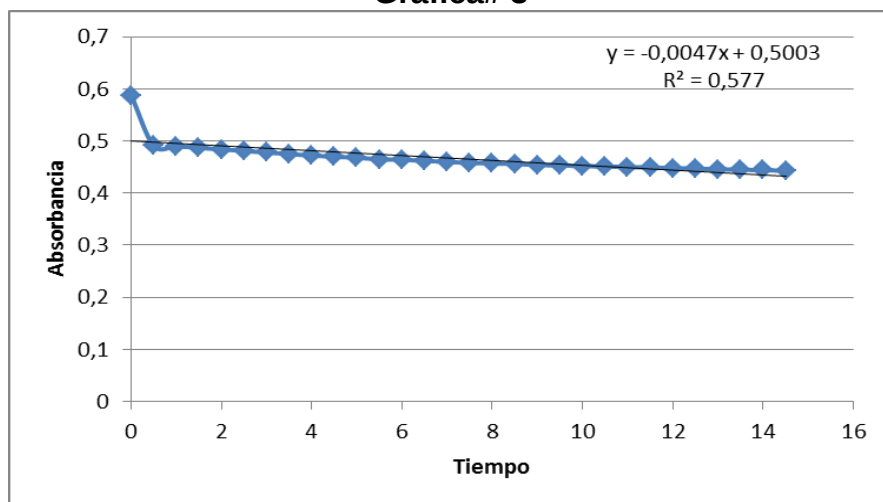
Prueba # 3: 50 µl de muestra, 14/09/13

Aa (Actividad antioxidante) = 50.25 %

DPPH rem = 49.75 %

% inhibición= 24.65

Gráfica# 3



Tabla# 3

muestra de mandarina con 50µl					
t/s	t/min	ABS			
0,061	0,00101667	0,588	420,017	7,00028333	0,46
30,015	0,50025	0,491	450,03	7,5005	0,458
60,028	1,00046667	0,49	480,047	8,00078333	0,457
90,041	1,50068333	0,487	510,058	8,50096667	0,456
120,057	2,00095	0,484	540,013	9,00021667	0,454
150,011	2,50018333	0,481	570,027	9,50045	0,453
180,025	3,00041667	0,478	600,041	10,0006833	0,452
210,037	3,50061667	0,475	630,055	10,5009167	0,451
240,053	4,00088333	0,472	660,009	11,00015	0,45
270,006	4,5001	0,47	690,023	11,5003833	0,449
300,02	5,00033333	0,468	720,036	12,0006	0,448
330,034	5,50056667	0,465	750,051	12,50085	0,447
360,049	6,00081667	0,464	780,003	13,00005	0,446
390,001	6,50001667	0,462	810,017	13,5002833	0,445
			840,033	14,00055	0,444
			870,047	14,5007833	0,443

Fuente: Análisis Espectrofotométrico zumo crudo de mandarina

Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

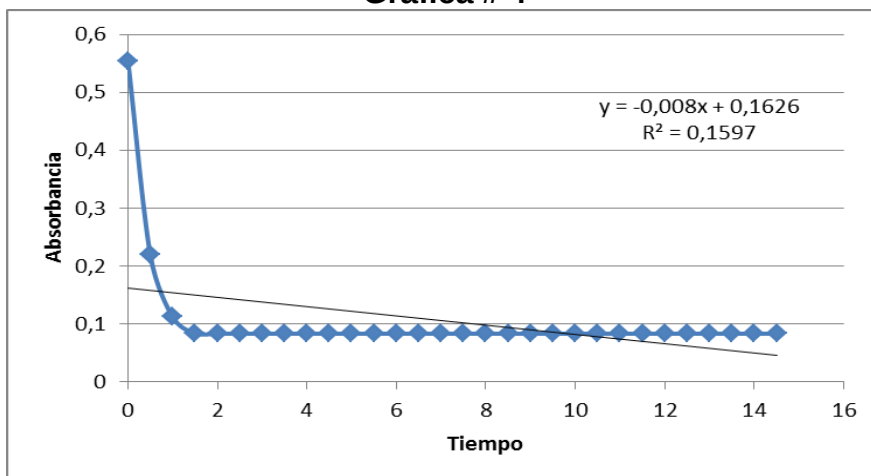
Prueba#4: 250 µl de muestra de zumo de limón; 14/09/13

Aa (Actividad antioxidante) = 53.13 %

DPPH rem = 46.87 %

% inhibición= 85.01

Gráfica # 4



Tabla# 4

muestra de limon con 250µl					
t/s	t/min	ABS			
0,063	0,00105	0,554	420,017	7,00028333	0,083
30,015	0,50025	0,219	450,033	7,50055	0,083
60,03	1,0005	0,112	480,049	8,00081667	0,083
90,046	1,50076667	0,084	510	8,5	0,083
120,061	2,00101667	0,083	540,013	9,00021667	0,083
150,012	2,5002	0,083	570,028	9,50046667	0,083
180,026	3,00043333	0,083	600,049	10,0008167	0,083
210,04	3,50066667	0,083	630,057	10,50095	0,083
240,055	4,00091667	0,083	660,012	11,0002	0,083
270,008	4,50013333	0,083	690,024	11,5004	0,083
300,023	5,00038333	0,083	720,039	12,00065	0,083
330,038	5,50063333	0,083	750,054	12,5009	0,083
360,052	6,00086667	0,083	780,006	13,0001	0,083
390,004	6,50006667	0,083	810,021	13,50035	0,083
			840,034	14,0005667	0,083
			870,051	14,50085	0,083

Fuente: Análisis Espectrofotométrico a muestra zumo crudo de limón

Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

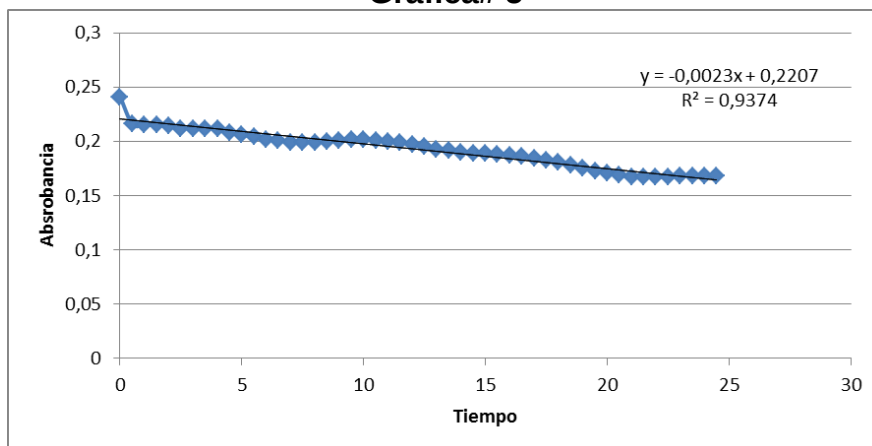
Prueba#5: 500 µl de muestra de zumo de naranja; 14/09/2013.

% inhibición: 30.29

Aa (Actividad antioxidante) = 79.61 %

DPPH rem = 20.39 %

Gráfica# 5



Tabla# 5

t/min	ABS
0,00105	0,241
0,50025	0,216
1,00048333	0,215
1,50071667	0,215
2,00096667	0,214
2,50016667	0,212
3,0004	0,212
3,50065	0,212
4,00088333	0,212
4,50033333	0,208
5,00036667	0,206
5,50065	0,204
6,00086667	0,202
6,50083333	0,201
7,00033333	0,199
7,50058333	0,199

8,00078333	0,199
8,50001667	0,2
9,00023333	0,201
9,50056667	0,202
10,0007167	0,202
10,501	0,201
11,0001833	0,2
11,5004	0,199
12,00065	0,197
12,5009333	0,195
13,0001	0,193
13,5003333	0,192
14,0006	0,19
14,5008333	0,189
15,0000333	0,189
15,5002667	0,188
16,0005333	0,187

16,5007667	0,186
17,001	0,184
17,5001667	0,183
18,0003333	0,181
18,5006667	0,178
19,0008333	0,175
19,5	0,173
20,0003333	0,171
20,5005	0,169
21,0008333	0,167
21,5	0,167
22,0003333	0,167
22,5005	0,167
23,0006667	0,168
23,5	0,168
24,0001667	0,168
24,5005	0,168

Fuente: Análisis Espectrofotométrico zumo crudo de naranja

Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

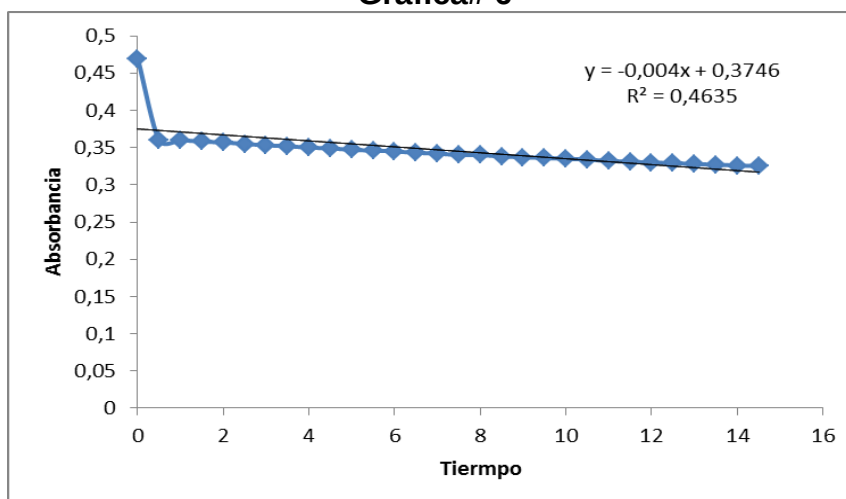
Prueba#6: 50 µl de naranja prueba realizada el 21/09/2013

Aa (Actividad antioxidante) = 60.32 %

DPPH rem = 39.68 %

% inhibición= 30.70

Gráfica# 6



Tabla# 6

Muestra con 50µl					
t/s	t/min	ABS			
0,06	0,001	0,469	420,015	7,00025	0,342
30,012	0,5002	0,36	450,028	7,500466667	0,34
60,024	1,0004	0,36	480,043	8,000716667	0,34
90,041	1,500683333	0,358	510,058	8,500966667	0,338
120,056	2,000933333	0,357	540,009	9,00015	0,337
150,006	2,5001	0,355	570,023	9,500383333	0,336
180,021	3,00035	0,353	600,037	10,00061667	0,335
210,037	3,500616667	0,352	630,054	10,5009	0,334
240,05	4,000833333	0,35	660,005	11,00008333	0,332
270,002	4,500033333	0,349	690,019	11,50031667	0,331
300,017	5,000283333	0,347	720,033	12,00055	0,33
330,031	5,500516667	0,346	750,05	12,50083333	0,329
360,047	6,000783333	0,345	780,002	13,00003333	0,328
390,061	6,501016667	0,343	810,015	13,50025	0,327
			840,03	14,0005	0,326
			870,046	14,50076667	0,325

Fuente: Análisis Espectrofotométrico zumo crudo de naranja

Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

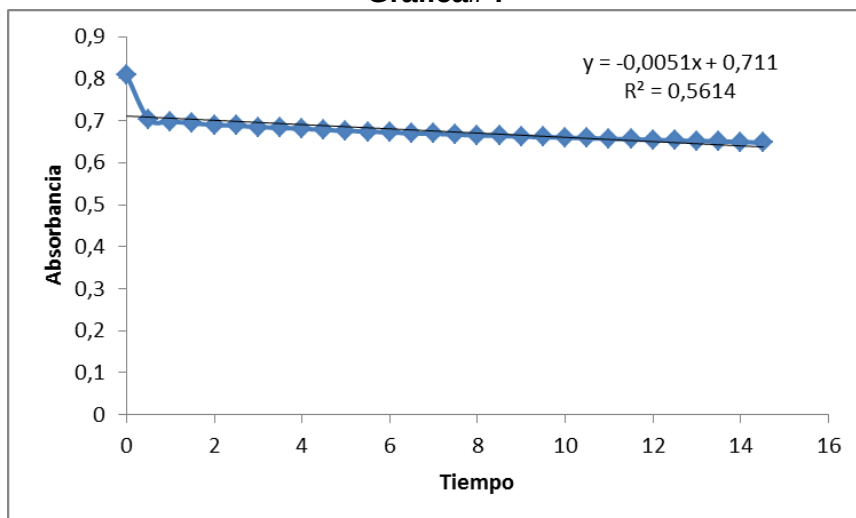
Prueba#7: 50 µl de muestra de Toronja sin pasteurizar.21/09/2013

Aa (Actividad antioxidante) = 31.56%

DPPH rem = 68.44%

% inhibición= 19.90

Gráfica# 7



Tabla# 7

t/min	ABS
0,00091667	0,809
0,50011667	0,704
1,0004	0,698
1,50061667	0,694
2,00086667	0,69
2,50035	0,688
3,00056667	0,685
3,5008	0,683
4	0,681
4,50023333	0,678
5,0005	0,676
5,50075	0,674
6,001	0,672
6,50016667	0,67
7,00041667	0,669
7,50066667	0,667

8,0009	0,665
8,50011667	0,664
9,00036667	0,662
9,5006	0,661
10,0008667	0,66
10,5000333	0,658
11,0002833	0,657
11,5005167	0,656
12,0008	0,654
12,5	0,653
13,0002167	0,652
13,5005667	0,651
14,0007	0,649
14,5009667	0,648

Fuente: Análisis Espectrofotométrico zumo crudo de toronja

Elaborado por:Batioja Ana, Corozo Livia

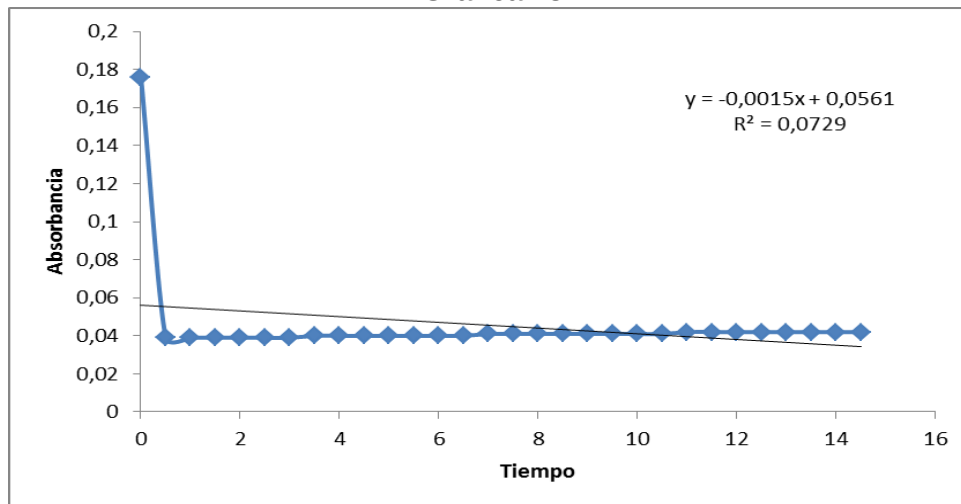
Prueba#8: 100 µl de muestra de Toronja sin pasteurizar 21/09/2013

Aa (Actividad antioxidante) = 85.11 %

DPPH rem = 14.89 %

% inhibición= 76.13

Gráfica# 8



Tabla# 8

t/min	ABS
0,001	0,176
0,50023333	0,039
1,00045	0,039
1,50071667	0,039
2,00093333	0,039
2,50116667	0,039
3,0004	0,039
3,50063333	0,04
4,00086667	0,04
4,5001	0,04
5,00031667	0,04
5,50056667	0,04
6,0008	0,04
6,50001667	0,04
7,00025	0,041
7,50055	0,041

8,00076667	0,041
8,50098333	0,041
9,00118333	0,041
9,50045	0,041
10,0007	0,041
10,50093333	0,041
11,001167	0,042
11,5006167	0,042
12,0008833	0,042
12,5000667	0,042
13,0003167	0,042
13,5005667	0,042
14,0008	0,042
14,5	0,042

Fuente: Análisis Espectrofotométrico zumo crudo de toronja

Elaborado por:Batioja Ana, Corozo Livia

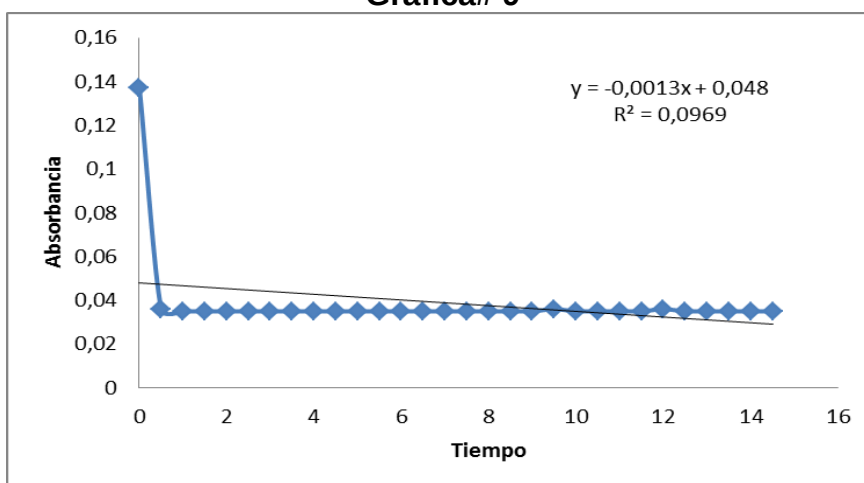
Prueba#9: 50 µl de naranja no pasteurizada 6/10/2013.

