



Universidad de San Carlos de Guatemala
Facultad de Ingeniería
Escuela de Ingeniería Química

**CARACTERIZACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE LA CURVA DE SOLUBILIDAD EN EL
EQUILIBRIO TERNARIO, ACEITE ESENCIAL DE MANDARINA, AGUA Y ETANOL**

Christian Daniel Estrada Santizo
Asesorado por el Ing. César Ariel Villela Rodas

Guatemala, noviembre de 2019

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA



FACULTAD DE INGENIERÍA

**CARACTERIZACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE LA CURVA DE SOLUBILIDAD EN EL
EQUILIBRIO TERNARIO, ACEITE ESENCIAL DE MANDARINA, AGUA Y ETANOL**

TRABAJO DE GRADUACIÓN

PRESENTADO A LA JUNTA DIRECTIVA DE LA
FACULTAD DE INGENIERÍA
POR

CHRISTIAN DANIEL ESTRADA SANTIZO
ASESORADO POR EL ING. CÉSAR ARIEL VILLELA RODAS

AL CONFERÍRSELE EL TÍTULO DE

INGENIERO QUÍMICO

GUATEMALA, NOVIEMBRE DE 2019

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
FACULTAD DE INGENIERÍA



NÓMINA DE JUNTA DIRECTIVA

DECANA	Inga. Aurelia Anabela Cordova Estrada
VOCAL I	Ing. José Francisco Gómez Rivera
VOCAL II	Ing. Mario Renato Escobedo Martínez
VOCAL III	Ing. José Milton de León Bran
VOCAL IV	Br. Luis Diego Aguilar Ralón
VOCAL V	Br. Christian Daniel Estrada Santizo
SECRETARIO	Ing. Hugo Humberto Rivera Pérez

TRIBUNAL QUE PRACTICÓ EL EXAMEN GENERAL PRIVADO

DECANA	Inga. Aurelia Anabela Cordova Estrada
EXAMINADOR	Ing. Jorge Rodolfo García Carrera
EXAMINADORA	Inga. Dinna Lissette Estrada Moreira de Rossal
EXAMINADOR	Ing. Manuel Gilberto Galván Estrada
SECRETARIO	Ing. Hugo Humberto Rivera Pérez

HONORABLE TRIBUNAL EXAMINADOR

En cumplimiento con los preceptos que establece la ley de la Universidad de San Carlos de Guatemala, presento a su consideración mi trabajo de graduación titulado:

CARACTERIZACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE LA CURVA DE SOLUBILIDAD EN EL EQUILIBRIO TERNARIO, ACEITE ESENCIAL DE MANDARINA, AGUA Y ETANOL

Tema que me fuera asignado por la Dirección de la Escuela de Ingeniería Química, con fecha 15 de febrero de 2019.



Christian Daniel Estrada Santizo

Guatemala, noviembre de 2019

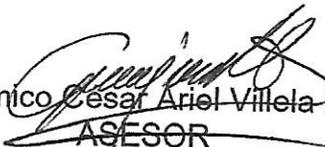
Ingeniero
WILLIAMS GUILLERMO ALVAREZ MEJIA
Director de Escuela de Ingeniería Química
Facultad de Ingeniería
Universidad de San Carlos de Guatemala
Presente

Ingeniero Álvarez:

Por medio de la presente **HAGO CONSTAR** que he revisado y aprobado el Informe final del Trabajo de Graduación titulado "**CARACTERIZACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE LA CURVA DE SOLUBILIDAD EN EL EQUILIBRIO TERNARIO, ACEITE ESENCIAL DE MANDARINA, AGUA Y ETANOL**" de la estudiante de Ingeniería Química **Christian Daniel Estrada Santizo**, identificado con el código único de identificación (CUI) **3158 04084 0902** y número de registro académico **201503926**.

Sin otro particular me suscribo a usted.

Atentamente,


Ing. Químico César Ariel Villela Rodas
ASESOR
Colegiado No. 1,175

Ing. César Ariel Villela Rodas
INGENIERO QUIMICO
Colegiado No. 1,175



Guatemala, 05 de noviembre de 2019.
Ref. EIQ.TG-IF.044.2019.

Ingeniero
Williams Guillermo Álvarez Mejía
DIRECTOR
Escuela de Ingeniería Química
Facultad de Ingeniería

Estimado Ingeniero Álvarez:

Como consta en el registro de evaluación, correlativo **033-2018**, le informo que reunidos los Miembros de la Terna nombrada por la Escuela de Ingeniería Química, se practicó la revisión del:

INFORME FINAL

Solicitado por el estudiante universitario: **Christian Daniel Estrada Santizo**.
Identificado con número de carné: **3158040840902**.
Identificado con registro académico: **201503926**.
Previo a optar al título de la carrera: **Ingeniería Química**.
En la modalidad: **Informe Final, Seminario de Investigación**.

Siguiendo los procedimientos de revisión interna de la Escuela de Ingeniería Química, los Miembros de la Terna han procedido a **APROBARLO** con el siguiente título:

CARACTERIZACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE LA CURVA SOLUBILIDAD EN EL EQUILIBRIO TERNARIO, ACEITE ESENCIAL DE MANDARINA, AGUA Y ETANOL

El Trabajo de Graduación ha sido asesorado por:

César Ariel Villela Rodas, profesional de la Ingeniería Química

Habiendo encontrado el referido trabajo de graduación **SATISFACTORIO**, se autoriza al estudiante, proceder con los trámites requeridos de acuerdo a las normas y procedimientos establecidos por la Facultad para su autorización e impresión.



"ID Y ENSEÑAD A TODOS"

Ingrid Lorena Benitez Pacheco
Profesional de la Química
COORDINADOR DE TERNA
Tribunal de Revisión
Trabajo de Graduación



C.c.: archivo



ACAAI

Agencia Certificadora de Acreditación
Organismo de Acreditación





Ref.EIQ.TG.073.2019

El Director de la Escuela de Ingeniería Química de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer el dictamen del Asesor y de los Miembros del Tribunal nombrado por la Escuela de Ingeniería Química para revisar el Informe del Trabajo de Graduación, de la carrera de Ingeniería Química, del estudiante, **CHRISTIAN DANIEL ESTRADA SANTIZO** titulado: **"CARACTERIZACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE LA CURVA DE SOLUBILIDAD EN EL EQUILIBRIO TERNARIO, ACEITE ESENCIAL DE MANDARINA, AGUA Y ETANOL"**. Procede a la autorización del mismo, ya que reúne el rigor, la secuencia, la pertinencia y la coherencia metodológica requerida.