Aa (Actividad antioxidante) = 88.40%

DPPH rem = 11.59%

% inhibición= 74.45

Gráfica# 9



Tabla# 9

t/min	ABS
0,00105	0,137
0,50025	0,036
1,00048333	0,035
1,50073333	0,035
2,00096667	0,035
2,50016667	0,035
3,0004	0,035
3,50065	0,035
4,00088333	0,035
4,50008333	0,035
5,00033333	0,035
5,50056667	0,035
6,00081667	0,035
6,50001667	0,035
7,00025	0,035
7,5005	0,035

8,00073333	0,035
8,50098333	0,035
9,00018333	0,035
9,50041667	0,036
10,0006667	0,035
10,5009	0,035
11,0001	0,035
11,50035	0,035
12,0005833	0,036
12,5008167	0,035
13,0000333	0,035
13,5002667	0,035
14,0010333	0,035
14,5002333	0,035

Fuente: Análisis Espectrofotométrico zumo crudo de naranja

Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

Marcas de jugos comerciales y jugos en polvo (instantáneos)

Prueba#10: 100 µl de muestra de jugo el valle. Análisis realizado el

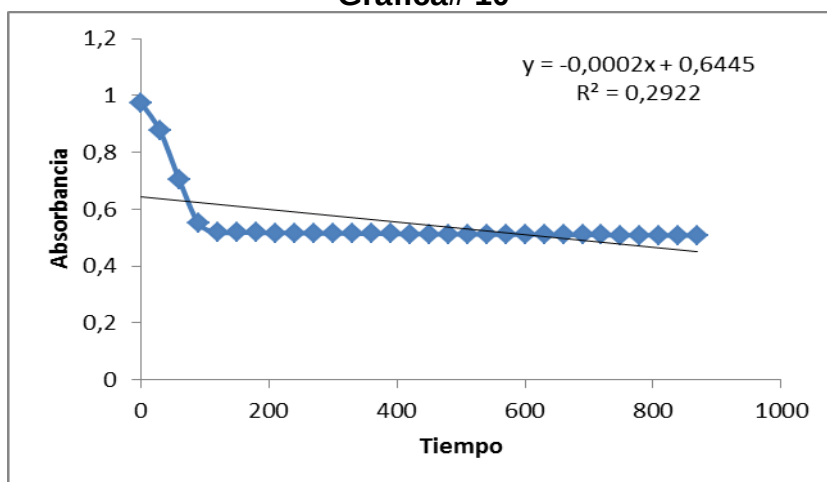
15/02/2014

Aa (Actividad antioxidante) = 17,52 %

DPPH rem = 82,4873096%

% inhibición= 48

Gráfica# 10



Tabla# 10

t/min	ABS
0,00095	0,975
0,500167	0,875
1,0004	0,703
1,500633	0,551
2,0009	0,519
2,500117	0,518
3,000317	0,517
3,500567	0,516
4,00085	0,516
4,500033	0,515

5,000267	0,514
5,500517	0,514
6,00075	0,513
6,501017	0,513
7,000183	0,512
7,50045	0,512
8,0007	0,511
8,500933	0,511
9,00015	0,511
9,500383	0,51
10,00062	0,51

10,50085	0,51
11,00008	0,509
11,5003	0,509
12,00057	0,509
12,5008	0,508
13	0,508
13,50023	0,508
14,0005	0,507
14,50073	0,507

Fuente: Análisis Espectrofotométrico jugo del valle

Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

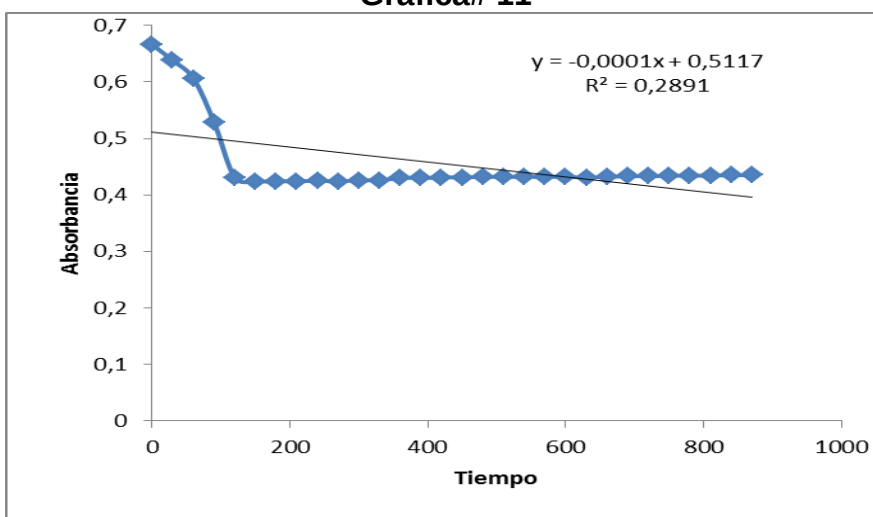
Prueba#11: 100 µl de muestra de jugo el valle sabor naranja, el 15/02/2014

Aa (Actividad antioxidante) = 43,65 %

DPPH rem = 56.35 %

% inhibición= 34.68

Gráfica# 11



Tabla# 11

t/min	ABS
0,0011	0,666
0,5003	0,638
1,0005	0,606
1,5007	0,528
2,001	0,43
2,5002	0,424
3,0007	0,424
3,5009	0,424
4,0001	0,425
4,5004	0,424
5,0006	0,426
5,5008	0,426
6	0,43
6,5003	0,43
	0,431

7,0005	
7,5008	0,431
8,001	0,432
8,5002	0,432
9,0004	0,432
9,5007	0,432
10,001	0,432
10,5	0,431
11	0,432
11,501	0,433
12,001	0,433
12,5	0,434
13	0,434
13,501	0,434
14,001	0,435
14,501	0,435

Fuente: Análisis Espectrofotométrico jugo del valle
Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

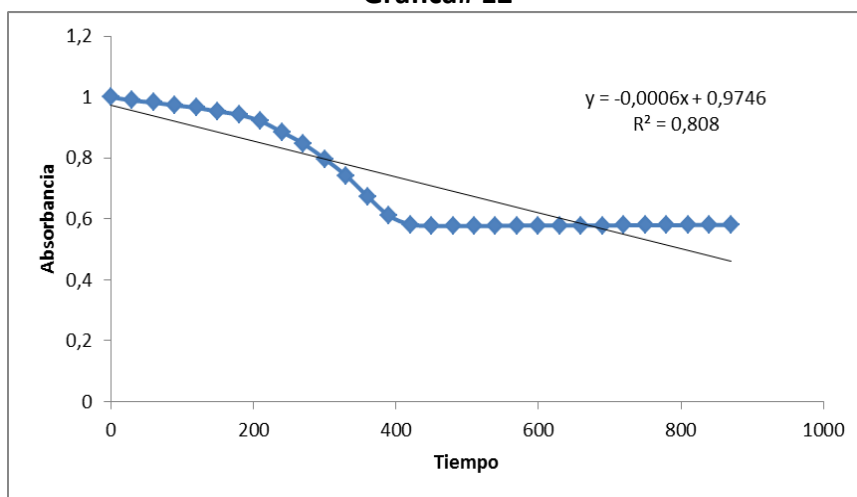
Prueba #12:100 µl original limón,(comercial),análisis realizado el 15/02/2014

Aa (Actividad antioxidante) = 15,39 %

DPPH rem = 84,60%

% inhibición= 42

Gráfica# 12



Tabla# 12

t/min	ABS
0,0011	1
0,5003	0,989
1,0005	0,982
1,5007	0,973
2,001	0,965
2,5002	0,953
3,0004	0,942
3,5007	0,921
4,0009	0,885
4,5001	0,847
5,0006	0,797
5,5008	0,742
6	0,674
6,5005	0,611

7,0008	0,582
7,501	0,577
8,0002	0,577
8,5005	0,577
9,0007	0,577
9,501	0,578
10	0,578
10,5	0,578
11,001	0,578
11,501	0,578
12	0,579
12,5	0,579
13,001	0,579
13,501	0,58
14,001	0,58
14,5	0,58

Fuente: Análisis Espectrofotométrico original de limón (comercial)

Elaborado por:Batioja Ana, Corozo Livia

PRUEBA # 13: 100 µl Mccornick-jugo de limón; prueba realizada el

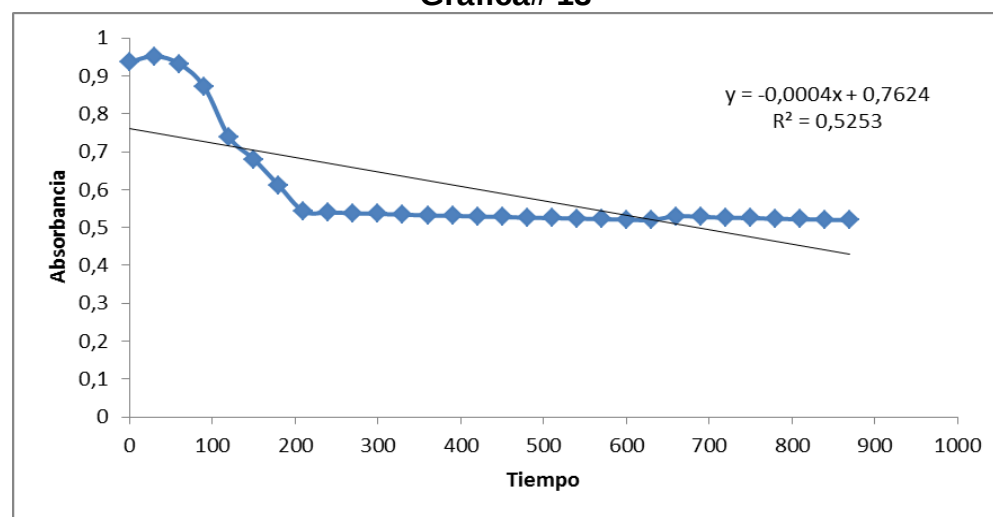
15/02/2014

Aa (Actividad antioxidante) = 20.73 %

DPPH rem = 79.30 %

% inhibición= 44.61

Gráfica# 13



Tabla# 13

t/min	ABS
0,0009	0,937
0,5001	0,952
1,0003	0,932
1,5006	0,871
2,0008	0,739
2,5	0,68
3,0003	0,611
3,5005	0,543
4,0008	0,54
4,501	0,538

5,0002	0,536
5,5004	0,534
6,0007	0,532
6,5009	0,531
7,0001	0,529
7,5004	0,528
8,0006	0,526
8,5009	0,525
9	0,524
9,5003	0,522
10,001	0,521

10,501	0,52
11,001	0,53
11,5	0,528
12	0,526
12,501	0,525
13,001	0,523
13,5	0,522
14	0,521
14,501	0,519

Fuente: Análisis Espectrofotométrico zumo de limón

Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

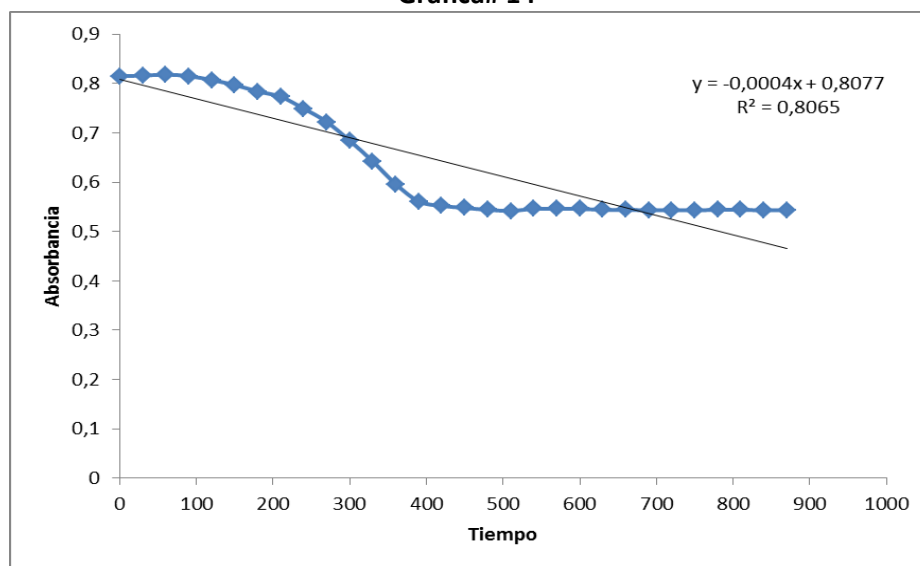
PRUEBA#14 se tomó 100 µl tesalia ice,15/02/2014

Aa (Actividad antioxidante) = 49,25%

DPPH rem = 68,95%

% inhibición= 33.37

Gráfica# 14



Tabla# 14

t/min	ABS
0,001	0,815
0,5002	0,816
1,0005	0,818
1,5007	0,815
2,001	0,807
2,5002	0,797
3,0004	0,784
3,5007	0,773
4,0009	0,749
4,5001	0,722

5,0003	0,684
5,5006	0,642
6,0008	0,596
6,5	0,561
7,0003	0,552
7,5005	0,548
8,0007	0,544
8,501	0,542
9,0002	0,546
9,5004	0,546
10,001	0,546

10,5	0,544
11	0,544
11,501	0,543
12,001	0,543
12,5	0,543
13	0,544
13,501	0,544
14,001	0,543
14,5	0,543

Fuente: Análisis Espectrofotométrico tesalia ice

Elaborado por:Batioja Ana, Corozo Livia

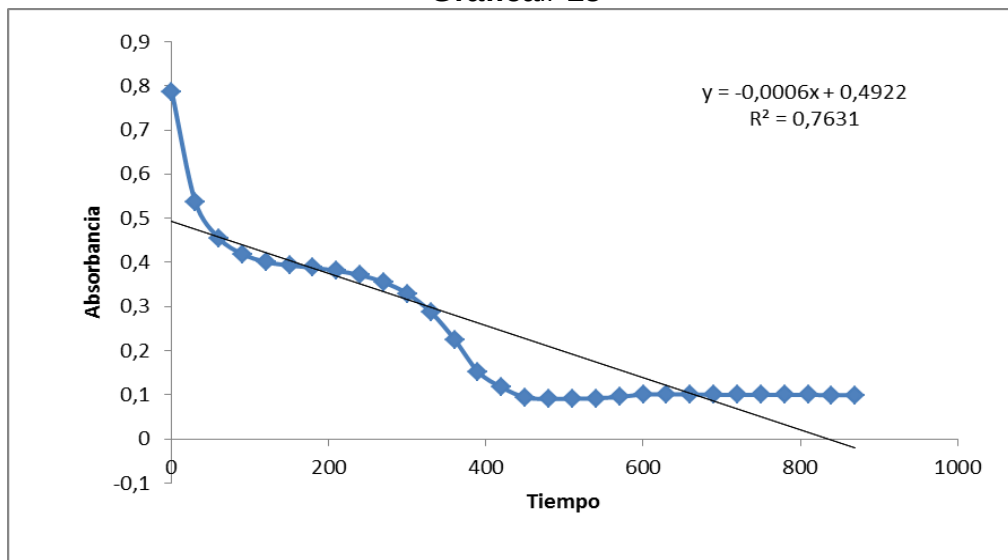
Prueba#15:100 µl Tampico citrus punch (naranja, limón, mandarina), prueba realizada el 19/02/2014.

Aa (Actividad antioxidante) = 33.42%

DPPH rem = 66.58 %

% inhibición= 87.42

Gráfica# 15



Tabla# 15

t/min	ABS
0,001	0,787
0,5002	0,537
1,0005	0,455
1,5007	0,419
2,001	0,401
2,5002	0,393
3,0007	0,388
3,5007	0,381
4,0009	0,371
4,5001	0,355

5,0003	0,329
5,5006	0,287
6,0008	0,225
6,5	0,152
7,0003	0,117
7,5005	0,094
8,0007	0,091
8,501	0,091
9,0002	0,092
9,5004	0,095
10,001	0,101

10,501	0,101
11	0,101
11,5	0,1
12,001	0,1
12,501	0,1
13	0,1
13,5	0,1
14,001	0,099
14,501	0,099

Fuente: Análisis Espectrofotométrico tampico citrus punch

Elaborado por:Batioja Ana, Corozo Livia

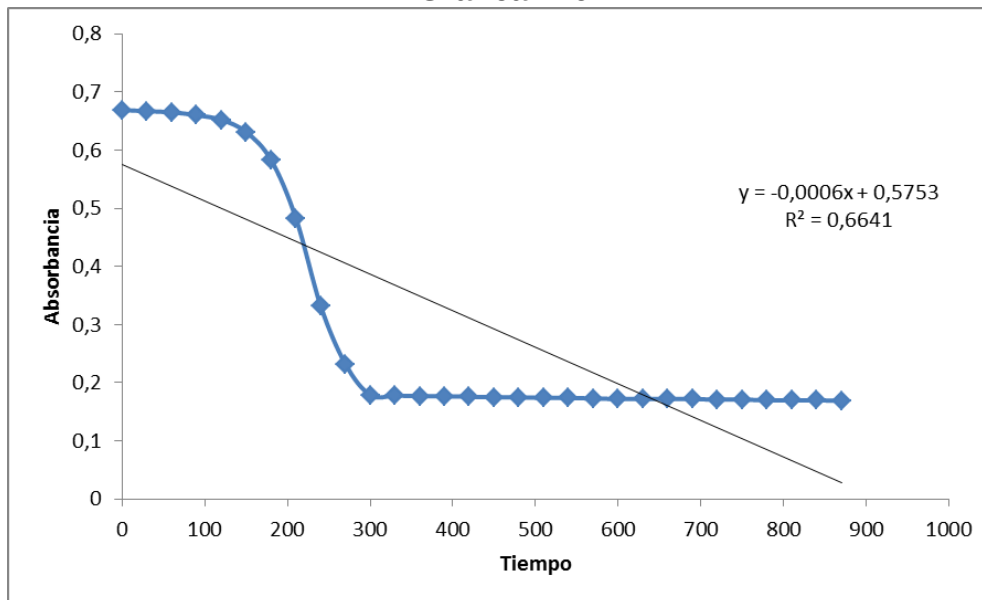
Prueba#16: 100 µl de vivant storm, el 15/02/2014

Aa (Actividad antioxidante) = 43,40%

DPPH rem = 56,60%

% inhibición= 74.73

Gráfica# 16



Tabla# 16

t/min	ABS
0,001	0,669
0,5	0,667
1	0,665
1,501	0,66
2,001	0,652
2,5	0,631
3	0,583
3,501	0,483
4,001	0,332
4,5	0,232

5	0,179
5,501	0,178
6,001	0,177
6,5	0,177
7,001	0,176
7,501	0,175
8,001	0,175
8,5	0,174
9	0,174
9,501	0,173
10	0,172

10,5	0,172
11	0,172
11,5	0,172
12	0,171
12,5	0,171
13	0,17
13,5	0,17
14	0,17
14,5	0,169

Fuente: Análisis Espectrofotométrico vivant storm

Elaborado por:Batioja Ana, Corozo Livia

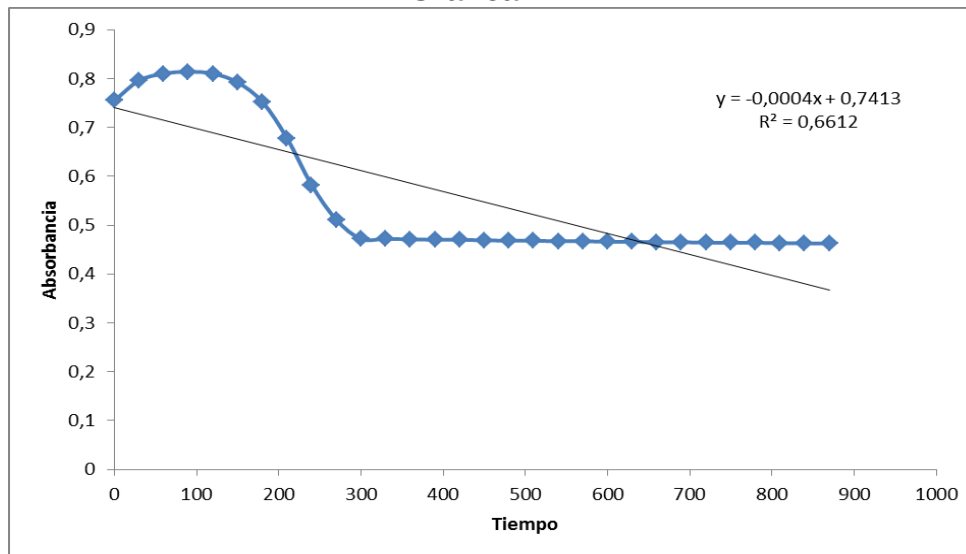
Prueba#17: 100 µl Paramount Bishop - jugo de limoncitrus; 15/02/2014

Aa (Actividad antioxidante) = 54,33%

DPPH rem = 63,87%

% inhibición= 38.80

Gráfica# 17



Tabla# 17

t/min	ABS
0,00083	0,755
0,5	0,796
1,00028	0,81
1,50052	0,814
2,00078	0,81
2,50102	0,792
3,00022	0,752
3,50045	0,678
4,00067	0,582
4,50093	0,511

5,00012	0,472
5,50038	0,472
6,00062	0,471
6,50088	0,47
7,00005	0,47
7,5003	0,469
8,00057	0,468
8,50077	0,468
9,00105	0,467
9,50022	0,467
10,0005	0,466

10,5007	0,466
11,001	0,465
11,5002	0,465
12,0004	0,464
12,5006	0,464
13,0009	0,464
13,5001	0,463
14,0003	0,463
14,5006	0,462

Fuente: Análisis Espectrofotométrico jugo de limón citrus

Elaborado por:Batioja Ana, Corozo Livia

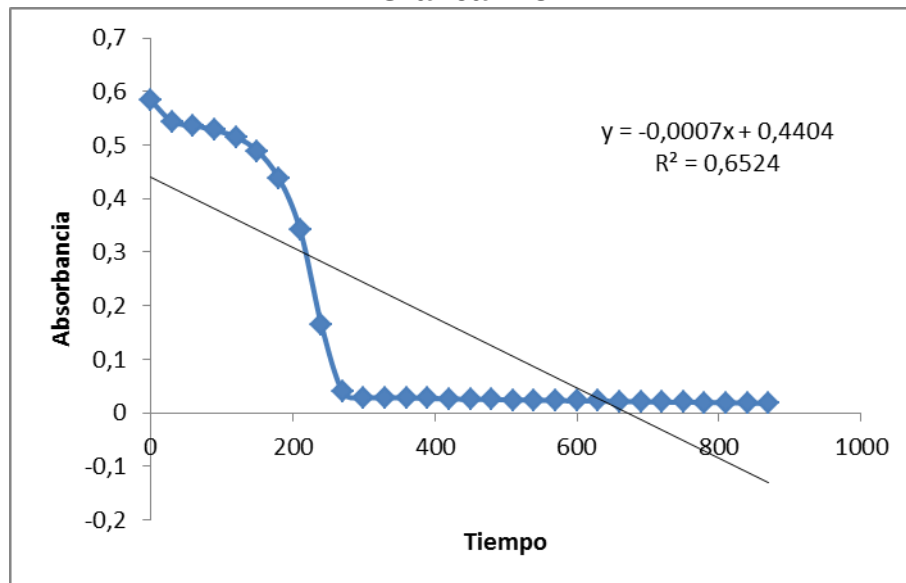
Prueba#18:100 µl de cifrut tropical; el 15/02/2014