"Id y Enseñad a Todos"



Ing. Williams G. Álvarez Mejía; M.I.Q., M.U.I.E
DIRECTOR
Escuela de Ingeniería Química

Guatemala, noviembre de 2019

Cc: Archivo
WGAM/ale



La Decana de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer la aprobación por parte del Director de la Escuela de Ingeniería Química, al trabajo de graduación titulado: **CARACTERIZACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE LA CURVA DE SOLUBILIDAD EN EL EQUILIBRIO TERNARIO, ACEITE ESENCIAL DE MANDARINA, AGUA Y ETANOL**, presentado por el estudiante universitario: **Christian Daniel Estrada Santizo** y después de haber culminado las revisiones previas bajo la responsabilidad de las instancias correspondientes, se autoriza la impresión del mismo.

IMPRÍMASE.


Inga. Aurelia Anabela Cordova Estrada
Decana



Guatemala, Noviembre de 2019

AACE/asga
cc

ACTO QUE DEDICO A:

- Dios** Por darme la vida, por los dones que me ha dado, por regalarme una familia bendecida.
- Mis padres** Erasmo Estrada y Rosita Santizo, por ser los mejores referentes que pude tener en mi vida, por llenarme de amor, consejos e inspiración y enseñarme que no hay meta que no se pueda alcanzar.
- Mis hermanos** Erasmo y Alejandra Estrada e Ivan de León, por estar siempre para mí, por ser influyentes en mi vida, darme ánimos cuando los necesito y ser los mejores acompañantes de esta vida.
- Mi consejera** Marleny Álvarez, por acompañarme en esta última etapa de la carrera, su amor incondicional, su apoyo, siempre estar para mí y cruzarse en mi camino.
- Mi ESIQ 2018** Mauricio Orantes, José Morales, Heidy Ramírez, Marleny Álvarez, Julio y Henry Marroquín, por la inolvidable experiencia compartida, la motivación adquirida y por realizar el primer proyecto.

Mis amigos

Por todos aquellos que pude conocer durante la carrera universitaria, por todos los buenos momentos y por siempre compartir conmigo.

Mis compañeros de carrera

Por la oportunidad de avanzar, de compartir conocimientos y por darme su apoyo; especialmente, a William Reyes, Ana Valdes, Leslie Velásquez, Diego Aguilar, Luisa Droegue, Tiffany Oroxon, Sergio Velásquez, André Hernández, Jeffrey Hipp, Pablo González, Carlos Samayoa y a todas las demás personas con quienes hemos compartido cursos.

Departamento de Matemáticas

Al ingeniero Samayoa, a todos aquellos que formaron parte de este excelente lugar; especialmente, a Julio Marroquín, José Sic, Manuel García, Pedro Chamalé, Alejandro Castañeda, María José Alburez, Kevin Duarte, Erick Mendoza, B'alam Lol, José Castillo y a todas las demás personas del departamento; por darme un segundo hogar, por enseñarme que siempre hay personas a tu lado.

Mis docentes

Por compartir sus conocimientos, por motivarme siempre a dar lo mejor y ser parte fundamental de la persona que hoy soy.

AGRADECIMIENTOS A:

Dios	Por ser mi fuente de vida, por cuidarme y guiarme en cada paso que doy.
Mi núcleo familiar	Porque son las mejores personas con las que pude encontrarme en este sueño que es la vida.
Universidad de San Carlos de Guatemala	Por ser mi casa de estudios, por brindarme las herramientas para crecer profesionalmente.
Facultad de Ingeniería	Por todo lo aprendido, por la oportunidad de formar parte de ella y ser egresado de esta unidad académica.
Área de Físicoquímica	Por apoyarme y abrirme sus puertas para desarrollar este estudio experimental, en especial a la Inga. Rufina Herrera.
Mi asesor	Ingeniero César Villela, por haber sido un gran apoyo en este diseño experimental; por ayudarme y aconsejarme durante la carrera.
Mi revisora	Licenciada Ingrid Benítez, por su compromiso, ayuda y compartir sus conocimientos conmigo.

ÍNDICE GENERAL

LISTA DE SÍMBOLOS	XI
GLOSARIO	XIII
RESUMEN.....	XVII
OBJETIVOS.....	XIX
HIPÓTESIS.....	XXI
INTRODUCCIÓN	XXIII
1. ANTECEDENTES	1
2. MARCO TEÓRICO.....	5
2.1. Solubilidad.....	5
2.1.1. Fuerzas intermoleculares	6
2.1.1.1. Sustancia polar	6
2.1.1.2. Sustancia no polar	6
2.1.2. Factores que afectan la solubilidad	7
2.1.2.1. Temperatura	7
2.1.2.2. Presión	8
2.1.2.3. Naturaleza de los componentes	8
2.1.2.4. Mezclado	9
2.1.2.4.1. Factores mecánicos	9
2.1.2.4.2. Por convección.....	10
2.1.2.4.3. Por vaporización.....	11
2.1.3. Extracción líquido – líquido.....	11
2.2. Diagrama ternario.....	13
2.2.1. Líneas de enlace	15

	2.2.1.1.	Por medio de titulación.....	16
	2.2.1.2.	Por medio de absorbancia.....	17
	2.2.2.	Punto de pliegue	17
	2.2.3.	Coeficiente de reparto	18
	2.2.3.1.	Factores que afectan el coeficiente de reparto.....	19
	2.2.3.1.1.	Temperatura o presión	20
	2.2.3.1.2.	Agregar componentes de la mezcla ternaria	20
2.3.		Cromatografía	21
	2.3.1.	Cromatografía gaseosa acoplada, espectrometría de masas (GC-MS).....	21
2.4.		Aceite esencial de mandarina	22
	2.4.1.	Extracción.....	23
	2.4.2.	Beneficios del aceite esencial de mandarina.....	24
	2.4.3.	Composición química	25
	2.4.4.	Propiedades del aceite esencial de mandarina	26
	2.4.5.	Principios activos.....	27
	2.4.5.1.	Limoneno-D.....	27
	2.4.5.2.	Gamma terpineno.....	28
3.		DISEÑO METODOLÓGICO.....	29
	3.1.	Localización	29
	3.2.	Variables	29
	3.2.1.	Variables dependientes	29
	3.2.2.	Variables independientes	30
	3.3.	Delimitación del campo de estudio.....	30
	3.4.	Diseño experimental.....	30

3.5.	Recurso humano disponible	32
3.6.	Recurso material disponible	32
3.6.1.	Materia prima.....	32
3.6.2.	Reactivos	32
3.6.3.	Cristalería	32
3.6.4.	Equipo	33
3.6.5.	Materiales auxiliares	33
3.7.	Técnica cuantitativa	34
3.8.	Procedimiento.....	34
3.8.1.	Curva de solubilidad del equilibrio ternario	34
3.8.2.	Obtención de las muestras para las líneas de enlace	36
3.8.3.	Obtención de los puntos de inicio en el eje inferior binario	38
3.9.	Diseño de tratamientos.....	41
3.10.	Recolección y ordenamiento de información	43
3.11.	Tabulación, ordenamiento y procesamiento de la información	45
3.12.	Análisis estadístico	56
4.	RESULTADOS	67
5.	INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS.....	73
	CONCLUSIONES	81
	RECOMENDACIONES.....	83
	BIBLIOGRAFÍA.....	85
	APÉNDICES	87
	ANEXOS	121