Aa (Actividad antioxidante) = 68,71%

DPPH rem = 49,49%

% inhibición= 96.91

Gráfica# 18



Tabla# 18

t/min	ABS
0,0009	0,583
0,5001	0,544
1,0004	0,537
1,5006	0,528
2,0009	0,515
2,5001	0,489
3,0003	0,438
3,5005	0,342
4,0008	0,164
4,501	0,039

5,0002	0,029
5,5005	0,028
6,0007	0,028
6,501	0,027
7,0002	0,026
7,5004	0,025
8,0007	0,025
8,5009	0,024
9,0001	0,024
9,5004	0,023
10,001	0,022

10,501	0,022
11	0,021
11,5	0,021
12	0,02
12,501	0,02
13	0,019
13,5	0,019
14	0,018
14,501	0,018

Fuente: Análisis Espectrofotométrico cifrut
Elaborado por:Batioja Ana, Corozo Livia

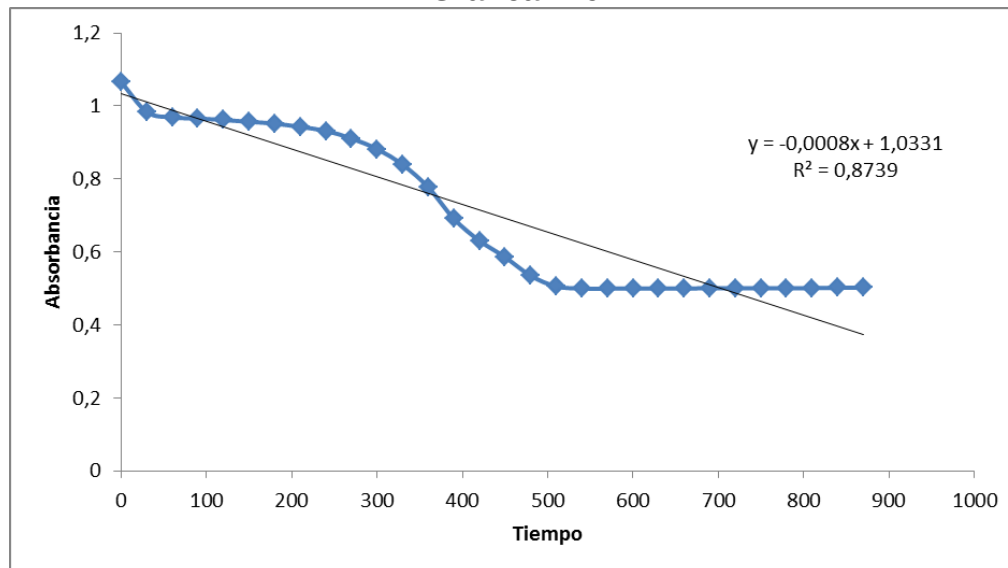
Prueba#19: 100 µl de "all natural limonada sin gas realizada el 15/02/2014

Aa (Actividad antioxidante) = 28,01%

DPPH rem = 90,19%

% inhibición= 52.90

Gráfica# 19



Tabla# 19

t/min	ABS
0,00103	1,066
0,50023	0,984
1,00048	0,969
1,50072	0,966
2,00097	0,962
2,50017	0,957
3,0004	0,952
3,50065	0,943
4,00088	0,932
4,50008	0,911

5,00033	0,882
5,50057	0,839
6,00082	0,777
6,50002	0,691
7,00025	0,631
7,50048	0,586
8,00073	0,535
8,5002	0,506
9,00043	0,5
9,50068	0,5
10,0009	0,5

10,5001	0,5
11,0004	0,5
11,5006	0,501
12,0009	0,501
12,5001	0,501
13,0003	0,501
13,5006	0,501
14,0008	0,502
14,5	0,502

Fuente: Análisis Espectrofotométrico all natural limonada

Elaborado por:Batioja Ana, Corozo Livia

JUGOS EN POLVO

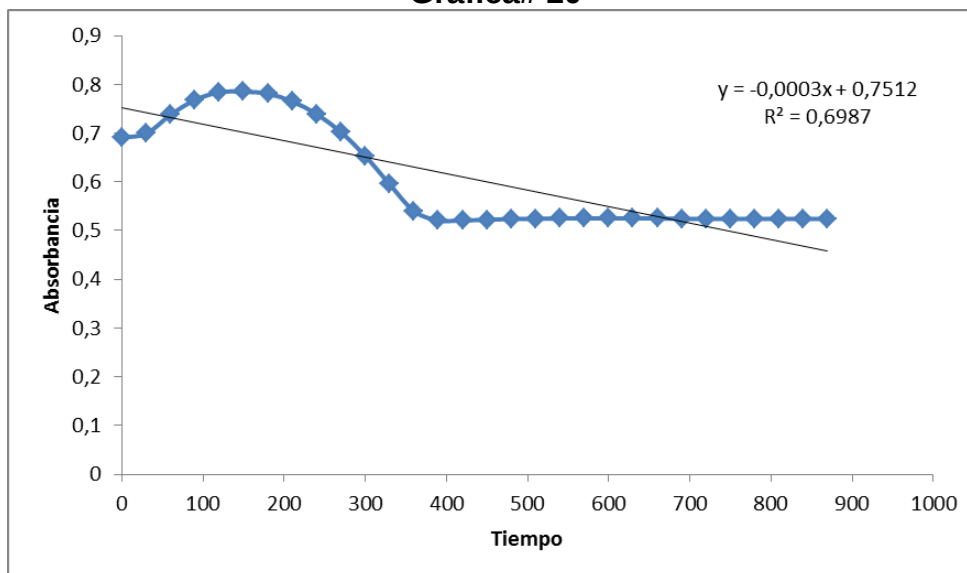
Prueba#20: 100 µl de una dilución de clighttoronja; realizada el 19/02/2014

Aa (Actividad antioxidante) = 59,74%

DPPH rem = 58,46%

% inhibición= 24.16

Gráfica# 20



Tabla# 20

t/min	ABS
0,001033	0,691
0,500233	0,699
1,000467	0,738
1,500717	0,768
2,00095	0,784
2,50015	0,785
3,0004	0,781
3,500633	0,765
4,000883	0,739
4,500083	0,702

5,000317	0,653
5,500567	0,595
6,0008	0,54
6,5	0,521
7,00025	0,521
7,500483	0,522
8,000733	0,524
8,500967	0,524
9,000167	0,525
9,500417	0,525
10,00065	0,525

10,50088	0,525
11,00008	0,525
11,50033	0,524
12,00057	0,524
12,50082	0,524
13,00002	0,524
13,50025	0,524
14,0005	0,524
14,50073	0,524

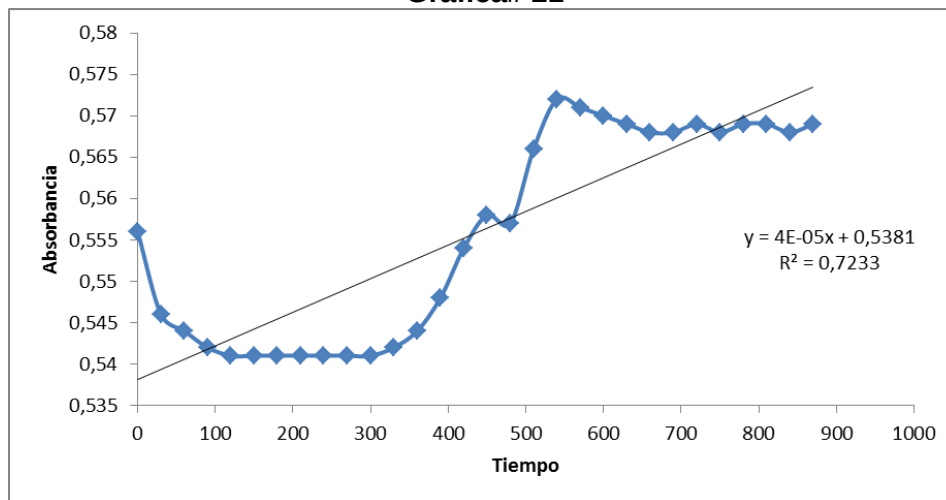
Fuente: Análisis Espectrofotométrico clight toronja

Elaborado por:Batioja Ana, Corozo Livia

PRUEBA#21: 100 µl de una dilución de clight manzana verde; realizada el 19/02/2014.

Aa (Actividad antioxidante) = 71,16%
 DPPH rem = 47,04%
 % inhibición= -2.33

Gráfica# 21



Tabla# 21

t/min	ABS
0,00105	0,556
0,50025	0,546
1,00048	0,544
1,50073	0,542
2,00097	0,541
2,50017	0,541
3,00042	0,541
3,50065	0,541
4,00012	0,541
4,50035	0,541

5,0004	0,541
5,50075	0,542
6,00098	0,544
6,50018	0,548
7,00043	0,554
7,50067	0,558
8,00092	0,557
8,50012	0,566
9,00035	0,572
9,5006	0,571
10,0008	0,57

10,5	0,569
11,0003	0,568
11,5005	0,568
12,0008	0,569
12,501	0,568
13,0002	0,569
13,5004	0,569
14,0007	0,568
14,5009	0,569

Fuente: Análisis Espectrofotométrico clight manzana verde

Elaborado por:Batioja Ana, Corozo Livia

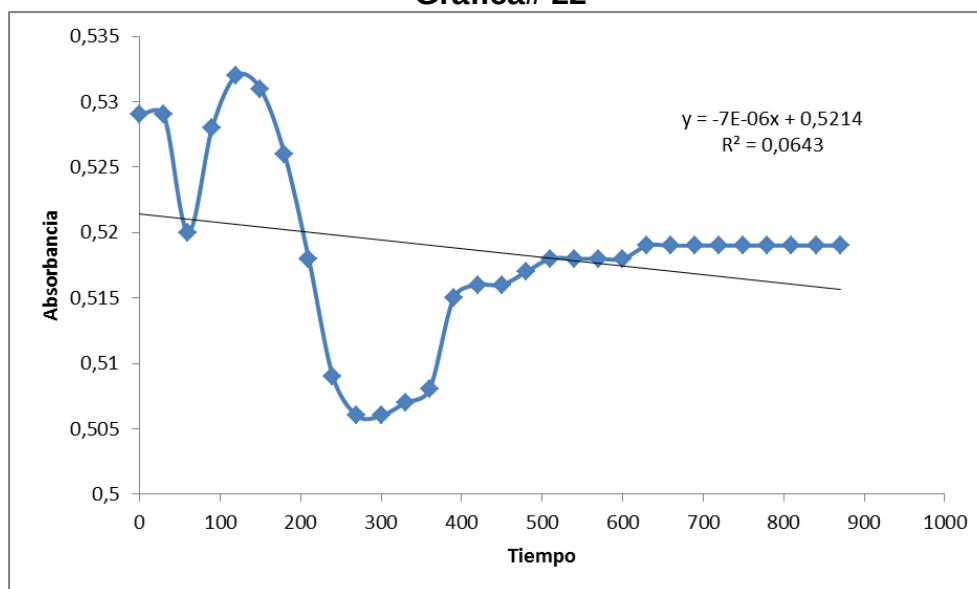
Prueba#22: 100 µl de una dilución de clight mora; realizada el 19/02/2014

Aa (Actividad antioxidante) = 73,45%

DPPH rem = 44,75%

% inhibición= 1.89

Gráfica# 22



Tabla# 22

t/min	ABS
0,001	0,529
0,5005	0,529
1,0007	0,52
1,501	0,528
2,0002	0,532
2,5004	0,531
3,0007	0,526
3,5009	0,518
4,0001	0,509
4,5004	0,506

5,0006	0,506
5,5008	0,507
6	0,508
6,5003	0,515
7,0005	0,516
7,5008	0,516
8,001	0,517
8,5002	0,518
9,0003	0,518
9,5001	0,518
10,001	0,518

10,501	0,519
11	0,519
11,5	0,519
12,001	0,519
12,501	0,519
13	0,519
13,5	0,519
14,001	0,519
14,501	0,519

Fuente: Análisis Espectrofotométrico clight mora

Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

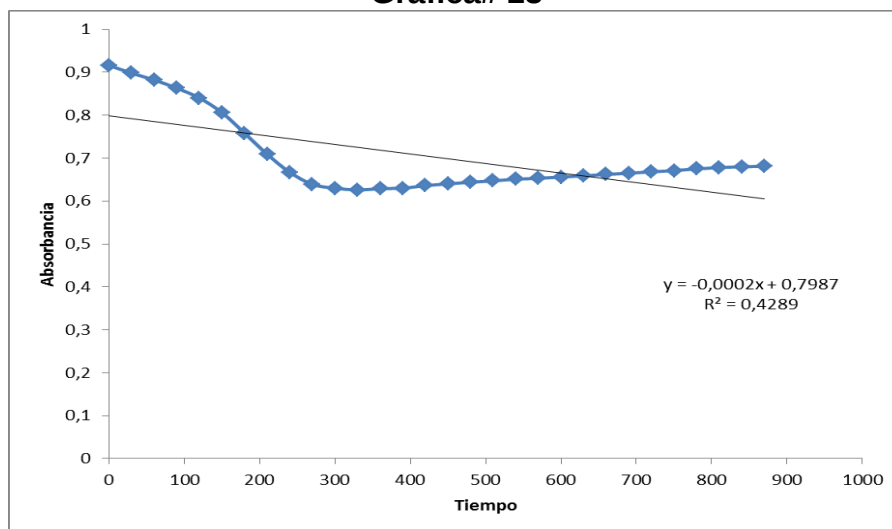
PRUEBA#23: 100 µl de una dilución de tang limón, realizada el 26/02/2014

Aa (Actividad antioxidante) = 40,70%

DPPH rem = 77,50%

% inhibición= 25.65

Gráfica# 23



Tabla# 23

t/min	ABS
0,0009	0,916
0,50007	0,898
1,00033	0,882
1,50057	0,863
2,00082	0,84
2,50002	0,806
3,00027	0,758
3,50052	0,709
4,00075	0,667
4,501	0,639

5,00018	0,63
5,50045	0,626
6,00067	0,629
6,5009	0,63
7,00012	0,636
7,5004	0,64
8,00063	0,644
8,50085	0,647
9,00003	0,651
9,50032	0,653
10,0006	0,656

10,5008	0,659
11,0011	0,662
11,5005	0,665
12,0007	0,668
12,501	0,671
13,0002	0,675
13,5005	0,678
14,0007	0,68
14,5009	0,681

Fuente: Análisis Espectrofotométrico tang limón

Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

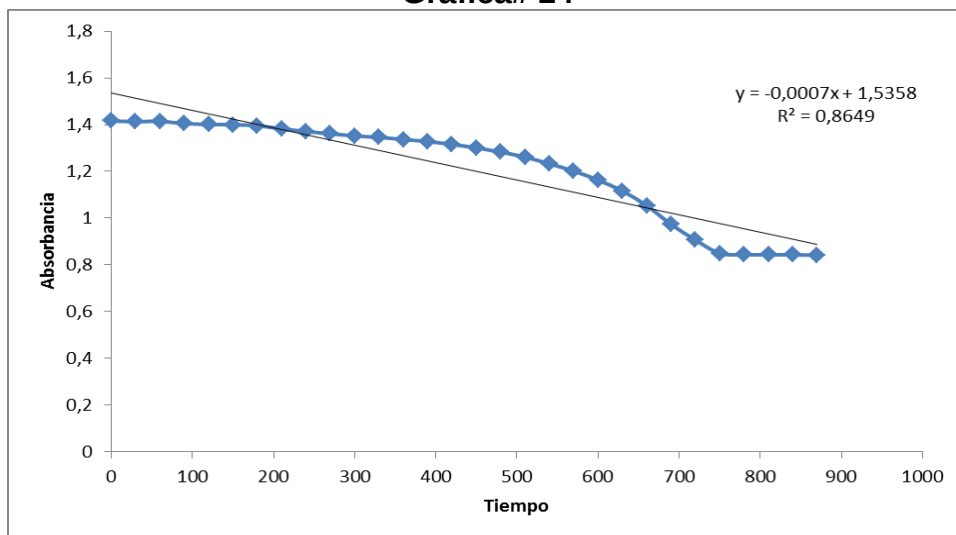
PRUEBA# 24: 100 µl de una dilución de tang piña, realizada el 26/02/2014

Aa (Actividad antioxidante) = -1,60%

DPPH rem = 119,80%

% inhibición= 40.53

Gráfica# 24



Tabla# 24

t/min	ABS
0,001033	1,416
0,500233	1,413
1,000467	1,414
1,500733	1,405
2,000983	1,401
2,500183	1,4
3,0004	1,396
3,500917	1,382
4,000133	1,371
4,500067	1,361

5,000333	1,352
5,5006	1,346
6,00095	1,337
6,5001	1,328
7,000333	1,316
7,50065	1,301
8,000883	1,283
8,5004	1,261
9,000633	1,233
9,5007	1,201
10,00005	1,163

10,50013	1,116
11,00038	1,053
11,5007	0,973
12,00095	0,906
12,50018	0,849
13,00042	0,844
13,5007	0,843
14,00093	0,843
14,5002	0,842

Fuente: Análisis Espectrofotométrico tang piña

Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

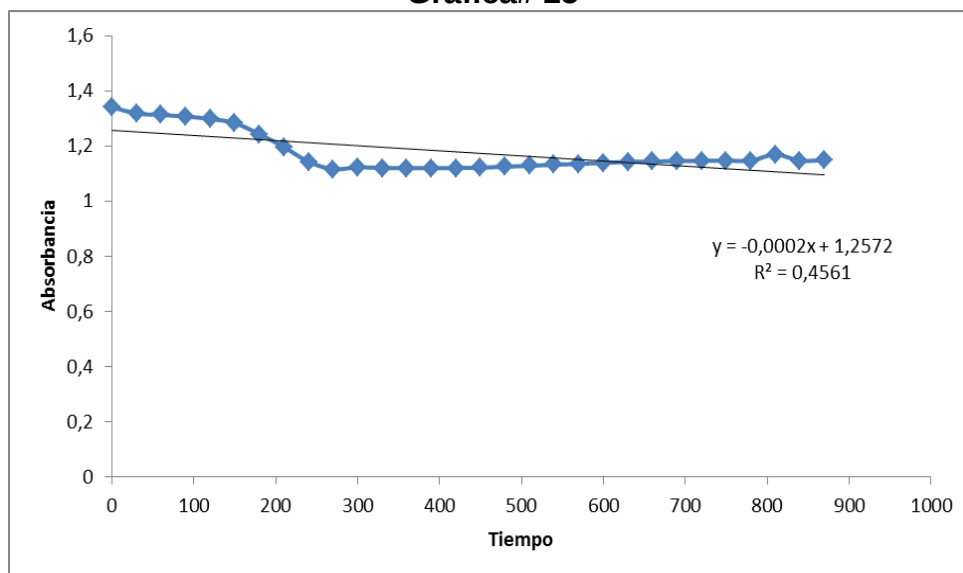
PRUEBA#25: 100 µl de una dilución de Mandarina Ya; realizada el
26/02/2014

Aa (Actividad antioxidante) = 4,75%

DPPH rem = 113,45%

% inhibición= 14.31

Gráfica# 25



Tabla# 25

t/min	ABS
0,0011	1,341
0,5003	1,318
1,0005	1,313
1,5006	1,307
2,0008	1,298
2,5001	1,283
3,0003	1,243
3,5005	1,196
4,0008	1,143
4,5011	1,116

5,0003	1,123
5,5005	1,12
6,0007	1,12
6,5012	1,12
7,0002	1,12
7,5004	1,121
8,0009	1,125
8,5001	1,128
9,0004	1,132
9,5006	1,135
10,001	1,139

10,5	1,142
11	1,144
11,501	1,145
12,001	1,146
12,501	1,147
13	1,147
13,5	1,169
14,001	1,147
14,501	1,149