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

FIGURAS

1.	Proceso de extracción líquido – líquido.....	13
2.	Diagrama ternario.....	14
3.	Líneas de enlace.....	16
4.	Punto de pliegue	18
5.	Aceite esencial de mandarina	22
6.	Destilación por arrastre de vapor	24
7.	Composición del aceite esencial de mandarina	25
8.	Propiedades del aceite esencial de mandarina.....	26
9.	Estructura química del limoneno	27
10.	Estructura química del terpineno.....	28
11.	Diagrama de diseño experimental.....	31
12.	Diagrama de flujo para la realización de la curva de solubilidad del equilibrio ternario.....	36
13.	Diagrama de flujo de la obtención de las muestras para las líneas de enlace.....	38
14.	Diagrama de flujo de la obtención de las muestras para las líneas	40
15.	Clasificación de tratamientos	42
16.	Determinación del punto de pliegue por método gráfico	55
17.	Región crítica de la cantidad de masa agregada de etanol respecto a la solución binaria.....	58
18.	Relación lineal de la fracción másica de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad, respecto a la fracción másica de etanol de la fase acuosa	59

19.	Relación lineal de la fracción másica de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad, respecto a la fracción másica de etanol de la fase orgánica.....	60
20.	Relación lineal de los valores de la masa de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad respecto a la cantidad de masa en el etanol en la fase acuosa	61
21.	Relación lineal de los valores de la masa de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad respecto a la cantidad de masa en el etanol en la fase orgánica	62
22.	Relación lineal de los valores de la concentración molar de etanol en la fase acuosa respecto a la concentración molar de etanol en la fase orgánica	63
23.	Curva de solubilidad del equilibrio ternario de aceite esencial de mandarina, agua y etanol	68
24.	Curva de solubilidad del equilibrio ternario del aceite esencial de mandarina, agua y etanol con las líneas de enlace	70
25.	Coeficiente de reparto en función de la fracción másica del etanol inicial en la región debajo del domo.....	71
26.	Modelo matemático del coeficiente de reparto en función de la fracción másica inicial del etanol en los puntos debajo del domo	72

TABLAS

I.	Cantidad en masa de los componentes de la curva de solubilidad del equilibrio ternario.....	43
II.	Cantidad en masa de los componentes para los puntos iniciales del eje inferior del diagrama ternario	44
III.	Cantidad en masa de los componentes para la obtención de las líneas de enlace.....	44

IV.	Concentraciones obtenidas de las cuatro fases acuosas de los puntos en la región debajo de la curva de solubilidad.....	44
V.	Cantidad de masa total de la fase acuosa, cantidad de volumen total de la fase orgánica y cantidad total de volumen de la fase acuosa	45
VI.	Composición másica de la primera corrida de la solución binaria antes de formar la curva de solubilidad del equilibrio ternario y fracción real de aceite esencial de mandarina	46
VII.	Composición másica de la segunda corrida de la solución binaria antes de formar la curva de solubilidad del equilibrio ternario y fracción real de aceite esencial de mandarina	46
VIII.	Composición másica de la tercera corrida de la solución binaria antes de formar la curva de solubilidad del equilibrio ternario y fracción real de aceite esencial de mandarina	47
IX.	Cantidad másica de la primera corrida de cada componente en la solución ternaria que forma la curva de solubilidad del equilibrio ternario	47
X.	Fracciones másicas de la primera corrida de cada componente en la solución ternaria que forma la curva de solubilidad del equilibrio ternario	48
XI.	Cantidad másica de la segunda corrida de cada componente en la solución ternaria que forma la curva de solubilidad del equilibrio ternario	48
XII.	Fracciones másicas de la segunda corrida de cada componente en la solución ternaria que forma la curva de solubilidad del equilibrio ternario	49
XIII.	Cantidad másica de la tercera corrida de cada componente en la solución ternaria que forma la curva de solubilidad del equilibrio ternario	49

XIV.	Fracciones másicas de la tercera corrida de cada componente en la solución ternaria que forma la curva de solubilidad del equilibrio ternario	50
XV.	Promedio y desviación estándar de cada fracción másica del aceite esencial de mandarina en la obtención de la curva de solubilidad del equilibrio ternario.....	50
XVI.	Promedio y desviación estándar de cada fracción másica del agua en la obtención de la curva de solubilidad del equilibrio ternario	51
XVII.	Promedio y desviación estándar de cada fracción másica del etanol en la obtención de la curva de solubilidad del equilibrio ternario	51
XVIII.	Fracciones másicas del aceite esencial de mandarina y el agua del eje binario de la parte inferior del domo.....	52
XIX.	Fracciones másicas promedios con su respectiva desviación estándar del aceite esencial de mandarina y el agua del eje binario de la parte inferior del domo	52
XX.	Cantidad másica de los tres componentes de los cuatro puntos ubicados en la región de inmiscibilidad de la curva de solubilidad	53
XXI.	Fracción másica de los tres componentes de los cuatro puntos ubicados en la región de inmiscibilidad de la curva de solubilidad	53
XXII.	Cantidad de masa de la fase acuosa de los cuatro puntos ubicados en la región de inmiscibilidad de la curva de solubilidad.....	53
XXIII.	Composición de la fracción másica de la fase acuosa de los cuatro puntos ubicados en la región de inmiscibilidad de la curva de solubilidad.....	54
XXIV.	Cantidad másica de la fase orgánica de los cuatro puntos ubicados en la región de inmiscibilidad de la curva de solubilidad.....	54
XXV.	Composición de la fracción másica de la fase orgánica de los cuatro puntos ubicados en la región de inmiscibilidad de la curva de solubilidad.....	54

XXVI.	Concentración molar del etanol en las cuatro fases acuosas	55
XXVII.	Concentración molar del etanol en las cuatro fases orgánicas	55
XXVIII.	Coeficiente de reparto para los 4 puntos ubicados en la región de inmiscibilidad de la curva de solubilidad.....	56
XXIX.	Información para el análisis estadístico de la cantidad de masa agregada de etanol respecto a la solución binaria	57
XXX.	Anova de la cantidad de masa agregada de etanol respecto a la solución binaria	57
XXXI.	Información de los valores la fracción másica de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad, respecto a la fracción másica de etanol de la fase acuosa	58
XXXII.	Información de los valores la fracción másica de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad, respecto a la fracción másica de etanol de la fase orgánica	59
XXXIII.	Información de los valores de la masa de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad respecto a la cantidad de masa en el etanol en la fase acuosa	60
XXXIV.	Información de los valores de la masa de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad respecto a la cantidad de masa en el etanol en la fase orgánica	61
XXXV.	Información de los valores de la concentración molar de etanol en la fase acuosa respecto a la concentración molar de etanol en la fase orgánica.....	62
XXXVI.	Resumen de Anova.....	64
XXXVII.	Resumen del análisis de la dependencia lineal.....	65
XXXVIII.	Valores promedio de las fracciones másicas de los nueve puntos de la curva de solubilidad de cada componente	67
XXXIX.	Valores de las desviaciones estándar de los nueve puntos de la curva de solubilidad de cada componente	68

XL.	Fracciones másicas de las fases acuosas que forman las líneas de enlace	69
XLI.	Fracciones másicas de las fases orgánicas que forman las líneas de enlace	69
XLII.	Coeficiente de reparto en función de los puntos debajo del domo	70
XLIII.	Fracción másica de cada componente del punto de pliegue	71
XLIV.	Coeficiente de reparto en función de la fracción másica inicial del etanol en los puntos debajo del domo	71
XLV.	Prueba de hipótesis por análisis de varianza (Anova) de un solo factor	72
XLVI.	Prueba de hipótesis por dependencia lineal	72

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Significado
R	Coeficiente de correlación
K	Coeficiente de reparto
$M_{C,f,ac}$	Concentración molar de etanol en fase acuosa
$M_{C,f,or}$	Concentración molar de etanol en fase orgánica
<i>s</i>	Desviación estándar
F	Factor de Fisher
$X_{A,III}$	Fracción másica del aceite esencial de mandarina en el punto de pliegue
$X_{A,f,or}$	Fracción másica de aceite esencial de mandarina en la fase orgánica
$X_{A,\pi}$	Fracción másica del aceite esencial de mandarina en solución binaria
$X_{B,III}$	Fracción másica del agua en el punto de pliegue
$X_{B,f,ac}$	Fracción másica de agua en la fase acuosa
$X_{B,\pi}$	Fracción másica del agua en solución binaria
X_i	Fracción másica del compuesto i en solución ternaria
$X_{c,III}$	Fracción másica del etanol de mandarina en el punto de pliegue
$X_{C,f,or}$	Fracción másica de etanol en fase acuosa
$X_{C,f,or}$	Fracción másica de etanol en fase orgánica
$X_{i,III}$	Fracción másica del i-enésimo compuesto de la solución ternaria
g	Gramo

L	Litro
m_A	Masa de aceite esencial de mandarina
M_{A,f,or}	Masa de aceite esencial de mandarina en la fase orgánica
m_B	Masa de agua
m_{f,ac}	Masa de agua en la fase acuosa
m_{i,LE}	Masa del compuesto i en la línea de enlace
m_i	Masa del componente
m_c	Masa de etanol
m_{C,f,ac}	Masa de etanol en fase acuosa (g)
m_{C,f,or}	Masa de etanol en fase orgánica (g)
m_{f,ac}	Masa de la fase acuosa (g)
m_{f,or}	Masa de la fase orgánica (g)
m_T	Masa total
m_{C,T,III,LE}	Masa total de etanol en la solución ternaria en línea de enlace
m_{T,I}	Masa total de la solución binaria
m_{T,III}	Masa total de la solución ternaria
>	Mayor que
\bar{x}	Media
<	Menor que
mL	Mililitro
n	Moles
No	Número
PM_C	Peso molecular de etanol
%(P/V)_{C,f,ac}	Porcentaje P/V del etanol en la fase acuosa
V_{f,ac}	Volumen de la fase acuosa
V_{f,or}	Volumen de la fase orgánica

GLOSARIO

Aceite esencial de mandarina	Componente principal del estudio de la curva de solubilidad del equilibrio ternario; es obtenido por medio de extracción de la mandarina; es oleoso y de color naranja, es miscible en etanol e inmiscible en agua.
Agua desmineralizada	Componente del equilibrio ternario, es agua con ausencia de sales y minerales.
Componente	Es una sustancia o un compuesto químico que puede formar parte de una solución; si es una solución binaria, significa que está formado por dos componentes.
Concentración	Proporción o razón de una cantidad de un componente entre la solución, generalmente se usa la concentración másica, concentración molar, concentración molar, entre otras.
Cromatografía	Método físico que permite identificar y determinar la cantidad de dichos componentes en una solución por medio de la retención selectiva.

Curva de solubilidad	Método gráfico cuyas líneas representan la concentración mínima donde una solución es miscible con todos sus componentes.
Diagrama ternario	Representación gráfica de tres ejes simétricos, mediante el diagrama ternario se puede leer la concentración de cada componente con un punto dado.
Ejes del diagrama	Es una línea que forma el contorno del diagrama del equilibrio ternario, cada eje representa un equilibrio binario de dos componentes de la mezcla; estos componentes son los extremos del eje y se puede leer la concentración que se utilice de 0 a 1.
Etanol	Componente del equilibrio ternario, incoloro, inflamable, con olor característico del compuesto, es obtenido por destilación de productos fermentados.
Extracción	Operación unitaria cuyo propósito es obtener un determinado elemento de un sistema dado o aumentar su concentración de un compuesto en una solución dada.
Fase acuosa	Fase obtenida de una solución cuya concentración se encuentra en la región debajo de la curva de solubilidad del equilibrio ternario, cuyo solvente es agua.

Fase orgánica	Fase obtenida de una solución cuya concentración se encuentra en la región debajo de la curva de solubilidad del equilibrio ternario, cuyo solvente es un compuesto orgánico.
Fracción másica	Cantidad adimensional que representa la razón de la cantidad en masa de un componente entre la cantidad en masa de la solución total.
Líneas de enlace	Líneas que representan la tendencia de la fase orgánica y de la fase acuosa de cada punto en la región debajo de la curva de solubilidad del equilibrio ternario que representa inmiscibilidad.
Punto de pliegue	Punto gráfico de la curva de solubilidad del equilibrio ternario donde tienden las líneas de enlace; en este punto, la fase orgánica y la fase acuosa tienen concentraciones iguales del agente extractor.
Punto en el diagrama	Elemento gráfico en la curva de solubilidad del equilibrio ternario, cuya lectura por medio de los ejes se determina la concentración de la solución de cada componente.
Región de la curva de solubilidad	Sector de la gráfica de la curva de solubilidad del equilibrio ternario, donde estar arriba de esta significa miscibilidad, justo en la línea representa equilibrio ternario de solubilidad y por debajo representa inmiscibilidad de las mezclas.