Fuente: Análisis Espectrofotométrico mandarina ya

Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

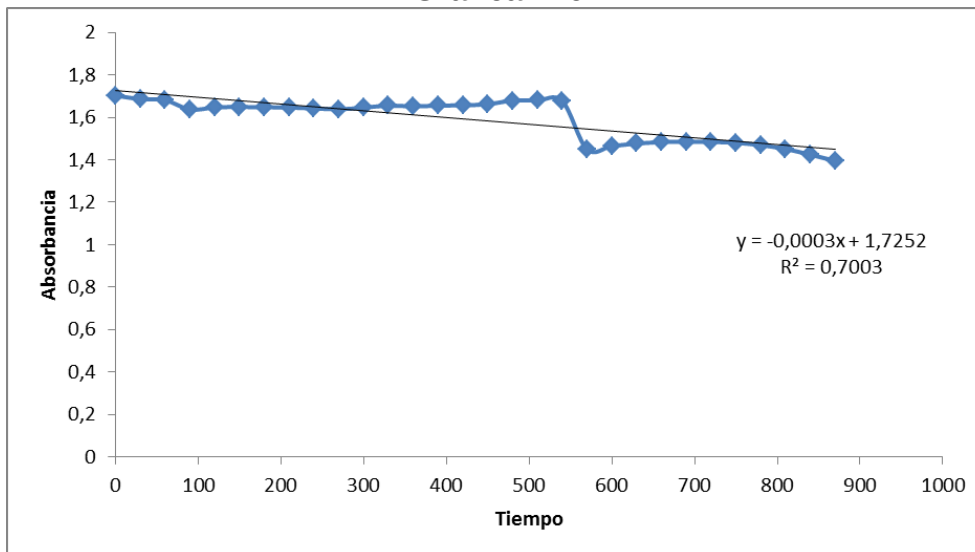
Prueba#26: 100 µl de una dilución de Naranja Ya;26/02/2014

Aa (Actividad antioxidante) = -25,88%

DPPH rem = 144,08%

% inhibición= 18.08

Gráfica# 26



Tabla# 26

t/min	ABS
0,00105	1,703
0,50025	1,686
1,00048	1,681
1,50073	1,637
2,00045	1,647
2,5007	1,649
3,00093	1,648
3,5004	1,646
4,00063	1,642
4,5001	1,638

5,00005	1,646
5,50007	1,655
6,00037	1,652
6,50057	1,655
7,00085	1,657
7,50003	1,662
8,00025	1,679
8,5005	1,68
9,00023	1,677
9,50048	1,449
10,0007	1,465

10,501	1,477
11,0002	1,484
11,5004	1,485
12,0007	1,484
12,5009	1,48
13,0001	1,469
13,5004	1,451
14,0006	1,424
14,5008	1,395

Fuente: Análisis Espectrofotométrico naranja ya

Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

Prueba#27: 100 µl de una dilución de jugo supermaxi naranjilla, realizada

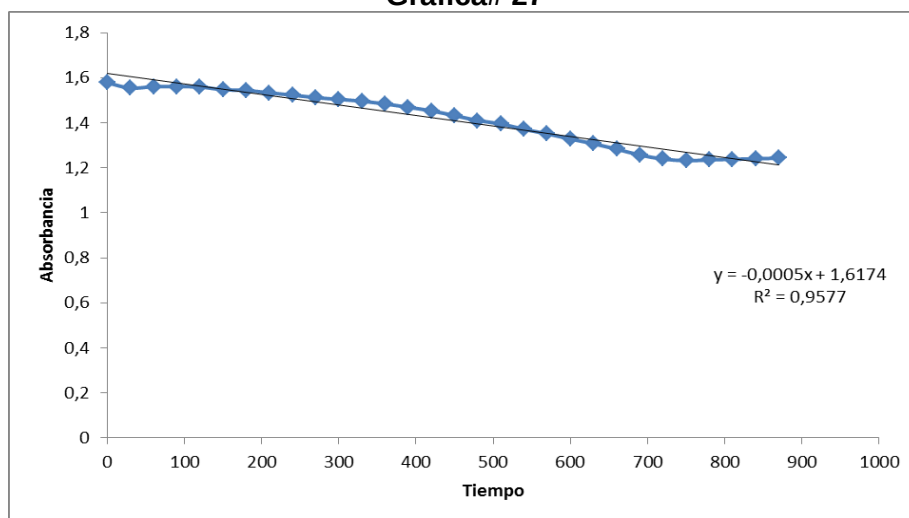
26/02/2014

Aa (Actividad antioxidante) = -15,30%

DPPH rem = 133,50%

% inhibición= 21.22

Gráfica# 27



Tabla# 27

t/min	ABS
0,001	1,578
0,5002	1,554
1,0005	1,561
1,5007	1,561
2,001	1,559
2,5002	1,547
3,0004	1,544
3,5006	1,533
4,0009	1,523
4,501	1,512

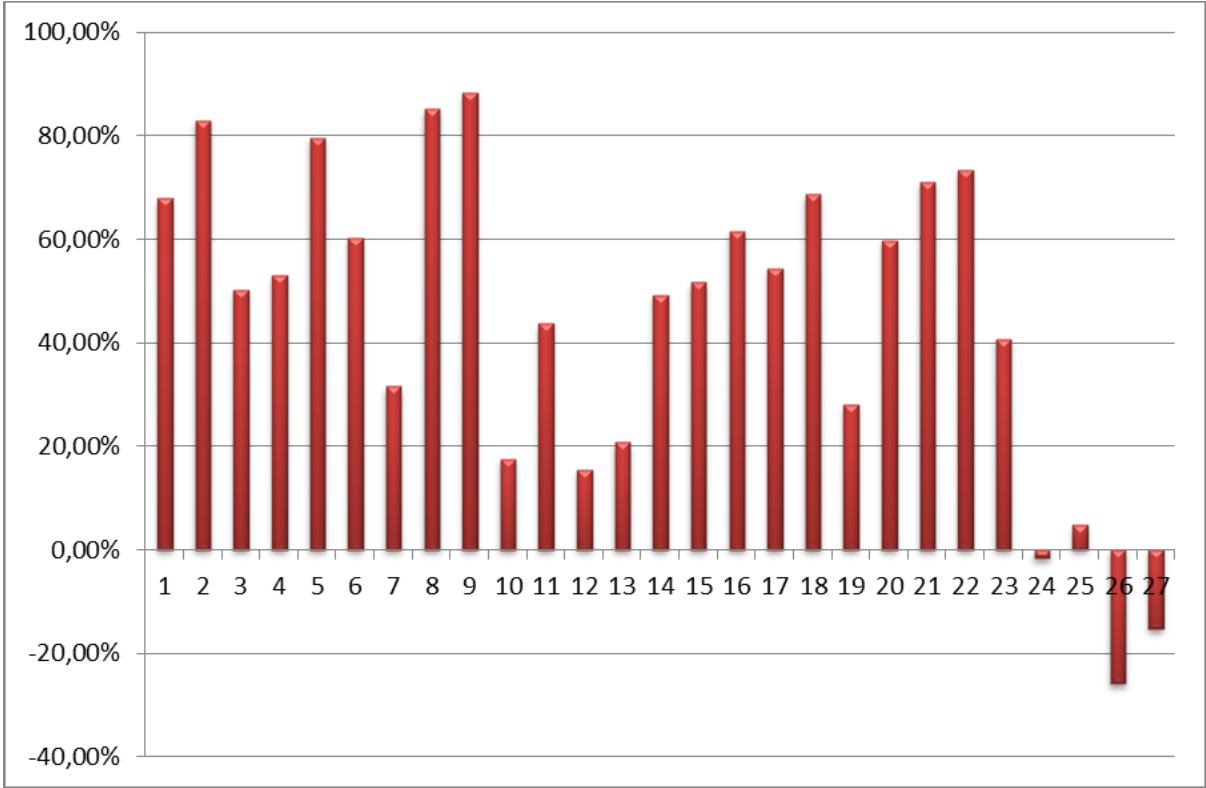
5,0002	1,504
5,5004	1,496
6,0007	1,484
6,5009	1,469
7,0001	1,453
7,5003	1,432
8,001	1,41
8,5002	1,395
9,0004	1,371
9,5006	1,351
10,001	1,328

10,5	1,307
11	1,283
11,501	1,257
12,001	1,239
12,5	1,232
13,001	1,235
13,5	1,238
14	1,24
14,5	1,243

Fuente: Análisis Espectrofotométrico jugo supermaxi naranjilla

Elaborado por:Batioja Ana, Corozo Livia

CUADRO ESTADISTICO PORCENTAJES DE ACTIVIDAD
ANTIOXIDANTE



Fuente: Análisis espectrofotométrico

Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

LISTADO DE PORCENTAJES DE ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE SEGÚN EL PRODUCTO ANALIZADO

	% ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE	PRODUCTO
1	67,94%	Naranja
2	82,91%	Naranja
3	50,25%	Mandarina
4	53,13%	Limon
5	79,61%	Naranja
6	60,32%	Naranja
7	31,56%	Toronja
8	85,11%	Toronja
9	88,41%	Naranja
10	17,51%	del valle
11	43,65%	del valle naranja
12	15,40%	original limón
13	20,73%	Mccornick-jugo de limón
14	49,25%	tesalia ice- naranjilla
15	51,62%	Tampico citrus punch - naranja, mandarina, limón
16	61,60%	vivant storm–naranja
17	54,33%	paramountbishop - limón
18	68,71%	cifrut tropical punch - mora, fresa, frambuesa
19	28,01%	all natural –limonada
20	59,74%	clight toronja
21	71,16%	clight manzana verde
22	73,45%	clight mora
23	40,70%	tang limón
24	-1,60%	tang piña
25	4,75%	mandarina ya
26	-25,88%	naranja ya
27	-15,30%	supermaxi –naranjilla

Fuente: Análisis espectrofotométrico

Elaborado por: Batioja Ana, Corozo Livia

4.2 CROMATOGRAFIA

Adicional al análisis de la actividad antioxidante se realizó pruebas de cromatografía gaseosa (GC/MS), en un cromatógrafo de gases Agilent Technologies 6890 Plus Series acoplado a un detector selectivo de masas Agilent

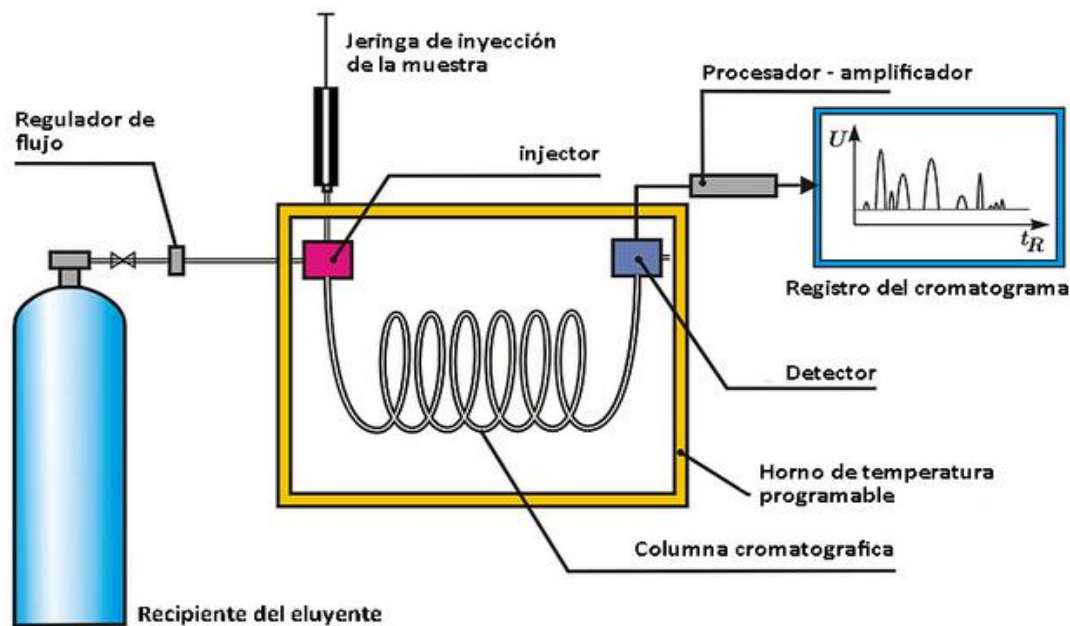
Technologies MSD 5973 Network (GC-MS), equipado con un sistema computarizado de datos MSD ChemStation (Versión D.02.00.275).

Cromatografía de gases consiste en una muestra que se vaporiza y se inyecta en la cabeza de la columna cromatografía. La muestra se transporta a través de la columna por el flujo de fase inerte, móvil gaseosa. La propia columna contiene una fase líquida estacionaria que se adsorbe sobre la superficie de un sólido inerte.

Los componentes fundamentales de un cromatógrafo de gases, son:

- Fuente de gas.
- Sistema de inyección.
- Horno y columna cromatográfica.
- Sistema de detección.
- Sistema de registro.

Diagrama de un cromatógrafo de gases



Los parámetros operacionales del cromatógrafo de gases fueron los siguientes:

- Puerto de inyección: split/splitless (relación Split 1:30)
- Temperatura del puerto de inyección: 250°C
- Columna capilar: DB-5 (*J & W Scientific, Folsom, CA, EE.UU.*), de 60 m (L) x 0.25 mm (D.I) recubierta con fase estacionaria apolar de 5% fenil-poli (metilsiloxano).
- Temperatura del horno: Se programó desde 45°C (5 min) @ 4°C/min, hasta alcanzar 275°C.
- Gas de arrastre: helio, presión de entrada a la columna 16,47 psi con velocidad lineal de flujo de 26 cm/s

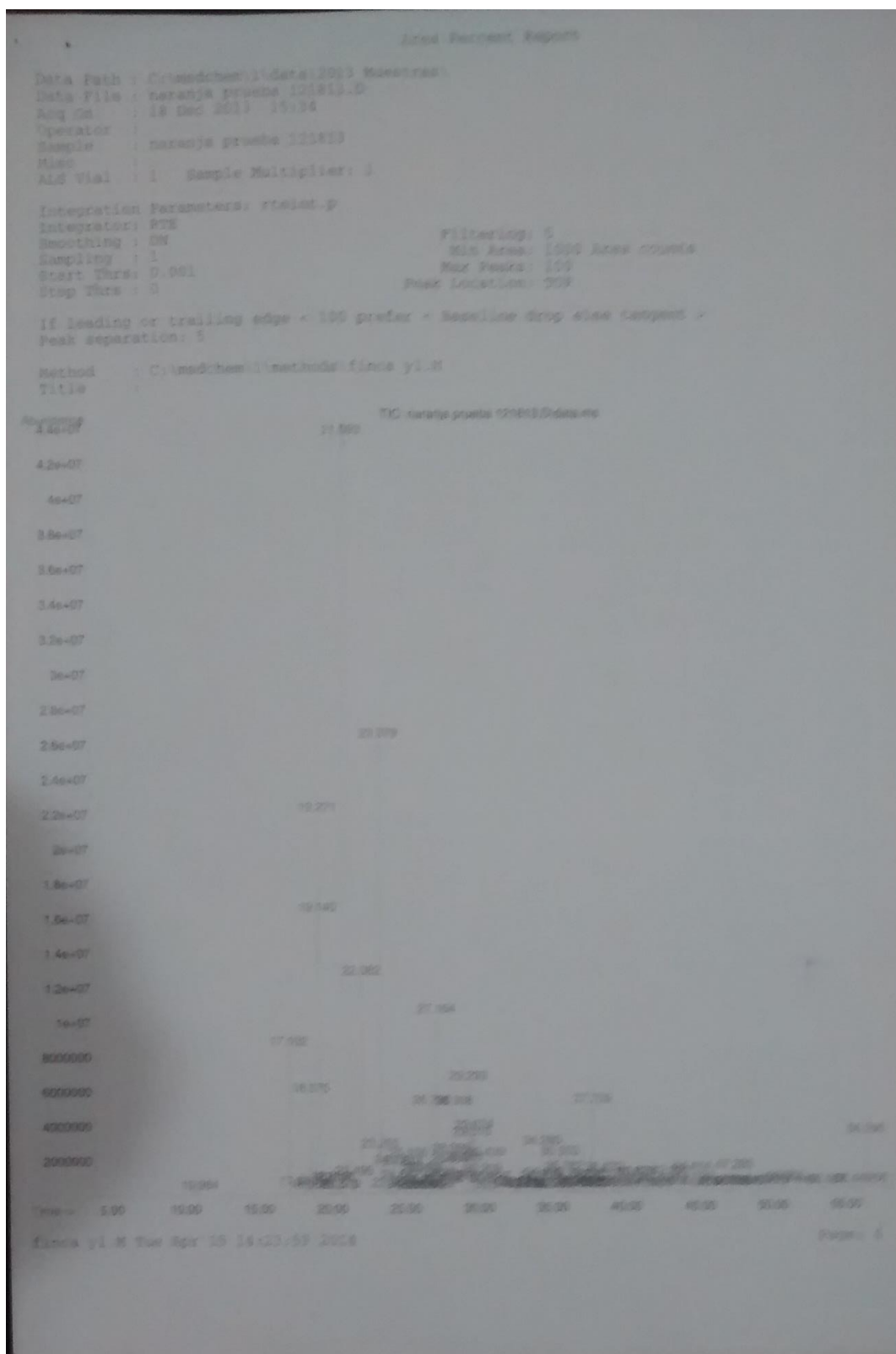
- Modo de inyección: automático
- Volumen de inyección: 1 μ L de muestra.