Solubilidad	Propiedad de los componentes que indica la capacidad de mezclarse o disolverse en otro componente.
Solución	Mezcla de uno o más componentes en otro componente con mayor proporción.
Solución inmiscible	Indica que los componentes no se pueden mezclar entre sí.
Solución miscible	Indica que los componentes se pueden mezclar entre sí, parcialmente o totalmente.
Solución pura	Mezcla formada solo por un componente sin arrastres o contaminaciones, cuya concentración es de 100 %.
Soluto	Componente de una solución en menor proporción.
Solvente	Componente de una solución en mayor proporción.

RESUMEN

En el presente estudio se evaluará el equilibrio de solubilidad en un sistema ternario de aceite esencial de mandarina, etanol, y agua en el cual se utilizó una técnica de cromatografía de gases para determinar la cantidad de etanol en la fase acuosa, a temperatura y presión constante, igual a las condiciones atmosféricas.

Se obtuvo la curva de solubilidad para el equilibrio ternario de aceite esencial de mandarina, etanol, y agua, las líneas de enlace de 3 puntos y el punto de pliegue. Para obtener las líneas de enlace se hizo una solución a una fracción molar constante de aceite esencial de mandarina para luego tener una mezcla inmiscible, con dos fases denominadas acuosa y orgánica, donde se obtiene la concentración del etanol, mediante cromatografía de gases de la fase acuosa.

Se estableció que la fracción másica del aceite esencial de mandarina, agua y etanol, del punto de pliegue es de 0,14, 0,15 y 0,71, respectivamente. Además, se determinó que el coeficiente de reparto es de: 0,471, 0,703 y 0,699, para un valor de fracción másica del etanol en la composición inicial de: 0,099, 0,198 y 0,292, y su modelo matemático se delimita igual a $K_a = 12,246(X_{C,III,LE})^2 + 5,959(X_{C,III,LE}) + 0,03$, en un rango de validez de 0,990 a 0,292.

OBJETIVOS

General

Caracterizar el comportamiento de la curva de solubilidad del sistema ternario aceite esencial de mandarina-agua-etanol, evaluando la miscibilidad de las mezclas realizadas con los tres componentes a distintas composiciones másicas.

Específicos

1. Obtener la curva de solubilidad del equilibrio ternario líquido-líquido para el sistema aceite esencial de mandarina-agua-etanol a temperatura y presión ambiental.
2. Determinar las líneas de enlace del sistema aceite esencial de mandarina-agua-etanol en la región de la curva de solubilidad temperatura y presión ambiental, mediante la cuantificación experimental del etanol en las fases, acuosa y orgánica.
3. Establecer la composición del punto de pliegue del sistema aceite esencial de mandarina-agua-etanol mediante un método gráfico.
4. Delimitar la relación del coeficiente de reparto del etanol en función de la fracción másica del etanol en la composición inicial en la región debajo del domo.

5. Definir el coeficiente de reparto del etanol entre las fases, acuosa y orgánica de los tres puntos seleccionados.

HIPÓTESIS

Hipótesis de trabajo:

Es factible caracterizar el comportamiento de la curva de solubilidad del sistema ternario aceite esencial de mandarina-agua-etanol utilizando una técnica de cromatografía de gases.

Hipótesis estadísticas:

A continuación, se presentan las hipótesis nulas y las hipótesis estadísticas.

Hipótesis nula:

H_{01} : no existe una diferencia significativa entre los valores agregados de masa agregada de etanol y la cantidad de masa de la mezcla agua-aceite esencial de mandarina.

H_{02} : no existe una dependencia lineal entre los valores de la fracción másica de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad, respecto a la fracción másica de etanol de la fase acuosa y respecto a la fracción másica de etanol de la fase orgánica.

H_{03} : no existe dependencia lineal entre los valores de la masa de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad respecto a la cantidad de masa en el etanol en la fase orgánica y fase acuosa.

Ho₄: no existe dependencia lineal de la concentración molar de etanol en la fase acuosa respecto a la concentración molar de etanol en la fase orgánica.

Hipótesis alternativas:

Ha₁: existe una diferencia significativa entre los valores agregados de masa agregada de etanol y la cantidad de masa de la mezcla agua-aceite esencial de mandarina.

Ha₂: existe una dependencia lineal entre los valores de la fracción másica de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad, respecto a la fracción másica de etanol de la fase acuosa y respecto a la fracción másica de etanol de la fase orgánica.

Ha₃: existe una dependencia lineal entre los valores de la masa de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad y la cantidad de masa en el etanol en la fase orgánica y fase acuosa.

Ha₄: existe dependencia lineal de la concentración molar de etanol en la fase acuosa respecto a la concentración molar de etanol en la fase orgánica.

INTRODUCCIÓN

Cada solución de dos o más componentes posee fuerzas intermoleculares, que ocasiona que los átomos de la sustancia interactúen entre sí; estas fuerzas dependen de la estructura de las moléculas de cada compuesto; si las moléculas al acomodarse muestran armonía en el espacio, se denomina que es un enlace no polar y si muestran un desacomodo representa un enlace polar.

Es por ello, que cuando se mezclan sustancias a nivel macro de diferente naturaleza (polar y no polar), las que poseen internamente un arreglo estructurado (no polares) no permiten el ingreso de las que no son homogéneas internamente en su distribución (polares); por lo tanto, este es un factor para que se da la inmiscibilidad en las sustancias de una mezcla, el agua es una sustancia polar y el aceite esencial de mandarina es una sustancia no polar, debido a esta consideración se determina que el agua y el aceite esencial de mandarina forma una solución binaria inmisible entre sus componentes.

En el estudio del equilibrio ternario se hace uso de un tercer componente (agente extractor), donde este agente extractor, en este caso etanol, debe ser miscible por separado de los otros componentes, para obtener una curva de solubilidad de miscibilidad de este con la mezcla binaria inmisible, esto es debido a que el etanol forma una afinidad entre los otros dos componentes, aceite esencial de mandarina y agua, para así formar una solución de una sola fase.

Se debe colocar el etanol en las soluciones inmiscibles de aceite esencial y agua, hasta formar una solución ternaria miscible. Las líneas de enlace representan la unión de los puntos que forman la fase acuosa y la fase orgánica de los puntos ubicados en la región debajo de la curva de solubilidad, además de indicar el comportamiento de forma gráfica; es decir, observar la pendiente obtenida de cada punto en la fase acuosa y fase orgánica; para ello se utilizó cromatografía de gases para la medición de etanol en la fase acuosa; además de conocer las cantidades en peso y volumen de cada fase para así determinar por balance de masa las demás cantidades de los demás componentes en cada fase. Al hacer las proyecciones de estas líneas de enlace, se obtiene un punto de intersección y reflejar una línea tangente de este punto de intersección al domo, el punto de tangencia se conoce como punto de pliegue.