Se realizó el análisis a las siguientes muestras:

1. Naranja
2. Limón

Esto dio como resultados un listado de compuestos presentes en las muestras que se detallan a continuación:

NARANJA



Area Percent Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2013 Muestras\
 Data File : naranja prueba 121813.D
 Acq On : 18 Dec 2013 15:34
 Operator :
 Sample : naranja prueba 121813
 Mass :
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: rsteint.p

Integrator: RTE

Smoothing: ON

Sampling: 1

Start Thrs: 0.001

Stop Thrs: 0

Filtering: 5

Min Area: 1000 Area counts

Max Peaks: 100

Peak Location: TOP

If leading or trailing edge < 100 prefer < Baseline drop else tangent >
 Peak separation: 5

Method : C:\msdchem\1\methods\finca y1.M

Title :

Signal : TIC: naranja prueba 121813.D\data.ms

Peak #	R.T. min	First scan	max scan	Last scan	PK TY	peak height	corr. area	corr. % max.	% of total
1	16.986	2202	2223	2253	rVB4	156687	445704	0.07%	0.032%
2	17.102	3940	3961	3993	rVB	8440930	29419990	4.68%	2.108%
3	17.646	4067	4088	4116	rVB6	360234	1731700	0.21%	0.095%
4	18.365	4237	4256	4279	rBV3	171282	671516	0.11%	0.048%
5	18.575	4279	4305	4336	rVV	5718676	21924721	3.49%	1.571%
6	18.789	4336	4355	4382	rVV2	378027	1447308	0.03%	0.102%
7	19.140	4397	4437	4444	rBV2	16198670	75104932	11.96%	5.362%
8	19.321	4444	4456	4510	rVB	21924261	102197467	16.27%	7.323%
9	19.859	4567	4605	4645	rVB3	647487	4518675	0.72%	0.324%
10	20.198	4656	4684	4709	rBV3	591236	3106626	0.49%	0.123%
11	20.373	4709	4725	4756	rBV6	142062	1079388	0.17%	0.077%
12	20.579	4756	4773	4814	rVB7	162304	1401962	0.22%	0.100%
13	21.093	4814	4893	4895	rBV9	44084145	627967234	100.00%	44.999%
14	21.425	4972	4987	5012	rVB2	903279	2845695	0.45%	0.204%
15	21.682	5092	5124	5179	rVV	12486935	43193503	7.81%	3.525%
16	21.255	5349	5398	5402	rBV5	2515900	9220150	1.47%	0.661%
17	24.379	5402	5437	5476	rVV2	26108414	130914373	20.85%	9.381%
18	24.761	5545	5563	5589	rVV3	252776	891718	0.14%	0.064%
19	24.150	5589	5607	5632	rVV	1591492	5256875	0.84%	0.377%
20	24.643	5694	5722	5741	rBV3	712715	2494598	0.40%	0.179%
21	24.834	5741	5762	5778	rBV2	1480323	5118712	0.82%	0.368%
22	24.929	5778	5789	5822	rVV10	162325	920276	0.15%	0.066%
23	25.156	5822	5842	5867	rVV3	1971327	7331022	1.17%	0.525%
24	25.520	5908	5927	5952	rVB4	338595	1158398	0.19%	0.083%
25	25.751	5952	5981	5989	rBV5	140818	551246	0.09%	0.042%
26	25.824	5989	5998	6014	rVV6	154624	525796	0.08%	0.038%
27	25.970	6014	6032	6058	rVV	1060819	3570675	0.57%	0.255%
28	26.162	6058	6077	6094	rVV5	443330	1759046	0.28%	0.126%
29	26.265	6094	6101	6116	rVV5	119942	395048	0.06%	0.029%
30	26.415	6116	6136	6157	rVV2	1175338	4055525	0.65%	0.291%
31	26.642	6172	6189	6201	rBV8	155031	588221	0.09%	0.042%
32	26.796	6201	6225	6244	rVV	5004185	18148861	2.89%	1.301%
33	26.916	6244	6253	6266	rVV2	172539	609347	0.10%	0.044%
34	27.164	6266	6311	6341	rVV2	10281338	38292517	6.10%	2.744%
35	27.417	6341	6370	6383	rVV2	952394	1945561	0.31%	0.139%
36	27.554	6383	6402	6421	rVV7	398541	2184556	0.35%	0.157%
37	27.704	6422	6437	6479	rVV7	762107	7947480	0.61%	0.276%
38	28.038	6479	6515	6521	rVV2	1658975	5419302	0.88%	0.403%

finca y1.M Tue Apr 15 14:23:59 2014

Area Percent Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\20010409
 Data File : mscanje prsbs 101813.D
 Acq On : 18 Dec 2001 15:34
 Operator :
 Sample : mscanje prsbs 101813
 Misc :
 Add file : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: rtmin=0
 Integrator: WTE
 Smoothing: 00
 Sampling: 1
 Start Time: 0.001
 Stop Time: 0

Filtering: 0
 Min Area: 1000 Area counts
 Max Peak: 100
 Peak Detection: 100

If leading or trailing edge < 100 prefer < baseline drop else tangent >
 Peak separation: 5

Method : C:\msdchem\1\methods\chems y1.M
 Title :

39	28.598	6521	6524	6557	r702	1001027	7885945	1.26%	0.545%
40	28.748	6557	6578	6590	r707	4962690	17001194	2.74%	1.213%
41	28.889	6593	6597	6639	r703	6508219	1012679	1.34%	0.150%
42	28.933	6704	6704	6750	r707	1734013	5837026	0.93%	0.418%
43	29.283	6783	6806	6835	r703	6883053	23748369	3.62%	1.430%
44	29.575	6839	6860	6880	r703	3063133	11288609	1.80%	0.809%
45	29.674	6880	6887	6928	r702	3561188	11797440	1.88%	0.845%
46	30.209	6993	7007	7024	r702	9935329	1740020	0.68%	0.168%
47	30.439	7024	7048	7057	r707	1540462	7548310	0.20%	0.548%
48	30.511	7057	7060	7081	r707	4010261	1547869	0.15%	0.115%
49	30.827	7161	7163	7184	r702	9667160	1904282	0.30%	0.119%
50	30.944	7184	7182	7184	r703	837390	977436	0.36%	0.027%
51	32.468	7370	7391	7406	r702	296738	1101198	0.18%	0.097%
52	32.680	7431	7437	7448	r704	238620	891183	0.14%	0.084%
53	33.156	7490	7508	7519	r704	51423	441462	0.07%	0.032%
54	33.274	7519	7538	7550	r708	213784	859804	0.10%	0.054%
55	33.697	7548	7600	7626	r705	1519339	753490	0.12%	0.054%
56	33.885	7620	7632	7648	r706	106149	488049	0.09%	0.029%
57	34.068	7648	7663	7676	r707	596829	1101774	0.14%	0.150%
58	34.280	7685	7699	7713	r707	3401314	8745483	1.19%	0.807%
59	34.418	7711	7722	7739	r704	786114	1899945	0.46%	0.208%
60	34.968	7802	7816	7837	r706	80400	388060	0.06%	0.028%
61	35.563	7980	7997	7991	r702	1879818	7561256	1.14%	0.510%
62	35.762	7994	7991	7992	r702	1101962	4087037	0.70%	0.304%
63	36.148	8000	8020	8033	r707	561271	1869894	0.10%	0.104%
64	36.363	8033	8053	8060	r707	106406	619143	0.13%	0.049%
65	36.450	8060	8066	8075	r702	181393	680162	0.11%	0.050%
66	36.544	8075	8084	8112	r704	296305	1415821	0.23%	0.100%
67	37.091	8153	8177	8190	r703	144003	543180	0.15%	0.088%
68	37.226	8190	8200	8207	r705	110965	574596	0.08%	0.041%
69	37.326	8207	8217	8237	r702	645384	1878701	0.44%	0.208%
70	37.501	8237	8250	8262	r7010	143545	821651	0.12%	0.059%
71	37.709	8262	8282	8293	r702	4886653	17789481	1.81%	1.275%
72	37.803	8293	8298	8313	r704	554210	1804061	0.31%	0.119%
73	38.038	8313	8338	8351	r704	87745	529623	0.09%	0.038%
74	38.412	8362	8405	8461	r700	1048390	5081271	0.81%	0.364%
75	39.812	8498	8507	8521	r704	120444	441461	0.07%	0.012%
76	39.881	8507	8531	8545	r703	140659	872832	0.14%	0.063%
77	40.350	8700	8714	8727	r704	142834	142834	0.17%	0.102%
78	40.828	8727	8738	8780	r704	759423	1898139	0.99%	0.408%
79	40.973	8762	8786	8843	r706	753156	8849560	0.41%	0.604%
80	41.273	8891	8905	8920	r706	89364	484918	0.17%	0.030%

66884 y1.M Tue Apr 18 14:16:59 2001

Area Percent Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2013 Muestras\
 Data File : naranja prueba 121813.D
 Acq On : 18 Dec 2013 15:34
 Operator :
 Sample : naranja prueba 121813
 Misc :
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: rteint.p

Integrator: RTE

Smoothing : ON

Sampling : 1

Start Thrs: 0.001

Stop Thrs : 0

Filtering: 5

Min Area: 1000 Area counts

Max Peaks: 100

Peak Location: TOP

If leading or trailing edge < 100 prefer < Baseline drop else tangent >
 Peak separation: 5

Method : C:\msdchem\1\methods\finca yl.M
 Title :

81	41.856	8962	8987	9080	rVB6	85976	621913	0.10%	0.045%
82	42.191	9016	9044	9057	rBV9	347237	1967581	0.31%	0.141%
83	42.844	9137	9155	9166	rBV4	138784	620980	0.10%	0.044%
84	42.991	9167	9180	9196	rVV	778877	2622168	0.42%	0.188%
85	44.414	9399	9422	9430	rBV2	1022430	3903073	0.62%	0.280%
86	44.591	9442	9453	9469	rVB2	461407	1658311	0.26%	0.119%
87	44.979	9503	9518	9533	rVB5	104293	373926	0.06%	0.027%
88	46.002	9678	9692	9706	rVB6	101258	380941	0.06%	0.027%
89	46.273	9724	9738	9761	rVB2	190276	695532	0.11%	0.050%
90	47.085	9861	9876	9892	rBV4	199130	774072	0.12%	0.055%
91	47.285	9893	9910	9926	rVVE	1086755	3809961	0.61%	0.273%
92	47.567	9942	9958	9981	rBV5	76125	616938	0.10%	0.044%
93	48.896	10171	10184	10207	rVV5	99812	543639	0.09%	0.039%
94	49.779	10317	10334	10357	rBV3	165363	751911	0.12%	0.054%
95	50.755	10460	10500	10539	rBV4	335567	3029502	0.48%	0.217%
96	51.649	10639	10652	10677	rBV3	113384	515508	0.08%	0.037%
97	53.667	10874	10995	11019	rBV6	76547	470518	0.07%	0.034%
98	55.449	11283	11298	11315	rVB3	95526	404794	0.06%	0.029%
99	56.090	11406	11441	11522	rBV3	2983723	26093495	4.16%	1.870%
100	58.102	11737	11749	11769	rBV3	105347	515819	0.08%	0.037%

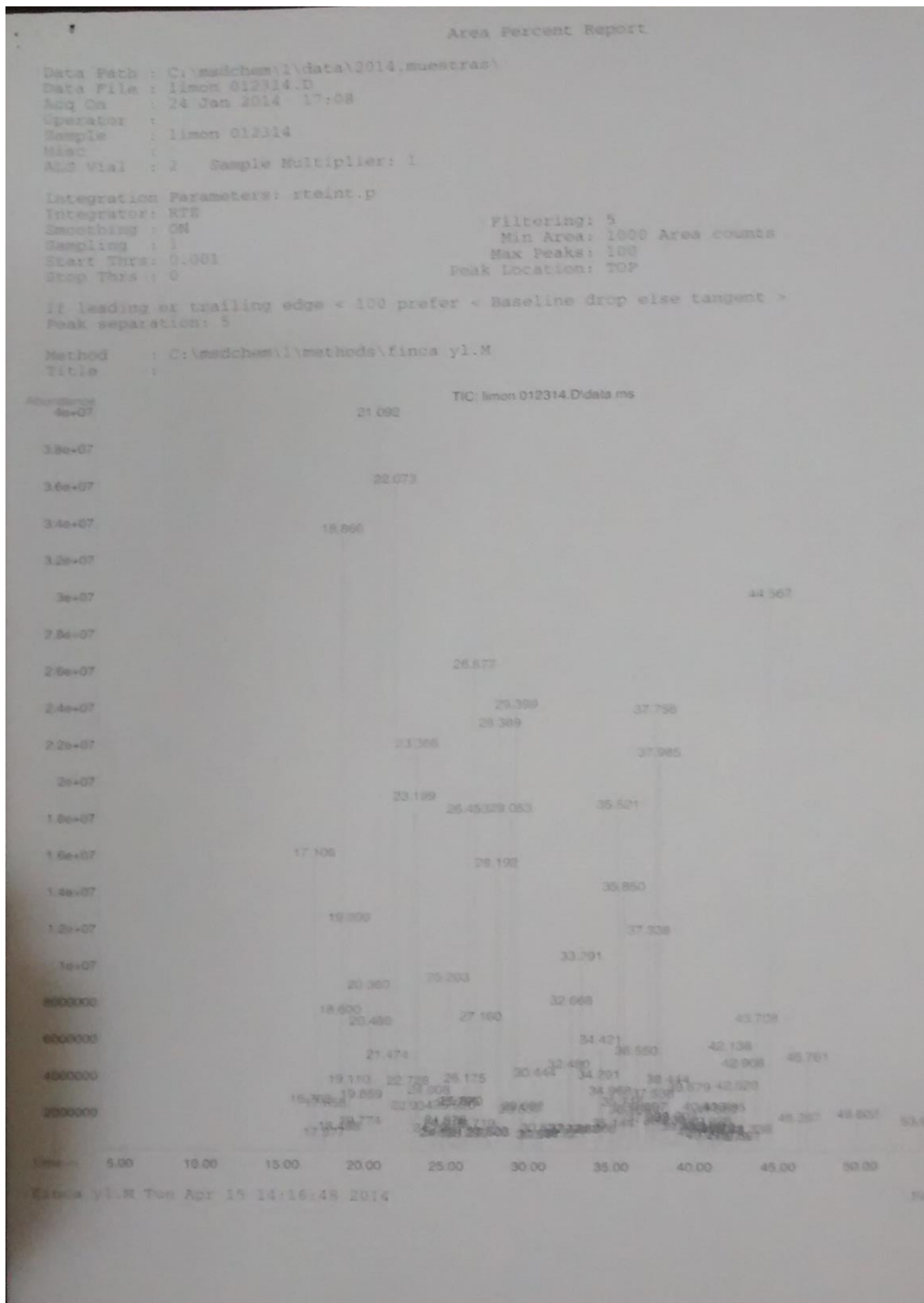
Sum of corrected areas: 1395500912

finca yl.M Tue Apr 15 14:23:59 2014

Siendo los compuestos mayoritarios:

Pico #	Tiempo de retención.	Porcentaje Total %	Nombre
7	19.140	5.382	OCTYL-ALDEHIDE
8	19.221	7.323	MYRCENE
13	21.093	44.999	LIMONENE
15	22.089	3.525	OCTANOL -1
17	23.379	9.381	LINALOOL
34	27.164	2.744	UNDECANAL

LIMON



Area Percent Report											
Data Path : C:\msdchem\1\data\2014\masatras\											
Data File : limon 012314.D											
Acq On : 24 Jan 2014 17:08											
Operator :											
Sample : limon 012314											
Misc :											
ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1											
Integration Parameters: rtint.p											
Integrator: RTE											
Smoothing: ON											
Sampling: 1											
Start Thrs: 0.001											
Stop Thrs: 0											
Filtering: 5											
Min Area: 1000 Area counts											
Max Peaks: 100											
Peak Location: TOP											
If leading or trailing edge < 100 prefer < Baseline drop else tangent >											
Peak separation: 5											
Method : C:\msdchem\1\methods\finca y1.M											
Title :											
39	28.192	6510	6551	6565	rBV	15137916	82440888	14.04%	2.382%		
40	28.389	6565	6597	6624	rVB2	22667175	130535459	22.23%	3.772%		
41	29.053	6715	6752	6771	rVV	18076610	89603217	16.96%	2.878%		
42	29.399	6791	6833	6848	rVV3	23657702	161214880	27.45%	4.659%		
43	29.537	6848	6865	6883	rVV2	1885509	7031557	1.20%	0.203%		
44	29.682	6883	6899	6928	rVB3	2060597	7112608	1.21%	0.206%		
45	30.444	7036	7047	7057	rVV	3874748	13299923	2.26%	0.384%		
46	30.544	7057	7064	7078	rVV4	538065	2169295	0.37%	0.063%		
47	30.697	7078	7090	7102	rVV	565496	2004760	0.34%	0.058%		
48	30.827	7102	7112	7125	rVV2	903682	2997319	0.51%	0.087%		
49	32.231	7327	7349	7364	rBV	657300	3092596	0.53%	0.089%		
50	32.480	7366	7393	7402	rVV	4351317	15771531	2.69%	0.456%		
51	32.562	7402	7407	7412	rVV	872329	2512544	0.43%	0.073%		
52	32.668	7412	7425	7450	rVB3	7770486	35017553	5.96%	1.012%		
53	33.068	7478	7493	7508	rBV4	863797	4287291	0.73%	0.124%		
54	33.291	7517	7531	7559	rVB	10166066	34229477	5.83%	0.989%		
55	34.068	7648	7663	7673	rBV	889193	3245894	0.55%	0.094%		
56	34.291	7688	7701	7711	rBV	3746984	12601846	2.15%	0.364%		
57	34.421	7711	7723	7746	rVB	5686739	20245077	3.45%	0.585%		
58	34.968	7798	7816	7835	rBV	2918792	10348166	1.76%	0.299%		
59	35.144	7835	7846	7865	rBV	1100264	3649325	0.62%	0.105%		
60	35.521	7882	7910	7930	rVB	18211581	73143780	12.46%	2.114%		
61	35.715	7930	7943	7952	rBV3	2262464	8716276	1.48%	0.252%		
62	35.850	7952	7966	7982	rVV	13766548	51272823	8.73%	1.482%		
63	36.168	8009	8020	8034	rVV	1776302	6215462	1.06%	0.180%		
64	36.550	8074	8085	8107	rVB4	4936676	24013267	4.09%	0.694%		
65	37.097	8150	8178	8192	rBV5	1947421	11035719	1.88%	0.319%		
66	37.232	8192	8201	8207	rVV4	1293366	5179256	0.88%	0.150%		
67	37.338	8207	8219	8242	rVV	11347353	44723740	7.62%	1.292%		
68	37.538	8242	8253	8263	rVV2	2557366	9253545	1.58%	0.267%		
69	37.756	8263	8290	8311	rVV	23125116	117252782	19.97%	3.389%		
70	37.985	8311	8329	8351	rVB	20872073	87979258	14.98%	2.543%		
71	38.238	8351	8372	8383	rBV5	1145345	5668606	0.97%	0.164%		
72	38.444	8396	8407	8432	rVV	3281698	13131343	2.24%	0.379%		
73	38.903	8472	8485	8503	rVV6	1260145	7799647	1.33%	0.225%		
74	39.285	8526	8550	8574	rVB8	723109	3863541	0.66%	0.112%		
75	39.679	8601	8617	8639	rVB2	3104780	12409367	2.11%	0.359%		
76	40.260	8697	8714	8721	rVV5	672808	3002068	0.51%	0.087%		
77	40.344	8721	8730	8741	rVV3	1018906	4110449	0.73%	0.125%		
78	40.503	8741	8757	8763	rVV8	882855	4327164	0.74%	0.125%		
79	40.803	8763	8774	8789	rVV8	2053412	9379149	1.60%	0.271%		
80	40.779	8789	8804	8814	rVV7	510670	2550495	0.43%	0.074%		
finca y1.M Tue Apr 15 14:16:48 2014											

Area Percent Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2014.muestras\
Data File : limon 012314.D
Acq On : 24 Jan 2014 17:08
Operator :
Sample : limon 012314
Misc :
ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Integration Parameters: rteint.p

Integrator: RTE
Smoothing: ON
Sampling: 1
Start Thrs: 0.001
Stop Thrs: 0
Filtering: 5
Min Area: 1000 Area counts
Max Peaks: 100
Peak Location: TOP

If leading or trailing edge < 100 prefer < Baseline drop else tangent >
Peak separation: 5

Method : C:\msdchem\1\methods\finca yl.M
Title :

81	40.938	8815	8831	8846	rVV6	1276298	6347572	1.08%	0.183%
82	41.179	8863	8872	8883	rVV4	932810	4011312	0.68%	0.116%
83	41.367	8891	8904	8920	rVV9	1899083	10344996	1.76%	0.299%
84	41.591	8933	8942	8948	rVV5	843587	3590915	0.61%	0.104%
85	41.644	8948	8951	8961	rVV5	774033	2542077	0.43%	0.073%
86	41.785	8961	8975	8996	rVV7	2039192	13207691	2.25%	0.382%
87	41.979	8996	9008	9016	rVV7	440826	2712815	0.46%	0.078%
88	42.138	9016	9035	9068	rVV5	5339110	36708892	6.25%	1.061%
89	42.520	9082	9100	9120	rVV6	3222078	16358672	2.79%	0.473%
90	42.691	9120	9129	9143	rVV4	490374	2055630	0.35%	0.059%
91	42.908	9142	9166	9192	rVV	4424096	19755841	3.36%	0.571%
92	43.338	9225	9239	9248	rVV2	853290	3194241	0.54%	0.092%
93	43.708	9286	9302	9336	rVV	6830751	26775672	4.56%	0.774%
94	44.567	9414	9448	9479	rVV	29443206	181722025	30.95%	5.252%
95	46.267	9724	9737	9757	rBV2	1482169	4818693	0.82%	0.139%
96	46.761	9798	9821	9834	rBV	4755278	16019751	2.73%	0.463%
97	49.802	10322	10338	10369	rBV2	1646390	6318960	1.08%	0.183%
98	53.666	10983	10995	11006	rVV3	1190322	5070690	0.86%	0.147%
99	56.207	11411	11427	11462	rBV4	379944	2599103	0.44%	0.075%
100	58.096	11732	11748	11769	rBV3	721720	3473088	0.59%	0.100%

Sum of corrected areas: 3460288080

finca yl.M Tue Apr 15 14:16:48 2014

Siendo los compuestos mayoritarios:

Pico #	Tiempo de retención.	Porcentaje Total %	Nombre
7	18.866	6.630	SABINENE
14	21.092	16.970	LIMONENE
16	22.073	7.039	TRICYCLEN
20	23.366	3.058	LINALOOL
35	26.877	4.424	ALFA-TERPINOL

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Conclusiones

- En base a los resultados obtenidos se demostró que la naranja posee un porcentaje de actividad antioxidante en zumo crudo de 88.41% frente a un jugo embotellado 43,65% y en polvo -25,88%. Mientras que el limón refleja en zumo crudo 53,13%, embotellado 15,40% y en polvo 40,70%
- Mediante un análisis cromatográfico GC/MS se encontró una gran cantidad de compuestos antioxidantes donde en la naranja predomina el limonene 44.99%, seguido de linalool 9,38%. En el limón se obtiene como mayoritario al limonene 16,97%, tricyclene 7,039%.
- Observando, analizando y valorando los resultados obtenidos nos damos cuenta que los jugos procesados si contienen una actividad antioxidante pero dichos aditivos al no ser naturales conlleva a adquirir problemas de salud, por lo cual no son recomendados.