Las composiciones del punto de pliegue representan un punto en la curva de solubilidad del equilibrio ternario de transición entre la región de inmiscibilidad parcial y la región de miscibilidad total, sin cambios de temperatura; donde si se tuviera una desviación y el punto se ubicará en la región de inmiscibilidad o debajo del domo se obtendrá una composición igual del agente extractor de la fase orgánica como de la fase acuosa.

El agente extractor en este caso el etanol puede tener una afinidad a mezclarse en mayor proporción con el agua (fase acuosa) o con el aceite esencial de mandarina (fase orgánica), con base en determinar esta afinidad nace el coeficiente de reparto, que establece con componente o con que fase el agente extractor prefiere mezclarse en una solución ternaria.

1. ANTECEDENTES

En la Universidad San Carlos de Guatemala se han realizado estudios acerca de equilibrios ternarios en fase acuosa, así como el estudio de isopropanol-biodiesel-agua y su aplicación para la extracción del isopropanol. Además, se han realizado estudios acerca de la medición de concentraciones en diferentes tipos de soluciones acuosas. Adicionalmente, se han realizado estudios acerca de la técnica de arrastre de vapor para la extracción de aceite esencial crudo de diferentes plantas, así como el de romero (*Rosmarinus Officinalis*) y citronela (*Cymbopogon Winteriana Jowitt*), estos estudios han sido realizados por parte de la Dirección General de Investigación (DIGI), el Fondo Nacional de Ciencia y Tecnología (FONACYT), el Centro de Investigaciones de Ingeniería (CII) y estudios de tesis de las facultades de Ingeniería y Farmacia.

En 2011, se realizó el estudio experimental para la obtención de datos a nivel de laboratorio del sistema ternario isopropanol-biodiesel-agua en equilibrio líquido-líquido, realizado por Wendy Lissette Serrano Mejía asesorado por el Ing. Qco. César Alfonso García Guerra. Esto se realizó por ser parte del estudio de tesis de la Escuela de Ingeniería Química. El estudio del sistema ternario se realizó a nivel laboratorio y su importancia radica en la determinación del contenido de agua necesario para lavar efectivamente el biodiesel. La determinación del equilibrio ternario se basó en la interpretación del contenido de soluto al equilibrio mediante técnicas de picnometría, refractometría y titulación.

También, se estudió el punto de pliegue obteniendo así que el punto de pliegue para el sistema ternario isopropanol-biodiesel-agua a la temperatura de

24±1 °C es de 54 % de isopropanol, 41 % de biodiesel y 5 % de agua. La afinidad del isopropanol es parecida a la del agua a bajos contenidos de concentración del isopropanol, así como con el biodiesel.

En 2005, se realizó el estudio, evaluación de un método experimental de generación de datos a nivel de laboratorio para el estudio del sistema ternario aceite esencial de terpenos del fruto de naranja (limoneno) – etanol – hexano, realizado por Marisol Amado Rodas asesorado por el Ing. Qco. César Alfonso García Guerra. Se realizó el estudio mediante la correlatividad de la variable respuesta por técnicas de cromatografía, picnometría y refractometría.

El punto de pliegue para el sistema ternario trabajado a temperatura de 25 ± 5 °C, el punto de pliegue experimental obtenido fue de 54 % de A.E. limoneno, 40 % etanol y 6 % hexano; además, se determinó que para las soluciones binarias A.E. limoneno-etanol existe una relación directamente proporcional con el índice de refracción; y que para las soluciones binarias A.E. limoneno-hexano existe una relación inversamente proporcional con el índice de refracción.

En 2010 se realizó el estudio acerca de diagnóstico de la aplicación de un sistema de gestión de calidad a través de la norma ISO/IEC 17025:2005, en el laboratorio de fisicoquímica, y la validación del ensayo *Determinación de la constante de disociación ácida del rojo de metilo*, realizado por Luis Rodolfo Castro García. Se determinó mediante la técnica de espectrofotometría

Se determinó que el método de ensayo utilizado para la determinación de la constante de disociación ácida del rojo de metilo, es válido en su procedimiento; también, como su robustez ante factores externos como

temperatura, humedad y tipo de reactivo. También, pudo determinarse que el método utilizado produce resultados precisos y exactos.

En 2003, se realizó el estudio evaluación de un método experimental de evaluación de un método experimental de generación de datos para el estudio del sistema ternario isopropanol-hexano-agua en equilibrio líquido de inmiscibilidad a tres temperaturas y a 640 mm de Hg, realizado por Marco Vinicio Pajarito Ángel. Se realizó el estudio mediante la correlatividad de la variable respuesta por técnicas de se midió la concentración del IPA a partir de los índices de refracción.

Donde se determinó que la ecuación y la gráfica de concentración contra índice de refracción para el sistema isopropanol en agua a temperatura de 10 +/-5 °C es de $Y = 0,0003 x^2 + 0,002 x + 1,313$, donde es el índice de refracción y x es el peso.

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Solubilidad

La solubilidad se da cuando una sustancia en menor cantidad en la solución, llamada soluto es capaz de mezclarse en otra sustancia en mayor cantidad llamada solvente. La cantidad de soluto presente en solvente debe expresarse en una cantidad de concentración, estas son: molaridad, fracción molar, fracción molal, ppm, entre otras; al momento de realizar una mezcla debe de tomar en cuenta las condiciones de temperatura y si existe un componente gaseoso, debe tomarse la presión.

Si en una disolución llega un punto donde ya no se puede agregar más soluto se dice que la disolución está saturada. Bajo ciertas condiciones la solubilidad puede sobrepasar ese máximo y pasa a denominarse solución sobresaturada. Por el contrario, si la disolución admite aún más soluto, se dice que se encuentra insaturada. Además que existen soluciones que se puede agregar un soluto sin llegar a saturarse, como es el caso de la mayoría de casos de los líquidos, se denomina solución infinita.

La forma de interacción entre las moléculas tiene una influencia al momento de hacer una solución, dependiendo de la naturaleza se pueden obtener mezclas inmiscibles o miscibles.

2.1.1. Fuerzas intermoleculares

Las moléculas en el espacio tienen un arreglo de acuerdo a la estructura espacial que estas tengan y que depende de la distribución de los átomos según los orbitales de los compuestos centrales; estas interacciones entre moleculares se denominan fuerzas intermoleculares, las cuales son determinantes en este estudio.

2.1.1.1. Sustancia polar

Una sustancia polar es aquella donde los átomos tienen una diferencia apreciable en sus electronegatividades; por lo tanto, un átomo tiene mayor fuerza de atracción ocasionando una atracción por el par de electrones que se comparte; obtiene una estructura espacial con preferencia de girar alrededor del átomo con mayor electronegatividad que el otro; entonces, en un enlace covalente donde se comparten desigualmente los átomos se denomina enlace covalente polar.