Recomendaciones

- La información obtenida en el presente trabajo, beneficia a la población en general, aportando con el conocimiento de los procesos térmicos que degradan la capacidad antioxidante y lo perjudicial que esto resulta tanto para la salud como para el costo de dichos productos.
- Realizar estudios de cromatografía (GC/MS) a las diversas variedades de naranjas, mandarinas y limones de la costa ecuatoriana y así crear una fuente más amplia de los diferentes compuestos de las frutas cítricas, a fin de aprovechar sus propiedades para beneficio de la comunidad.
- Llevar a cabo un proceso diferente para la producción de jugos de frutas, con el fin de que sus propiedades nutraceuticas no se vean afectadas.
- Incentivar a que las empresas nos digan la verdad, mostrando una etiqueta real sobre las propiedades de dichos jugos y entre más naturales sean mejor será para la población.

BIBLIOGRAFÍA

1. Almeida y Flores 2007; Escuela Politécnica Del Litoral “Determinación De Los Costos De Calidad En La Industria De Los Jugos Envasados”
2. Miguel, M.G., 2010. Antioxidant and Anti-Inflammatory Activities of Essential Oils: A Short Review
3. Molecules, 15: 9252-9287.
4. Cavaleiro, C.M.F., 2001. Óleos essenciais de *Juniperus* de Portugal. PhD Thesis, Universidade de Coimbra,
5. Smith, G.F. and Van B.E. Wyk, 1991. generic relationship in the alooideae (Asphodelaceae). Taxon., 40:757- 581.
6. Quezel, P., S. Santa, 1962. Nouvelle Flore de L'Algérie et des Régions Désertiques Méridionales. Tome II.
7. Polunin, O., A. Huxley, 1965. Flowers of the Mediterranean. Chatto and Windus, London.
8. Miguel, M.G., 2010. Antioxidant and Anti-Inflammatory Activities of Essential Oils: A Short Review Molecule, 15: 9252-9287.
9. Smith, G.F. and Van B.E. Wyk, 1991. Generic relationship in the alooideae (Asphodelaceae). Taxon., 40:757-581
10. Sharma K, Ziyadeh FN. Renal hypertrophy is associated with upregulation of TGF-beta 1 gene expression in diabetic BB rat and NOD mouse. Am J Physiol 1994;267:1094-1101.

11. Johnson RN, Metcalf PA, Baker JR. Fructosamine: a new approach to the estimation of serum glycosyl protein. An index of diabetic control. ClinChimActa 1983;127:87-95.
12. Cook JA, Kim SY, Teague D, et al. Convenient colorimetric and fluorometric assays for S-nitrosothiols. Anal Biochem 1996;238:150-158.
13. DallaVestra M, Mussap M, Gallina P, Bruseghin M, Cernigoi AM, Saller A, et al. Acute-phase markers of inflammation and glomerular structure in patients with type 2 diabetes. J Am SocNephrol 2005;16:78-82.
14. Thornalley PJ. Use of aminoguanidine (Pimagidine) to prevent the formation of advanced glycation endproducts. Arch BiochemBiophys 2003; 419:31-40.
15. Mason RM, Wahab NA. Extracellular matrix metabolism in diabetic nephropathy. J Am SocNephrol 2003;14:1358-1373.
16. BARBOSA, L, O. Elaboración de agregados entrecruzados de peroxidasa de la palma real (Roystonea regia). Tesis de pregrado, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia: 2006, pp. 22-29.
17. BELL, S.G., CHEN, X., SOWDEN, R. J., XU, F., WILLIAMS, N., WONG, L. and RAO, Z. Molecular recognition in (+)- α -pinene oxidation by cytochrome P450cam. J. Am. Chem. Soc., 2003. 125: 705-714.

18. BOUGIOUKOU, D.J., SMONOU, I. Chloroperoxidase-catalysed oxidation of conjugated dienoic esters. *Tetrahedron Lett.*, 2002. 43: 339- 342.
19. BURTON, S.G. Oxidizing enzymes as biocatalysts. *Trends Biotechnol.*, 2003. 21(12): 543-549.
20. CARVALHO, C., FONSECA, M. Biotransformation of terpenes. *Biotechnol. Adv.*, 2006. 24: 134-142.
21. CHUNG, B. H., LEE, H-Y., LEE, J. S. and YOUNG, C. Y. F. Perillyl alcohol inhibits the expression and function of the androgen receptor in human prostate cancer cells. *Cancer Lett.*, 2006. 236: 222-228.
22. DEMYTTENAERE, J. C. R., VAN BELLEGHEM, K. and DE KIMPE, N. Biotransformation of R-(+)- and S-(-)-limonene by fungi and the use of solid-phase microextraction for screening. *Phytochemistry*, 2001. 57: 199- 208.
23. DUETZ, W .A. VAN BEILEN, G. B. and WITHOLT, B. Using proteins in their natural environment: potential and limitations of microbial wholecellhydroxylations in applied biocatalysis. *Curr. Opin. Biotechnol.*, 2001.12: 419-425.
24. HAGER, LP. MORRIS, DR., BROWN, F. C., and EBERWEIN, H. Chloroperoxidase. II. Utilization of halogen anions. *J. Biol. Chem.*, 1966. 241 (8):1769-1777.

ANEXOS

HACIENDA



Cromatógrafo de gases



Columna capilar



Equipo en funcionamiento

NARANJA

Library Search Report

D

Data Path : C:\msdchem\1\data\2013 Muestras\
Data File : naranja prueba 121813.D
Acq On : 18 Dec 2013 15:34
Operator :
Sample : naranja prueba 121813
Misc :
ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	10.984	0.03	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ETHYL BUTANOATE ETHYL ISOBUTYRATE ISOBUTYL ISOBUTYRATE	1521 1527 2765	000105-54-4 000097-62-1 000097-85-8	96 42 23
2	17.102	2.11	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CIS-4-CARENE TRICYCLEN BETA-PINENE	1977 959 287	005208-49-1 000508-32-7 000127-91-3	91 87 68
3	17.646	0.10	C:\Database\W9N08.L Cyclohexanol (CAS) \$\$ Anol \$\$ Naxo 1 \$\$ Adronol \$\$ Hexalin \$\$ Adronal Cyclohexanol (CAS) \$\$ Anol \$\$ Naxo 1 \$\$ Adronol \$\$ Hexalin \$\$ Adronal cyclohexanol \$\$ OC1CCCC1	10989 10991 11197	000108-93-0 000108-93-0 999011-19-7	45 38 30
4	18.365	0.05	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L 6-METHYL-5-HEPTENE-2-ONE 2,6-DIMETHYL PYRAZINE P-CRESYL-ISOVALERATE	555 1476 491	000110-93-0 000108-50-9 000000-00-0	96 10 9
5	18.575	1.57	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L SABINENE BETA-PHELLANDRENE ALPHA-PHELLANDRENE	309 929 759	003387-41-5 000000-00-0 000099-83-2	96 95 81
6	18.789	0.10	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L BETA-PINENE SABINENE TRICYCLEN	287 309 959	000127-91-3 003387-41-5 000508-32-7	96 93 83
7	19.140	5.38	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L OCTYL-ALDEHYDE CYCLOHEXANE TRANS-2-OCTENE-1-OL	268 192 1915	000124-13-0 000110-82-7 018409-17-1	98 35 14
8	19.221	7.32	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L MYRCENE BETA-PINENE BETA MYRCENE	398 287 1957	000123-35-3 000127-91-3 000123-35-3	96 52 52
9	19.859	0.32	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ALPHA-THUJENE ALPHA-PHELLANDRENE TRICYCLEN	915 759 959	002867-05-2 000099-83-2 000508-32-7	80 72 64
10	20.198	0.22	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L Alpha-pinene Alpha Pinene (Frankincense) TRICYCLEN	3003 3011 959	000000-00-0 000000-00-0 000508-32-7	95 93 91
11	20.373	0.08	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L TERPINOLENE	448	000586-62-9	93

finca yl.M Tue Apr 15 14:24:11 2014

Page: 1

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2013 Muestras\
Data File : naranja prueba 121813.D
Acq On : 18 Dec 2013 15:34
Operator :
Sample : naranja prueba 121813
Misc :
ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			DELTA- ELEMENE	860	020307-84-0	91
			2-CARENE	774	000000-00-0	83
12	20.579	0.10	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			P-MENTHA-1,5,8-TRIENE	2159	021195-59-5	72
			p-MENTHATRIENE-1,3,8	989	021195-59-5	53
			MYRTENYL ISOVALERATE	40	000000-00-0	50
13	21.093	45.00	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			LIMONENE	227	005989-27-5	95
			LAVANDULYL-ACETATE	437	025905-14-0	38
			THUJYL ALCOOL	1682	000513-23-5	37
14	21.495	0.20	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			CIS-4-CARENE	1977	005208-49-1	81
			OCIMENE-CIS-BETA	961	003338-55-4	80
			TRANS-BETA OCIMENE	768	003779-61-1	72
15	22.082	3.53	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			OCTANOL-1	307	000111-87-5	91
			NONANOL-1	1535	000143-08-8	53
			HEXYL FORMATE	1790	000629-33-4	47
16	23.255	0.66	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			NONYL-ALDEHYDE	269	000124-19-6	90
			NONANOL-1	1535	000143-08-8	16
			TRANS-2-HEXENOL-1-	313	000928-95-0	10
17	23.379	9.38	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			LINALOOL	236	000078-70-6	97
			METHYL-2-PROPYL BUTYRATE	987	000539-90-2	86
			LINALYLE FORMIATE	1369	000115-99-1	62
18	23.961	0.06	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			p-MENTHATRIENE-1,3,8	989	021195-59-5	98
			P-MENTHA-1,5,8-TRIENE	2159	021195-59-5	93
			MYRTENYL HEXANOATE	42	000000-00-0	50
19	24.150	0.38	C:\Database\W9N08.L			
			2,6-Octadienal, 3,7-dimethyl- \$C	70608	005392-40-5	53
			itral \$C 3,7-Dimethyl-2,6-octadien			
			al			
			1,1-Dimethyl-3-methylidene-2-vinyl	67345	095452-08-7	52
			cyclohexane			
			(E,E)-7,11,15-Trimethyl-3-methylen	383282	070901-63-2	47
			e-hexadeca-1,6,10,14-tetraene			
20	24.642	0.18	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			TRANS-PARA-2,8-MENTHADIENE-1-OL	1263	007212-40-0	91
			CIS-P-MENTHA-1(7),8-DIENE-2-OL	1694	002102-62-7	50
			p-MENTHATRIENE-1,3,8	989	021195-59-5	41
21	24.814	0.37	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			TRANS LIMONENE OXYDE	1620	006909-30-4	91

finca yl.M Tue Apr 15 14:24:11 2014

Page: 2

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2013 Muestras\
Data File : naranja prueba 121813.D
Acq On : 18 Dec 2013 15:34
Operator :
Sample : naranja prueba 121813
Misc :
ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			ALPHA-CAMPHOLENE ALDEHYDE	965	000000-00-0	38
			TRANS LIMONENE-1-2-OXYDE	1552	001195-92-2	28
22	24.929	0.07	C:\Database\W9N08.L Camphor (CAS) \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl- (CAS)	71111	000076-22-2	56
			Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl-, (1R)- \$\$ Camphor, (1R,4R)-(+)-	71526	000464-49-3	40
			Hexahydro-1-oxa-cyclopropa[d]inden-2-one	70062	037643-23-5	35
23	25.156	0.53	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CITRONNELLAL	271	000106-23-0	96
			NEROL	371	000106-25-2	43
			FILBERTONE	1928	000000-00-0	35
24	25.520	0.08	C:\Database\W9N08.L trans-3-Pinen-2-ol [2,6,6-trimethylbicyclo[3.1.1]hept-3-en-2-ol]	71783	999071-78-3	70
			Cyclooctane, ethenyl- \$\$ Vinylcyclooctane	47997	061142-41-4	49
			Cyclohexane, ethenyl- \$\$ Cyclohexene, vinyl- \$\$ Cyclohexylethylene	16620	000695-12-5	41
25	25.751	0.04	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ACIDE OCTANOIQUE	340	000124-07-2	90
			DELTA HEPTA-LACTONE	263	000000-00-0	86
			ACIDE NONANOIQUE	1338	000112-05-0	53
26	25.824	0.04	C:\Database\W9N08.L (S)-2-Methyl-6-hepten-1-ol	34593	999034-59-3	38
			citronellyl 2-methylpropanoate	253354	999253-35-4	30
			Citronellyl isobutyrate \$\$ Isobutyric acid, 3,7-dimethyl-6-octenyl ester	253263	000097-89-2	30
27	25.970	0.26	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L NONANOL-1	1535	000143-08-8	91
			DECANOL-1	308	000112-30-1	64
			OCTANOL-1	307	000111-87-5	56
28	26.162	0.13	C:\Database\W9N08.L (S)-2',2'-Dimethyl-6'-methylene-1'-cyclohexylcarbaldehyde	71863	999071-86-3	52
			7-methyl-bicyclo[2,2,1]heptane	16760	999016-76-0	49
			Cyclohexane, ethenyl- (CAS) \$\$ Ethenylcyclohexane \$\$ Vinylcyclohexane	16624	000695-12-5	49
29	26.265	0.03	C:\Database\W9N08.L 1,8-menthadien-4-ol	71294	999071-29-4	91
			(E,E)-Farnesal	235613	999235-61-3	47
			Furan, 2,3-dihydro-3-methyl- (CAS) \$\$ 3-Methyl-2,3-dihydrofuran	4253	001708-27-6	45

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2013 Muestras\
 Data File : naranja prueba 121813.D
 Acq On : 18 Dec 2013 15:34
 Operator :
 Sample : naranja prueba 121813
 Misc :
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
 C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
 C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
30	26.415	0.29	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L TERPINEN-4-OL 2-METHYL-2-BUTENE-1-OL PRENOL(3-METHYL-2-BUTENE-1-OL)	222 2924 2831	000562-74-3 004675-87-0 000556-82-1	98 41 27
31	26.642	0.04	C:\Database\W9N08.L trans-Carveol \$\$ 2-Cyclohexen-1-ol , 2-methyl-5-(1-methylethenyl)-, t rans- (CAS) Methyl salicylate \$\$ Benzoic acid, 2-hydroxy-, methyl ester \$\$ Analg it Methyl salicylate \$\$ Benzoic acid, 2-hydroxy-, methyl ester \$\$ Analg it	70854 69328 69329	001197-07-5 000119-36-8 000119-36-8	55 42 42
32	26.796	1.30	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ALPHA-TERPINEOL BETA-PHELLANDRENE 2-CARENE	267 929 774	010482-56-1 000000-00-0 000000-00-0	91 43 43
33	26.916	0.04	C:\Database\W9N08.L Octanoic acid, ethyl ester (CAS) \$ \$ Ethyl caprylate \$\$ Ethyl octanoa te Octanoic acid, ethyl ester (CAS) \$ \$ Ethyl caprylate \$\$ Ethyl octanoa te Octanoic acid, ethyl ester (CAS) \$ \$ Ethyl caprylate \$\$ Ethyl octanoa te	112855 112853 112856	000106-32-1 000106-32-1 000106-32-1	98 90 68
34	27.164	2.74	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L DECANAL (DECYL-ALDEHYDE) UNDECANAL 1-OCTENE	310 356 1778	000112-31-2 000112-44-7 000111-66-0	91 47 27
35	27.417	0.14	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L OCTYL-ACETATE DECYL-ACETATE DIMETHYL OCTANOL-1-ACETATE	454 512 928	000112-14-1 000112-17-4 000000-00-0	91 50 33
36	27.554	0.16	C:\Database\W9N08.L 1-(2'-Pent-2'-enyl)cyclopentane 8-Methylene-3-oxatricyclo[5.2.0.0(2,4)]nonane cis-.delta.-1/6/,8-Iridadiene	45202 44286 45081	000000-00-0 999044-28-6 000000-00-0	64 60 60
37	27.704	0.28	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CARVEOL	591	000099-48-9	98

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2013 Muestras\
Data File : naranja prueba 121813.D
Acq On : 18 Dec 2013 15:34
Operator :
Sample : naranja prueba 121813
Misc :
ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
38	28.038	0.40	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CITRONNELOL CITRONNELLYL TRANS-3-HEXENOATE CITRONNELLYL-FORMATE	229 1329 295	000106-22-9 000000-00-0 000105-85-1	96 59 53
39	28.098	0.57	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L NEROL GERANYL TRANS-3-HEXENOATE E-E FARNESOL	371 1331 1106	000106-25-2 000000-00-0 000106-28-5	86 59 45
40	28.308	1.23	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L NERAL E-E FARNESOL 2-3-DIMETHYL BUTENE-2	333 1106 1826	000141-27-5 000106-28-5 000563-79-1	91 23 16
41	28.389	0.15	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CARVONE CIS-3-HEXENYLE-HEXANOATE TERPENDIOL	220 497 1798	006485-40-1 031501-11-8 013741-21-4	96 12 9
42	28.933	0.42	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L GERANIOL GERANYL-FORMATE FARNESOL (MELANGE ISOMERES)	280 375 373	000106-24-1 000105-86-2 000106-28-5	95 72 59
43	29.293	1.63	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CITRAL (MELANGE :GERANIAL ET N ERAL) GERANIAL 1,6-OCTADIENE-2,7-DIMETHYL	228 334 2884	000000-00-0 000106-26-3 040195-09-3	97 97 43
44	29.515	0.81	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L PERILLALDEHYDE NEROL OXYDE E,E -8,10 DODECADIENE-1-OL	552 1550 931	018031-40-8 001786-08-9 057002-06-9	99 43 25
45	29.674	0.85	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L DECANOL-1 UNDECANOL-1 NONANOL-1	308 2214 1535	000112-30-1 000112-42-5 000143-08-8	91 64 45
46	30.209	0.27	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L LIMONENE-10-OL SINENSAL NORBORNEOL (ENDO)	599 304 923	000000-00-0 000000-00-0 000497-36-9	99 38 27
47	30.439	0.54	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CARVACROL 4-ISOPROPYL-3-METHYL PHENOL THYMOL	881 2784 353	000499-75-2 003228-02-2 000089-83-8	97 94 93

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2013 Muestras\
Data File : naranja prueba 121813.D
Acq On : 18 Dec 2013 15:34
Operator :
Sample : naranja prueba 121813
Misc :
ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			hylethenyl)- \$\$ p-Mentha-1,8-dien-7-ol			
			Perilla alcohol \$\$ 1-Cyclohexene-1-methanol, 4-(1-methylethenyl)- (CAS)	70832	000536-59-4	95
			Perilla alcohol \$\$ 1-Cyclohexene-1-methanol, 4-(1-methylethenyl)- (CAS)	70829	000536-59-4	94
49	30.827	0.14	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L UNDECANAL	356	000112-44-7	81
			TRIDECANAL	589	000000-00-0	64
			LAURIC ALDEHYDE	572	000000-00-0	64
50	30.944	0.03	C:\Database\W9N08.L 2,4-Decadienal, (E,E)- (CAS) \$\$ trans,trans-2,4-Decadienal \$\$ 2,4-Decadien-1-al	70575	025152-84-5	87
			2,4 DECADIENAL \$\$ HEPTENYL ACROLEIN \$\$ 2,4-Decadienal (CAS) \$\$ DECA-2,4-DIENAL	70572	002363-88-4	70
			2,4-Decadienal, (E,E)- \$\$ (E,E)-2,4-Decadienal \$\$ trans-2, trans-4-Decadienal	70574	025152-84-5	55
51	32.468	0.09	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L TERPENYLE ACETATE	955	000080-26-2	90
			CIS-4-CARENE	1977	005208-49-1	87
			2-CARENE	774	000000-00-0	86
52	32.680	0.06	C:\Database\W9N08.L Decanoic acid (CAS) \$\$ Capric acid \$\$ Decoic acid \$\$ Decylic acid \$\$ Emery 659	112788	000334-48-5	92
			n-Decanoic acid \$\$ Decanoic acid \$ \$ n-Capric acid \$\$ n-Decoic acid	112786	000334-48-5	74
			Decanoic acid (CAS) \$\$ Capric acid \$\$ Decoic acid \$\$ Decylic acid \$\$ Emery 659	112792	000334-48-5	56
53	33.156	0.03	C:\Database\W9N08.L Fumaric acid, 2,4,6-trichlorophenyl tridecyl ester	733920	999733-92-0	45
			2-Hexenal, (E)- (CAS) \$\$ (E)-2-Hexenal \$\$ n-Hex-trans-2-enal \$\$ trans-2-Hexenal	9007	006728-26-3	43
			PSEUDOCORDATOLIDE	558814	999558-81-4	38
54	33.274	0.05	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L GERANYL-ACETATE	282	000105-87-3	81
			GERANYL-PROPIONATE	376	000105-90-8	74
			E,E FARNESYL ACETATE	746	004128-17-0	64
55	33.697	0.05	C:\Database\W9N08.L			