2.1.1.2. Sustancia no polar

Una sustancia no polar es aquella donde los átomos no tienen una diferencia apreciable en sus electronegatividades; por lo tanto, la atracción que genera el par de los átomos sobre el par de electrones que se comparte es igual; entonces, no existe ninguna deformación a la estructura espacial; en consecuencia en un enlace donde se comparte igualmente los átomos se denomina enlace covalente polar.

2.1.2. Factores que afectan la solubilidad

La solubilidad puede variar según las condiciones con la que se estén trabajando; al variar alguna de estas condiciones, puede aumentar la solubilidad; es decir, un volumen dado solvente acepte mayor cantidad de masa de soluto a la que originalmente estaba o que la solubilidad disminuye; es decir, un volumen dado solvente acepte menor cantidad de masa de soluto a la que originalmente. Los factores a considerar son los siguientes:

2.1.2.1. Temperatura

La temperatura tiene dos efectos directos en la solubilidad de una mezcla, los cuales son los siguientes:

La solubilidad en una parte es la interacción y movimiento entre el soluto y el solvente, y la temperatura en una parte representa el movimiento interno de las moléculas, es por eso que cuando existe un cambio de temperatura en una sustancia, esta sustancia tiene un cambio en su movimiento interno. Si la temperatura aumenta, genera un efecto de aumentar el movimiento interno de las moléculas que ocasiona que se tengan mayores interacciones entre sí y por eso la solubilidad aumenta. Si la temperatura disminuyera, tiene un efecto contrario, es decir, la solubilidad disminuye.

La solubilidad en parte depende de que tanto las moléculas del soluto puedan ingresar o romper las fuerzas intermoleculares que tenga las moléculas del solvente, la temperatura en parte representa energía; es decir, que a determinada temperatura representa una cantidad de energía (se aclara que la temperatura no es energía, más bien un indicador); entonces, al existir un aumento de la temperatura; el soluto cuenta con más energía para poder

romper las fuerzas intermoleculares y así poder diluirse una mayor cantidad en masa del soluto; entonces, al aumentar la temperatura genera un efecto de aumento de solubilidad y al disminuir la temperatura genera un efecto de disminución de solubilidad.

2.1.2.2. Presión

Hay que recordar que la presión es un escalar; es decir, que, si tiene magnitud, pero no tiene dirección, la presión es la fuerza que hace un sólido, o un líquido o un gas o cualquier elemento sobre una superficie, en los tres estados de la materia. La presión no tiene un efecto significativo en el estado sólido, la presión en el estado líquido tampoco es significativo; sin embargo, es de gran utilidad para el desplazamiento de estos y, finalmente, la presión si tiene un efecto significativo en el estado gaseoso, que dependerá de las condiciones del sistema, para cuantificar cuál es su efecto.

Entonces, los sistemas que involucren solamente sólidos o líquidos no es afectado por la presión; sin embargo, los sistemas que involucren a un elemento en estado gaseoso son afectados por la presión. El aumento de la presión en un gas ocasionará que las partículas de gas se acoplen en los espacios disponibles, se debe tener un límite de aumento de presión, este límite tiene que ver con el material que está cubriendo la solución. Entonces, un aumento de presión en gases genera un aumento de solubilidad y una disminución genera el efecto contrario.

2.1.2.3. Naturaleza de los componentes

Cada sustancia tiene un comportamiento propio, cuyo comportamiento es fundamental para la solubilidad que pueda tener, ya sea actuando como soluto

o solvente; cuando las condiciones del sistema no son modificadas, la solubilidad depende únicamente de ellos.

Los componentes de una solución generan un comportamiento único, cabe mencionar que el comportamiento de un compuesto x en una solución binaria es totalmente diferente al comportamiento del mismo compuesto x en una solución ternaria.

Cuando dos compuestos líquidos son totalmente miscibles, se denomina solvente el de mayor cantidad y soluto el de menor cantidad. Los componentes polares generalmente disuelven a los polares y los componentes apolares generalmente disuelven a los apolares.

Si se tiene un tamiz de tamaño mediano, en cada tamiz se coloca partícula pequeña, mediana y grande, el tamaño de partícula que se ha desplazado más es el pequeño; entonces, con base en eso, se determina que las sustancias de menor tamaño son más solubles que las de mayor tamaño.

2.1.2.4. Mezclado

La solubilidad tiene muchos conceptos, uno de ellos es la facilidad de que una sustancia puede ingresar o que tanto un soluto puede disolverse en un solvente. Mezclar es cuando una sustancia se logra combinar con otra, parcialmente o en su totalidad; se tienen dos factores de mezclado:

2.1.2.4.1. Factores mecánicos

Un factor mecánico es aquél que involucra conceptos físicos en movimiento, el más utilizado es el que involucra un mezclado en la solución

para ello se usa una aplicación de una fuerza mediante un material en la solución, el concepto es generar un movimiento de preferencia en espiral teniendo el cuidado para no generar zonas estáticas del fluido.

Al momento de generar un movimiento en el recipiente de la solución genera una mayor posibilidad a que los componentes de la solución se mezclen; sin embargo, cabe mencionar que cualquier factor mecánico no va a aumentar o disminuir la solubilidad de la solución, simplemente ocasiona que la solubilidad máxima permitida se alcance.

2.1.2.4.2. Por convección

Convección es un tipo de transferencia de calor, el cual es más efectivo en gases, una cantidad de materia en estado gaseoso si se puede imaginar que es un edificio de 5 niveles: en el primer nivel se tiene contacto una superficie a mayor temperatura del gas en general; entonces, al estar en contacto este gas del primer nivel aumenta su temperatura y generalmente los gases al aumentar su temperatura disminuye su densidad; entonces, por diferencia de densidad el gas caliente del nivel 1 sube hasta un nivel más alto, el gas caliente del nivel 1 tiene contacto con los gases de los otros niveles, (donde el nivel 2 es tiene mayor temperatura que el 3, y así sucesivamente); el gas al momento de subir cada nivel va disminuyendo su temperatura y cuando llegue al nivel más alto, ya alcanzó su temperatura inicial y por diferencia de densidad tiende a bajar y se repite el ciclo; entonces, la convección es un tipo de transferencia de calor que en su fenómeno mezcla los componentes en una solución.

2.1.2.4.3. Por vaporización

Cuando existe un cambio de fase de líquido a gaseoso el sistema debe estar sometido a una temperatura cercana a la de saturación; es decir, que es una temperatura considerablemente mayor, por ejemplo, si se tiene agua en estado líquido, la presión es 1 atm, y la temperatura ambiente es de 25 °C, es necesario elevar la temperatura hasta 100 °C para el agua cambie de fase. Cuando una sustancia en estado líquido cambia de fase a estado gaseoso, inicialmente se forman burbujas y éstas llegan a la superficie del líquido, en este caso pasan por una parte del sistema que genera turbulencia y a su vez genera que se mezclen la solución parcialmente. Cabe resaltar que el fin de una vaporización no es mezclarla solución, su fin es cambiar de estado líquido a gaseoso.