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2013 Muestras\
Data File : naranja prueba 121813.D
Acq On : 18 Dec 2013 15:34
Operator :
Sample : naranja prueba 121813
Misc :
ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			Propanoic acid, 2-methyl-, octyl ester (CAS) \$ n-Octyl isobutyrate	180591	000109-15-9	90
			Butanoic acid, octyl ester \$ Butyric acid, octyl ester \$ n-Octyl butyrate	180569	000110-39-4	90
			Butanoic acid, octyl ester (CAS) \$ Octyl butyrate \$ Octyl butanoate	180574	000110-39-4	90
56	33.885	0.03	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ETHYL-DECANOATE (CAPRATE)	321	000110-38-3	70
			PATCHOULENE	778	001405-16-9	51
			13-NOR-EREMOPHILA-1(10),6-DIEN-11-ONE	132	000000-00-0	42
57	34.068	0.15	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ALPHA-COPAENE	751	003856-25-5	98
			ALPHA-CUBEBENE	750	017699-14-8	97
			BICYCLOSQUIPHELLANDRENE	34	054274-73-6	93
58	34.280	0.63	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L (E)-2-TRIDECENE-1-OL	2212	074962-98-4	83
			TETRADECANAL	77	000124-25-4	83
			TETRADECANAL	1986	000124-25-4	80
59	34.415	0.21	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L D-GERMACRENE	756	023986-74-5	93
			CALARENE	854	000000-00-0	93
			BETA CUBEBENE	2405	028673-14-5	86
60	34.968	0.03	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CINNAMYL ACETATE	748	000103-54-8	98
			BENZENE-1-PROPENYLE	747	000000-00-0	7
			BUTYL GLUTARATE	1571	006624-57-3	4
61	35.503	0.51	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ALPHA-CARYOPHYLLENE	281	000000-00-0	99
			TRANS-CARYOPHYLLENE (BETA)	859	000087-44-5	99
			ISOCARYOPHYLLENE	858	000000-00-0	91
62	35.762	0.31	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L BETA COPAENE	94	018252-44-3	99
			CIS-MUROLA-4(14),5-DIENE	2284	000000-00-0	96
			BETA-CUBEBENE	752	000000-00-0	95
63	36.168	0.13	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L E-BETA FARNESENE	1118	000502-60-3	97
			Z-BETA- FARNESENE	1121	000000-00-0	97
			BETA SESQUIPHELLANDRENE	1139	020307-83-9	59
64	36.362	0.05	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L BETA SELINENE (ex celeri)	1117	017066-67-0	83
			ALLO-AROMADENDRENE	1005	025246-27-9	83
			AROMADENDRENE	853	000489-39-4	70

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2013 Muestras\
Data File : naranja prueba 121813.D
Acq On : 18 Dec 2013 15:34
Operator :
Sample : naranja prueba 121813
Misc :
ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
65	36.450	0.05	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L PENTADECENE-1 UNDECANOL-1 TETRADECANOL-1	211 2214 640	013360-61-7 000112-42-5 000000-00-0	83 83 68
66	36.544	0.10	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ALPHA HUMULENE ALPHA-HUMULEN BISABOLENE	283 303 302	006753-98-6 006753-98-6 000495-61-4	98 97 68
67	37.091	0.07	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L GAMMA CADINENE GAMMA-MUROLENE BICYCLOSQUIPHELLANDRENE	1135 796 34	039029-41-9 030021-74-0 054274-73-6	96 93 92
68	37.226	0.04	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L GUAIDIENE-6-9 ISOLEDENE 10-EPT-ZONARENE	1019 856 2283	000000-00-0 000000-00-0 035938-51-3	92 90 90
69	37.326	0.21	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L D-GERMACRENE BETA COPAENE BETA CUBEENE	756 94 2405	023986-74-5 018252-44-3 028673-14-5	98 96 94
70	37.521	0.06	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ALLO-AROMADENDRENE ALPHA SELINENE 1(10),7(11)-GUAIDIENE	1005 861 779	025246-27-9 000473-13-2 003691-11-0	95 70 64
71	37.709	1.27	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L VALENCENE BETA-PATCHOULENE AROMADENDRENE	301 777 853	004630-07-3 000514-51-2 000489-39-4	99 86 86
72	37.803	0.14	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L EREMOPHILA-1(10),7(11)-DIENE PATCHOULENE CALARENE	124 778 854	051608-13-0 001405-16-9 000000-00-0	89 89 89
73	38.038	0.04	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L EREMOPHILA-1(10),7(11)-DIENE DELTA-CADINENE TAMARISCENE	124 793 2264	051608-13-0 000483-76-1 000000-00-0	95 55 52
74	38.432	0.36	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L DELTA-CADINENE 7alphaH,10betaH-CADINA-1(6),4-DIEN DELTA AMORPHENE	793 33 2389	000483-76-1 016729-00-3 189165-79-5	96 87 83
75	39.032	0.03	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ALPHA ELEMOL VALERIANOL (VALERIANE) GUAJOL	1098 1925 934	000639-99-6 000000-00-0 000489-86-1	91 47 42

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2013 Muestras\
Data File : naranja prueba 121813.D
Acq On : 18 Dec 2013 15:34
Operator :
Sample : naranja prueba 121813
Misc :
ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
76	39.291	0.06	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L NEROLIDOL ISOMERE 2 TRANS-NEROLIDOL NEROLIDOL ISOMERE 1	336 372 335	040716-66-3 040716-66-3 000142-50-7	95 93 91
77	40.250	0.10	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CARYOPHYLLENE OXYDE PARA MENTHA-3,8-DIENE ALPHA YLANGENE OXYDE	780 1433 2388	001139-30-6 000586-67-4 000000-00-0	96 43 38
78	40.626	0.40	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L TRICOSANE DOCOSANE (C22) EICOSANE (PARAFFINE C20)	21 393 387	000638-67-5 000629-97-0 000112-95-8	98 94 91
79	40.673	0.63	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L TRICOSANE HENEICOSANE DOCOSANE (C22)	21 950 393	000638-67-5 000629-94-7 000629-97-0	98 97 91
80	41.373	0.03	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L 10-EPI-ZONARENE ZONARENE DELTA-CADINENE	2283 35 793	035938-51-3 149115-45-7 000483-76-1	90 90 66
81	41.856	0.04	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L COPAENE GAMMA CADINENE GAMMA MUUROLENE	745 1135 1166	003856-25-5 039029-41-9 030021-74-0	83 55 52
82	42.191	0.14	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L BISABOLOL OXYDE B BISABOLOL OXYDE A CUBENOL	1519 1518 1102	026184-88-3 022567-36-8 000000-00-0	99 14 10
83	42.844	0.04	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L BISABOLOL-ALPHA ALPHA DUPREZIANENE ALPHA DUPREZIANENE	946 1987 2071	072691-24-8 079801-29-9 079801-29-9	74 45 45
84	42.991	0.19	C:\Database\W9N08.L .beta.-Sinensal \$\$ 2,6,9,11-Dodeca tetraenal, 2,6,10-trimethyl- (CAS) 2,6,9,11-Dodecatetraenal, 2,6,10-t rimethyl- .beta.-Sinensal \$\$ 2,6,9,11-Dodeca tetraenal, 2,6,10-trimethyl- (CAS)	229593 229594 229596	004955-32-2 004955-32-2 004955-32-2	90 86 72
85	44.414	0.28	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ALPHA SINENSAL E-E-ALPHA FARNESENE Z-Z-ALPHA FARNESENE	1643 1120 1123	017909-77-2 000502-61-4 000000-00-0	94 83 50

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2013 Muestras\
Data File : naranja prueba 121813.D
Acq On : 18 Dec 2013 15:34
Operator :
Sample : naranja prueba 121813
Misc :
ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
86	44.591	0.12	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L BISABOLOL OXYDE A	1518	022567-36-8	99
			BISABOLOL OXYDE B	1519	026184-88-3	12
87	44.979	0.03	C:\Database\W9N08.L cis-13-Octadecenoic acid	410260	013126-39-1	44
			cis-Vaccenic acid	410259	000506-17-2	44
			1-(1-HYDROXYHEXYL)-2,5-DIMETHOXYBE NZENE	286055	999286-05-5	30
88	46.002	0.03	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L NOOTKATONE	306	004674-50-4	99
			EREMOPHILA-1(10),6-DIEN-12AL	147	000000-00-0	27
			ALPHA-CARYOPHYLENE	281	000000-00-0	15
89	46.273	0.05	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L TETRADECANAL	77	000124-25-4	91
			TETRADECANAL	2070	000124-25-4	91
			TETRADECANAL	1986	000124-25-4	91
90	47.085	0.06	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L 1,6-DIOXASPIRO(4.4)NON-3-ENE,2-(2, 4-HEXADIYN-1-YLIDENE)	1659	000000-00-0	99
91	47.285	0.27	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L 1,6-DIOXASPIRO(4.4)NON-3-ENE,2-(2, 4-HEXADIYN-1-YLIDENE)	1659	000000-00-0	99
			BUTYL GLUTARATE	1571	006624-57-3	7
			PROPYL GLUTARATE	1569	000000-00-0	6
92	47.567	0.04	C:\Database\W9N08.L Cyclononasiloxane, octadecamethyl- \$\$ Octadecamethyl-cyclononasiloxan OCTADECAMETHYLCYCLONONASILOXANE \$\$ Cyclononasiloxane, octadecamethyl - (CAS) OCTADECAMETHYLCYCLONONASILOXANE \$\$ Cyclononasiloxane, octadecamethyl - (CAS)	785080	000556-71-8	87
				785081	000556-71-8	87
				785087	000556-71-8	72
93	48.896	0.04	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L DOCOSANE (C22)	393	000629-97-0	93
			EICOSANE (PARAFFINE C20)	387	000112-95-8	42
			(E)-2-DODECENE-1-OL	2211	000000-00-0	35
94	49.779	0.05	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ACIDE HEXADECANOIQUE (PALMITIC ACIDE DODECANOIQUE (LAURIC) ACIDE TRIDECANOIQUE	343	000057-10-3	99
				345	000143-07-7	45
				590	000000-00-0	43
95	50.755	0.22	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L TETRACOSANE (C24)	394	000646-31-1	98
			DOCOSANE (C22)	393	000629-97-0	76
			NONADECANE	949	000629-92-5	68

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2013 Muestras\
Data File : naranja prueba 121813.D
Acq On : 18 Dec 2013 15:34
Operator :
Sample : naranja prueba 121813
Misc :
ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
96	51.649	0.04	C:\Database\W9N08.L EICOSAMETHYLCYCLODECASILOXANE \$\$ C yclodecasiloxane, eicosamethyl- Cyclodecasiloxane, eicosamethyl- EICOSAMETHYLCYCLODECASILOXANE \$\$ C yclodecasiloxane, eicosamethyl-	790095 790093 790094	018772-36-6 018772-36-6 018772-36-6	90 90 90
97	53.667	0.03	C:\Database\W9N08.L 2-Nonadecanone (CAS) \$\$ Methyl hep tadecyl ketone \$\$ 2-NONADECANON 1,2,5-Oxadiazol-3-amine, 4-(4-meth oxyphenoxy)- 1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxa ne \$\$ Bis(trimethylsiloxy)methylsi lane	410480 198340 238341	000629-66-3 999198-34-0 001873-88-7	38 38 38
98	55.449	0.03	C:\Database\W9N08.L Octasiloxane, 1,1,3,3,5,5,7,7,9,9, 11,11,13,13,15,15-hexadecamethyl- 1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13,15 15-HEXADECAMETHYL-OCTASILOXANE Heptasiloxane, 1,1,3,3,5,5,7,7,9,9 11,11,13,13-tetradecamethyl-	772256 772257 749199	019095-24-0 019095-24-0 019095-23-9	49 49 43
99	56.290	1.87	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L PENTACOSANE OCTADECANE DOCOSANE (C22)	22 386 393	000629-99-2 000593-45-3 000629-97-0	99 91 91
100	58.102	0.04	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L EICOSANE (PARAFFINE C20) TETRACOSANE (C24) DOCOSANE (C22)	387 394 393	000112-95-8 000646-31-1 000629-97-0	91 55 49

LIMON

Library Search Report

B

Data Path : C:\msdchem\1\data\2014.muestras\
Data File : limon 012314.D
Acq On : 24 Jan 2014 17:08
Operator :
Sample : limon 012314
Misc :
ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	16.768	0.23	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ALPHA-THUJENE ALPHA-PHELLANDRENE GAMMA-TERPINENE	915 759 230	002867-05-2 000099-83-2 000099-85-4	95 94 78
2	17.106	1.65	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CIS-4-CARENE TRICYCLEN TRANS-BETA OCIMENE	1977 959 768	005208-49-1 000508-32-7 003779-61-1	91 90 86
3	17.577	0.06	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L FENCHENE-ALPHA BETA FENCHENE LINALYLE ISOVALERATE	960 1955 1387	000471-84-1 000497-32-5 050649-12-2	95 60 50
4	17.658	0.22	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CAMPHENE TERPINEOL-GAMMA BETA MYRCENE	760 921 1957	000079-92-5 000586-81-2 000123-35-3	98 64 59
5	18.498	0.10	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L LIMETOL (2,6,6-TRIMETHYL-6- VINYL T ETRAHYDROPYRANE) NERYL BUTYRATE 7-OCTENE-2,6-DIOL	2872 112 1625	007392-19-0 000000-00-0 029210-77-3	98 37 32
6	18.600	1.08	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L SABINENE BETA-PHELLANDRENE BETA-PINENE	309 929 287	003387-41-5 000000-00-0 000127-91-3	96 95 72
7	18.866	6.63	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L BETA-PINENE SABINENE TRICYCLEN	287 309 959	000127-91-3 003387-41-5 000508-32-7	95 93 86
8	19.110	0.34	C:\Database\W9N08.L Octanal (CAS) \$\$ n-Octanal \$\$ n-Oct tylal \$\$ Antifoam-LF \$\$ Octaldehyd Octanal \$\$ n-Caprylaldehyde \$\$ n-O ctaldehyde \$\$ n-Octanal \$\$ n-Octyl al Octanal \$\$ n-Caprylaldehyde \$\$ n-O ctaldehyde \$\$ n-Octanal \$\$ n-Octyl al	34054 34044 34050	000124-13-0 000124-13-0 000124-13-0	50 50 50
9	19.200	1.27	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L MYRCENE BETA MYRCENE BETA-PINENE	398 1957 287	000123-35-3 000123-35-3 000127-91-3	95 52 49
10	19.774	0.15	C:\Database\W9N08.L 1,3,8-PARA-MENTHATRIENE Mentha-1,4,8-triene	41758 41757	018368-95-1 999041-75-7	91 90

finca yl.M Tue Apr 15 14:17:06 2014

Page: 1

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2014.muestras\
Data File : limon 012314.D
Acq On : 24 Jan 2014 17:08
Operator :
Sample : limon 012314
Misc :
ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			1,5,8-p-menthatriene	41751	999041-75-1	81
11	19.859	0.45	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ALPHA-THUJENE	915	002867-05-2	74
			ALPHA-PHELLANDRENE	759	000099-83-2	72
			BETA-PHELLANDRENE	929	000000-00-0	45
12	20.360	1.13	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CIS-4-CARENE	1977	005208-49-1	94
			2-CARENE	774	000000-00-0	89
			ALPHA CAMPHOLENE ALCOOL ACETATE	18	000000-00-0	72
13	20.480	1.26	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L PARA-CYMENE	234	000099-87-6	97
14	21.092	16.97	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L LIMONENE	227	005989-27-5	93
			LAVANDULYL-ACETATE	437	025905-14-0	38
			THUJYL ALCOOL	1682	000513-23-5	37
15	21.474	0.50	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L OCIMENE-CIS-BETA	961	003338-55-4	83
			CIS-4-CARENE	1977	005208-49-1	81
			TRANS-BETA OCIMENE	768	003779-61-1	72
16	22.073	7.04	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L TRICYCLEN	959	000508-32-7	94
			ALPHA-THUJENE	915	002867-05-2	83
			GAMMA-TERPINENE	230	000099-85-4	72
17	22.728	0.36	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L METHYL-BENZOATE	460	000093-58-3	91
			ALLYL BENZOATE	2798	000583-04-0	59
			HYDRATROPIC ALCOOL	1037	001123-85-9	1
18	22.934	0.21	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L DIMETHYLSTYRENE(para-alpha)	991	001195-32-0	97
			BENZYL CYANURE (BENZENE ACETONITRI LE)	781	000140-29-4	12
			3-PHENYL-PROPYL-ACETATE	532	000122-72-5	10
19	23.199	2.13	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CIS-4-CARENE	1977	005208-49-1	90
			2-CARENE	774	000000-00-0	81
			TERPINOLENE	448	000586-62-9	80
20	23.366	3.06	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L LINALOOL	236	000078-70-6	97
			METHYL-2-PROPYL BUTYRATE	987	000539-90-2	86
			LINALYLE FORMIATE	1369	000115-99-1	62
21	24.008	0.39	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L FENCHYL-ALCOOL	611	000000-00-0	98
			TRANS-2-TRANS-4-DECADIENAL-1	427	025152-84-5	27

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2014.muestras\
Data File : limon 012314.D
Acq On : 24 Jan 2014 17:08
Operator :
Sample : limon 012314
Misc :
ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			2-4-DODECADIENE-1-OL	1033	018409-21-7	12
22	24.295	0.11	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L TRANS-PARA-2-MENTHENE-1-OL	1128	029803-81-4	98
			CIS-PARA-MENTH-2-ENE-1-OL	1258	029803-82-5	97
			FENCHENE-ALPHA	960	000471-84-1	60
23	24.638	0.08	C:\Database\W9N08.L Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) \$\$ p-Cymene (CAS) \$\$ p-Cy mol	41599	000099-87-6	91
			1,3,8-p-Menthatriene \$\$ 1,3-Cyclohexadiene, 2-methyl-5-(1-methylethyl)-	41711	021195-59-5	89
			2,6-Dimethyl-1,3,5,7-octatetraene, E, E-	41821	000460-01-5	76
24	24.801	0.06	C:\Database\W9N08.L 1,5-Heptadiene, 3,3-dimethyl-, (E) - (CAS) \$\$ (5E)-3,3-Dimethyl-1,5-heptadiene	29336	067682-47-7	52
			1,5-Heptadiene, 3,3-dimethyl-, (E) - \$\$ (5E)-3,3-Dimethyl-1,5-heptadiene #	29335	067682-47-7	52
			4-Methyl-1,5-heptadiene \$\$ (5E)-4-Methyl-1,5-heptadiene	16703	000998-94-7	47
25	24.916	0.12	C:\Database\W9N08.L (2-Methylprop-1-enyl)-cyclohexa-1,3-diene	41756	999041-75-6	58
			p-Isopropenylphenol \$\$ 4-Isopropenylphenol #	41403	004286-23-1	55
			Phenol, 2-(2-propenyl)- (CAS) \$\$ o-Allylphenol \$\$ 2-Allylphenol	41267	001745-81-9	52
26	24.976	0.22	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L p-MENTHATRIENE-1,3,8 BENZENE PROPANAL ISOPROPYL-METHYL BENZENE (ISOMERE 1	989 1003 992	021195-59-5 000104-53-0 000000-00-0	86 49 47
27	25.203	1.01	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L BENZYL-ACETATE MENTHOFURANE M-CRESOL	292 288 616	000140-11-4 000494-90-6 000000-00-0	97 53 52
28	25.520	0.26	C:\Database\W9N08.L 7-methyl-bicyclo[2,2,1]heptane Cyclohexane, ethenyl- \$\$ Cyclohexane, vinyl- \$\$ Cyclohexylethylene	16760 16621	999016-76-0 000695-12-5	43 41
			3-Octyne, 7-methyl- (CAS) \$\$ 5-OCTYNE, 2-METHYL- \$\$ 7-Methyl-3-octyne	29317	037050-06-9	38
29	25.785	0.26	C:\Database\W9N08.L p-Mentha-1,5-dien-8-ol (CAS) \$\$.a	70752	001686-20-0	83

finca yl.M Tue Apr 15 14:17:06 2014

Page: 3

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2014.muestras\
Data File : limon 012314.D
Acq On : 24 Jan 2014 17:08
Operator :
Sample : limon 012314
Misc :
ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			lpha.-Phellandren-8-ol			
			1,3-Cycloheptadiene	7681	004054-38-0	70
			1,4-Cyclohexadiene, 1-methyl- \$\$ 1	7675	004313-57-9	53
			-Methyl-1,4-cyclohexadiene			
30	25.970	0.37	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			BORNEOL	831	000464-45-9	95
			BORNEOL	790	000507-70-0	78
			1,2,3-TRIMETHYL CYCLOPENTENE	2771	000473-91-6	72
31	26.175	0.35	C:\Database\W9N08.L			
			(S)-2',2'-Dimethyl-6'-methylene-1'	71863	999071-86-3	64
			-cyclohexylcarbaldehyde			
			(-)-TRANS-CARANON-(3) \$\$ 4,7,7-Tri	70992	004176-04-9	62
			methylbicyclo[4.1.0]heptan-3-one \$			
			\$ CARANONE			
			cis-1,2-Dihydroperillaldehyde	71868	999071-86-8	60
32	26.295	0.08	C:\Database\W9N08.L			
			1,8-menthadien-4-ol	71294	999071-29-4	90
			3-Methyl-1-dodecyn-3-ol	171320	024424-78-0	43
			Furan, 2,3-dihydro-3-methyl- \$\$ 3-	4252	001708-27-6	43
			Methyl-2,3-dihydrofuran #			
33	26.453	2.31	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			TERPINEN-4-OL	222	000562-74-3	98
			2-METHYL-2-BUTENE-1-OL	2924	004675-87-0	41
			PRENOL(3-METHYL-2-BUTENE-1-OL)	2831	000556-82-1	27
34	26.719	0.11	C:\Database\W9N08.L			
			p-Mentha-1(7),2-dien-8-ol (CAS) \$\$	70825	065293-09-6	78
			.beta.-Phellandren-8-ol			
			(3aS,6aR)-2,3,5,6-tetrahydro-3a,6a	44204	105616-37-3	72
			-methano-1H,4H-pentalen-1-one			
			1,3-Cycloheptadiene	7681	004054-38-0	70
35	26.877	4.42	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			ALPHA-TERPINEOL	267	010482-56-1	91
			TERPINENE-4-YLE ACETATE	1436	004821-04-9	50
			ALPHA TERPINYLE VALERATE	29	000000-00-0	50
36	27.160	0.77	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			DECANAL (DECYL-ALDEHYDE)	310	000112-31-2	91
			UNDECANAL	356	000112-44-7	47
			1-OCTENE	1778	000111-66-0	27
37	27.520	0.07	C:\Database\W9N08.L			
			3-Cyclohexene-1-acetaldehyde, .alp	70775	029548-14-9	86
			ha.,4-dimethyl- \$\$ p-Menth-1-en-9-			
			al			
			6-Acetoxy-1,4-dimethylbicyclo[3.2.	130479	999130-47-9	72
			0]hept-3-ene			
			1-Hexen-3-yne, 2-methyl- (CAS) \$\$	7655	023056-94-2	59
			C2H5C\$.CC(CH3)=CH2 \$\$ 2-Methyl-1-			

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2014.muestras\
Data File : limon 012314.D
Acq On : 24 Jan 2014 17:08
Operator :
Sample : limon 012314
Misc :
ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
hexen-3-yne						
38	27.605	0.06	C:\Database\W9N08.L 3-(CYCLOHEX-2''-EN-YL)-PROPIONALDEH YDE \$\$ 3-Cyclohexene-1-propanal (C AS) Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 2,3-dime thyl- (CAS) \$\$ Santene \$\$ Santen Bicyclo[4.2.0]oct-4-ene-7,7-dicarb onitrile, 4,8,8-trimethyl-, (cis)-	47379	022858-74-8	78
				27549	000529-16-8	78
				181104	999181-10-4	72
39	28.192	2.38	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L NEROL E-E FARNESOL GERANYL-ACETATE	371 1106 282	000106-25-2 000106-28-5 000105-87-3	97 45 42
40	28.389	3.77	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L NERAL 2-3 EPOXYNERAL GERANIAL	333 1703 334	000141-27-5 000000-00-0 000106-26-3	91 32 25
41	29.053	2.88	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L GERANIOL GERANYL-FORMATE LAVANDULOL	280 375 1367	000106-24-1 000105-86-2 000498-16-8	94 56 50
42	29.399	4.66	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CITRAL (MELANGE :GERANIAL ET N ERAL) GERANIAL 2-3-DIMETHYL BUTENE-2	228 334 1826	000000-00-0 000106-26-3 000563-79-1	97 90 43
43	29.537	0.20	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L PERILLALDEHYDE PRENYLE ACETATE NEROL OXYDE	552 462 1550	018031-40-8 001191-16-8 001786-08-9	99 37 23
44	29.682	0.21	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L DECANOL-1 NONANOL-1 NONENE-1	308 1535 1683	000112-30-1 000143-08-8 000124-11-8	91 47 38
45	30.444	0.38	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CARVACROL THYMOL ACETANISOLE(P-METHOXY-ACETOPHENONE	881 353 575	000499-75-2 000089-83-8 000000-00-0	97 90 72
46	30.544	0.06	C:\Database\W9N08.L 1-Cyclohexene-1-methanol, 4-(1-met hylethenyl)- \$\$ p-Mentha-1,8-dien- 7-ol Perilla alcohol \$\$ 1-Cyclohexene-1 -methanol, 4-(1-methylethenyl)- (C AS)	70827 70829	000536-59-4 000536-59-4	96 95

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2014.muestras\
Data File : limon 012314.D
Acq On : 24 Jan 2014 17:08
Operator :
Sample : limon 012314
Misc :
ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			Perilla alcohol \$\$ 1-Cyclohexene-1-methanol, 4-(1-methylethenyl)- (C AS)	70830	000536-59-4	93
47	30.697	0.06	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L MYRTENYL HEXANOATE MYRTENYL PROPIONATE MYRTENYL ISOVALERATE	42 39 40	000000-00-0 000000-00-0 000000-00-0	78 72 64
48	30.827	0.09	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L UNDECANAL TETRADECANAL (E)-2-TRIDECENE-1-OL	356 77 2212	000112-44-7 000124-25-4 074962-98-4	76 72 64
49	32.221	0.09	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ACIDE GERANIQUE ACIDE GERANIQUE 1,6-OCTADIENE-2,7-DIMETHYL	1446 1239 2884	000459-80-3 000459-80-3 040195-09-3	95 30 28
50	32.480	0.46	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L TERPENYLE ACETATE 2-CARENE ALPHA TERPINYLE VALERATE	955 774 29	000080-26-2 000000-00-0 000000-00-0	91 83 78
51	32.562	0.07	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L DELTA- ELEMENE 2-CARENE CIS-4-CARENE	860 774 1977	020307-84-0 000000-00-0 005208-49-1	99 97 91
52	32.668	1.01	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L DELTA- ELEMENE BETA-PINENE ACETATE DE LINALYLE	860 287 237	020307-84-0 000127-91-3 000115-95-7	98 91 64
53	33.068	0.12	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L METHYL-CINNAMATE ALLYL-CINNAMATE SAFROLE	351 474 273	000103-26-4 001866-31-5 000094-59-7	96 40 12
54	33.291	0.99	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L GERANYL-ACETATE GERANYL TRANS-3-HEXENOATE GERANYL-BUTYRATE	282 1331 377	000105-87-3 000000-00-0 000106-29-6	91 90 90
55	34.068	0.09	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ALPHA-COPAENE ALPHA-CUBEBENE CADINA-1,4-DIENE	751 750 1103	003856-25-5 017699-14-8 016728-99-7	99 97 90
56	34.291	0.36	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L LAURIC ALDEHYDE TETRADECANAL UNDECANAL	572 77 356	000000-00-0 000124-25-4 000112-44-7	90 83 58

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2014.muestras\
Data File : limon 012314.D
Acq On : 24 Jan 2014 17:08
Operator :
Sample : limon 012314
Misc :
ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
57	34.421	0.59	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L BETA-ELEMENE	795	000515-13-9	81
			GERMACRENE A	2444	028387-44-2	46
			ALPHA-CARYOPHYLENE	281	000000-00-0	18
58	34.968	0.30	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CINNAMYL ACETATE	748	000103-54-8	98
			BENZENE-1-PROPENYLE	747	000000-00-0	11
			PHENOXY ETHYL ISOBUTYRATE	1667	000103-60-6	8
59	35.144	0.11	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L BERGAMOTENE ALPHA	945	017699-05-7	99
			Z-E-ALPHA FARNESENE	1119	000000-00-0	83
			TRANS ALPHA BERGAMOTAL	11	000000-00-0	80
60	35.521	2.11	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L TRANS-CARYOPHYLLENE (BETA)	859	000087-44-5	99
			ALPHA-CARYOPHYLENE	281	000000-00-0	99
			ISOCARYOPHYLENE	858	000000-00-0	94
61	35.715	0.25	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L GERMACRENE-B	775	015423-57-1	99
			GAMMA-ELEMENE	1100	029873-99-2	99
			BICYCLOELEMENE	54	032531-56-9	53
62	35.850	1.48	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L BERGAMOTENE ALPHA	945	017699-05-7	99
			TRANS ALPHA BERGAMOTAL	11	000000-00-0	86
			Z-E-ALPHA FARNESENE	1119	000000-00-0	80
63	36.168	0.18	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L E-BETA FARNESENE	1118	000502-60-3	98
			Z-BETA- FARNESENE	1121	000000-00-0	97
			MYRCENE	398	000123-35-3	50
64	36.550	0.69	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ALPHA-HUMULEN	303	006753-98-6	98
			ALPHA HUMULENE	283	006753-98-6	96
			BETA MYRCENE	1957	000123-35-3	49
65	37.097	0.32	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L GAMMA MUUROLENE	1166	030021-74-0	97
			ISOLEDENE	856	000000-00-0	76
			ALPHA-COPAENE	751	003856-25-5	76
66	37.232	0.15	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ALPHA AMORPHENE	121	000483-75-0	96
			BERGAMOTENE (autre isomère)	1190	000000-00-0	91
			ALPHA MUUROLENE	1134	031983-22-9	89
67	37.338	1.29	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L D-GERMACRENE	756	023986-74-5	98
			BETA COPAENE	94	018252-44-3	96
			GAMMA CADINENE	1135	039029-41-9	93

finca yl.M Tue Apr 15 14:17:06 2014

Page: 7

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2014.muestras\
Data File : limon 012314.D
Acq On : 24 Jan 2014 17:08
Operator :
Sample : limon 012314
Misc :
ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
68	37.538	0.27	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L AROMADENDRENE BETA MAALIENE DELTA SELINENE	853 31 1950	000489-39-4 000489-29-2 000473-14-3	97 95 91
69	37.756	3.39	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ALPHA-FARNESENE E-E-ALPHA FARNESENE Z-Z-ALPHA FARNESENE	757 1120 1123	000000-00-0 000502-61-4 000000-00-0	98 98 87
70	37.985	2.54	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L BISABOLENE BETA-BISABOLENE BISABOLENE	958 762 302	000000-00-0 000495-61-4 000495-61-4	99 99 60
71	38.238	0.16	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L GAMMA CADINENE GAMMA MUUROLENE D-GERMACRENE	1135 1166 756	039029-41-9 030021-74-0 023986-74-5	99 93 83
72	38.444	0.38	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L DELTA-CADINENE 7alphaH,10betaH-CADINA-1(6),4-DIEN GAMMA MUUROLENE	793 33 1166	000483-76-1 016729-00-3 030021-74-0	96 83 70
73	38.903	0.23	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L TRANS ALPHA BISABOLENE BISABOLENE-ALPHA BISABOLENE	1419 1002 958	070286-16-7 000000-00-0 000000-00-0	94 89 70
74	39.285	0.11	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L NEROLIDOL ISOMERE 1 HUMULENE-GAMMA MYRCENE	335 999 398	000142-50-7 026259-79-0 000123-35-3	72 46 43
75	39.679	0.36	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L BICYCLOGERMACRENE GAMMA-ELEMENE GERMACRENE-B	1132 1100 775	000000-00-0 029873-99-2 015423-57-1	83 83 83
76	40.250	0.09	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L CARYOPHYLLENE OXYDE E-E-ALPHA FARNESENE LEDOL	780 1120 1027	001139-30-6 000502-61-4 000577-27-5	93 41 38
77	40.344	0.12	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L GLOBULOL VIRIDIFLOROL GURJUNENE-GAMMA	1004 1028 963	000489-41-8 000552-02-3 000000-00-0	99 98 91
78	40.503	0.13	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L COPAENE ZONARENE	745 35	003856-25-5 149115-45-7	89 83

finca yl.M Tue Apr 15 14:17:06 2014

Page: 8

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2014.muestras\
Data File : limon 012314.D
Acq On : 24 Jan 2014 17:08
Operator :
Sample : limon 012314
Misc :
ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			BETA-PATCHOULENE	777	000514-51-2	78
79	40.603	0.27	C:\Database\W9N08.L 1,13-Tetradecadiene 1,13-Tetradecadiene 5-Nonadecen-1-ol	165929 165930 410500	021964-49-8 021964-49-8 999410-50-0	83 78 60
80	40.779	0.07	C:\Database\W9N08.L (Z,Z)-.alpha.-Farnesene (-)-Allospathulenol .alpha.-selinene \$\$ EUDESMA-3,11-D IENE \$\$ (-)-.ALPHA.-SELINENE	192216 235879 192029	999192-21-6 999235-87-9 000473-13-2	47 46 46
81	40.938	0.18	C:\Database\W9N08.L Veridiflorol \$\$ Viridiflorol \$\$ D- VIRIDIFLOROL Tricyclo[2.2.1.0(2,6)]heptane, 1,7 -dimethyl-7-(4-methyl-3-pentenyl)- (CAS) (+)-LONGICYCLENES \$\$ (+)-LONGICYCLE	242082 191795 192123	000552-02-3 000512-61-8 999192-12-3	59 55 55
82	41.179	0.12	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L EUDESM-6-EN-4-OL GAMMA GUAIENE CYCLOSEYCHELLENE	150 2286 1198	1000140-23-2 113561-07-2 086562-17-6	99 70 70
83	41.367	0.30	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ALPHA NEOCALLITROPSENE ALLO-AROMADENDRENE VALENCENE	1963 1005 301	090025-12-0 025246-27-9 004630-07-3	72 64 60
84	41.591	0.10	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L ALPHA GURJUNENE GAMMA-EUDESOL PATCHOULENE	1542 794 778	000489-40-7 000000-00-0 001405-16-9	95 95 83
85	41.644	0.07	C:\Database\W9N08.L 4,8,8-Trimethylspiro[2.6]non-4,6-d iene Tetracyclopropylethylene 1,7,7-Trimethyl-2-vinylbicyclo[2.2 .1]hept-2-ene	91107 150728 91168	081532-24-3 999150-72-8 130930-56-2	55 53 50
86	41.785	0.38	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L TAU-CADINOL TAU MUUROL ALPHA CADINOL	1706 754 755	005937-11-1 019912-62-0 000481-34-5	99 78 64
87	41.979	0.08	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L COPAENE ALPHA AMORPHENE GAMMA-MUUROLENE	745 121 796	003856-25-5 000483-75-0 030021-74-0	95 55 55
88	42.138	1.06	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			

finca yl.M Tue Apr 15 14:17:06 2014

Page: 9

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2014.muestras\
Data File : limon 012314.D
Acq On : 24 Jan 2014 17:08
Operator :
Sample : limon 012314
Misc :
ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			ALPHA CADINOL	755	000481-34-5	99
			TAU MUUROL	754	019912-62-0	98
			TAU-CADINOL	1706	005937-11-1	60
89	42.520	0.47	C:\Database\W9N08.L			
			2,2-Dimethyl-2-methylene-1-(3'-met	235377	079861-99-7	60
			hyl-4'-pentenyl)-3-cyclohexen-1-ol			
			1-methyl-2-(3-methyl-2-buten-1-yl)	242176	108287-20-3	43
			-1-(4-methyl-3-penten-1-yl) oxetan			
			1,4-METHANO-1H-INDENE, OCTAHYDRO-1	192192	087064-18-4	35
			,7A-DIMETHYL-4-(1-METHYLETHENYL)-,			
			[1S-(1....			
90	42.691	0.06	C:\Database\W9N08.L			
			SYLVENONE	203037	000000-00-0	50
			4-Azatricyclo[3.2.1.0(2,7)]octan-3	27980	999027-98-0	41
			-one			
			Spiro[4.4]non-3-en-2-one, 4-methyl	232780	999232-78-0	38
			-3-(1H-tetrazol-5-yl)-1-oxa-			
91	42.908	0.57	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			10-EPI-ITALICENE	2	094450-85-8	93
			BISABOL-ALPHA	946	072691-24-8	91
			ITALICENE	1211	094482-89-0	52
92	43.338	0.09	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			JUNIPER CAMPHOR	1587	000473-04-1	99
			BETA-PATCHOULENE	777	000514-51-2	64
			DELTA-CADINENE	793	000483-76-1	55
93	43.708	0.77	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			FARNESOL	753	000000-00-0	95
			E-E FARNESOL	1106	000106-28-5	93
			E,E FARNESYL ACETATE	746	004128-17-0	83
94	44.567	5.25	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			BENZYL-BENZOATE	300	000120-51-4	95
			ALLYL BENZOATE	2798	000583-04-0	22
			PARA XYLENE	2089	000106-42-3	9
95	46.267	0.14	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			TETRADECANAL	77	000124-25-4	91
			(E)-2-TETRADECENE-1-OL	2213	022104-82-1	90
			TETRADECANAL	2070	000124-25-4	90
96	46.761	0.46	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			E,E FARNESYL ACETATE	746	004128-17-0	99
			GERANYL ISOVALERATE	1394	000109-20-6	53
			FARNESOL (MELANGE ISOMERES)	373	000106-28-5	40
97	49.802	0.18	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L			
			ACIDE HEXADECANOIQUE (PALMITIC	343	000057-10-3	99
			ACIDE TETRADECANOIQUE (MYRISTIC	342	000544-63-8	47
			)			

Library Search Report

Data Path : C:\msdchem\1\data\2014.muestras\
Data File : limon 012314.D
Acq On : 24 Jan 2014 17:08
Operator :
Sample : limon 012314
Misc :
ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\YO...VING RESEARCH.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L Minimum Quality: 70
C:\Database\W9N08.L

Unknown Spectrum: Apex
Integration Events: RTE Integrator - rteint.p

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			ACIDE DODECANOIQUE (LAURIC)	345	000143-07-7	47
98	53.666	0.15	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L PHYTOL	444	000150-86-7	74
			ISOPHYTOL	445	000505-32-8	35
			DIPENTYL SULFITE	2726	100029-99-0	16
99	56.207	0.08	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L DOCOSANE (C22)	393	000629-97-0	99
			EICOSANE (PARAFFINE C20)	387	000112-95-8	98
			PENTACOSANE	22	000629-99-2	93
100	58.096	0.10	C:\Database\YOUNGLIVING RESEARCH.L EICOSANE (PARAFFINE C20)	387	000112-95-8	96
			DOCOSANE (C22)	393	000629-97-0	80
			HEXACOSANE	23	000630-01-3	78