2.1.3. Extracción líquido – líquido

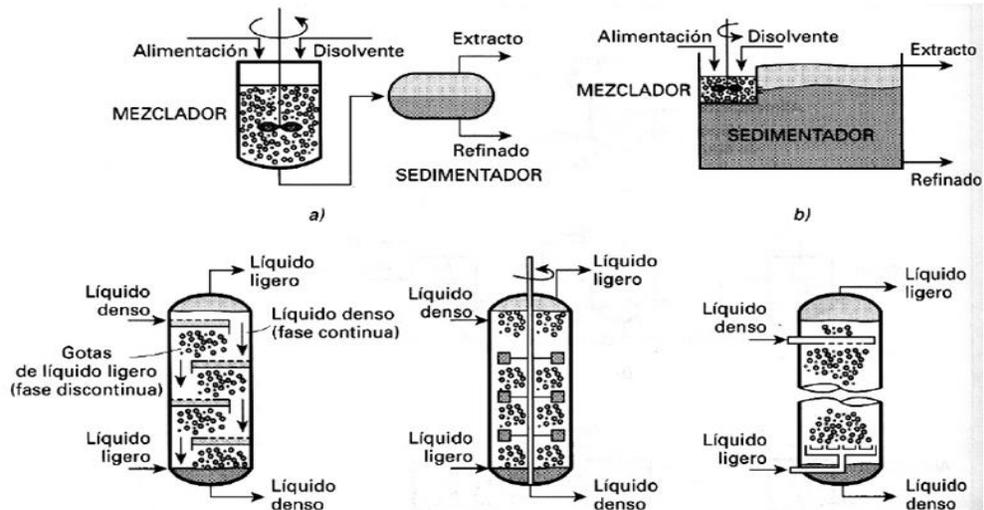
Una extracción es aquella operación unitaria cuyo fin es obtener un determinado elemento de un sistema dado o aumentar su concentración de un compuesto en una solución dada, esto se debe a que los materiales en la naturaleza no están puros; es decir, que están acompañados con otros elementos.

Un ejemplo de extracción básica es el alcohol, la obtención de este proviene de la fermentación de una fruta por un largo tiempo sin contacto al exterior para que se forme vino y este a su vez se destila para obtener una solución con mayor porcentaje inicial en alcohol que la que tiene el vino. Además, cabe resaltar que, por interacciones entre los compuestos, la estabilidad energética, entre otros factores es complicado obtener un componente puro, es decir, al 100 %.

En la naturaleza existen mezclas líquidas binarias que son totalmente miscibles, que poseen un punto de evaporación muy cercano; complica así la separación y que complica la obtención pura de este compuesto. Para lograr la obtención de un componente se debe realizar la agregación de un tercer compuesto miscible en el compuesto a extraer e inmisible en otro compuesto logrando así una separación entre los componentes y que logran así una fase acuosa y fase orgánica, donde el componente de interés está presente en la fase acuosa.

Para que la extracción tenga una mayor operabilidad, se deben trabajar con soluciones cuyos componentes sean de diferente naturaleza respecto a sus fuerzas intermoleculares, ocasionado la separación de la mezcla en una o dos fases. Para luego finalmente tener en una fase los compuestos de interés y por medio de una extracción por disolvente se usa como una opción a la separación por destilación o evaporación.

Figura 1. **Proceso de extracción líquido – líquido**



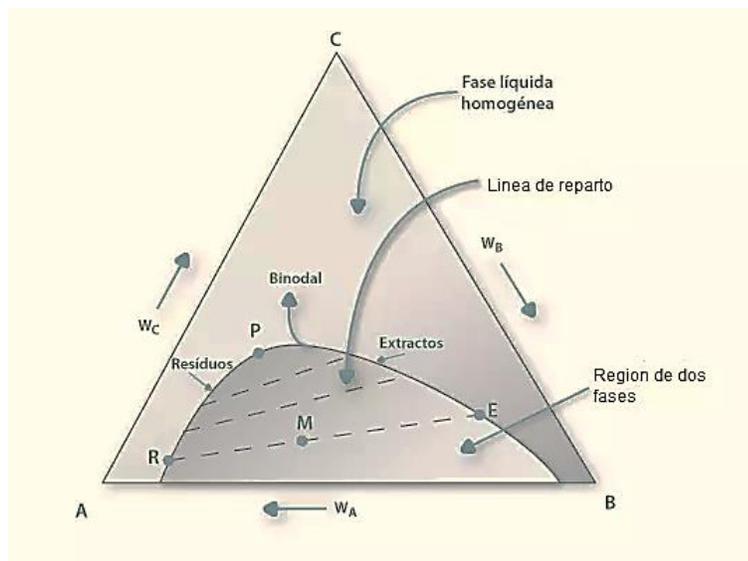
Fuente: *Proceso de extracción*. https://www.google.com/search?q=extracci%C3%B3n+l%C3%BAido+l%C3%BAido&rlz=1C1GCEA_enGT850GT850&sxsrf=ACYBGNTThwaKNpGenynQwyXABMDjEBq3pqA:1567986663382&source=Inms&tbnm=isch&sa=X&ved=0ahUKEwiA99TAtcLkAhUJvIkKHUvnCOsQ_AUIEigB&biw=1366&bih=657#imgrc=gDhlcSqH03UwuM: Consulta: 8 de septiembre de 2019.

2.2. Diagrama ternario

El diagrama ternario para el equilibrio de solubilidad para un sistema de tres componentes es la representación gráfica comúnmente conocido como domo o curva de solubilidad, este se realiza sobre un triángulo. Las composiciones, que pueden ser másicas, molares, volumétricas, se colocan en las intersecciones de los lados para la formación del triángulo. En el trazo de la curva de solubilidad se determina que los componentes, los dos inmiscible y el tercero miscible, también conocido como agente miscible, representa que a esas composiciones se obtiene una solución ternaria miscible en entre todos los componentes.

Según Van Ness, el diagrama ternario consta de tres áreas. La primera es la que se encuentra ubicada debajo de la línea de equilibrio, todas las composiciones que se encuentren en esta área, son soluciones que con el paso del tiempo van a formar dos fases dado que no se encuentran un equilibrio de solubilidad. La segunda es la línea que forma la curva de solubilidad, todas las líneas en este punto representan composiciones que actúan como una mezcla con miscibilidad total. La tercera es el área que se encuentra por arriba de la línea de la curva de solubilidad. Todas las soluciones que representen concentraciones en esta área indican una solución sobresaturada del agente extractor.

Figura 2. **Diagrama ternario**



Fuente: *Diagrama ternario*. <https://neetescuela.org/diagrama-de-equilibrio-ternario/> Consulta: 25 de septiembre de 2019.

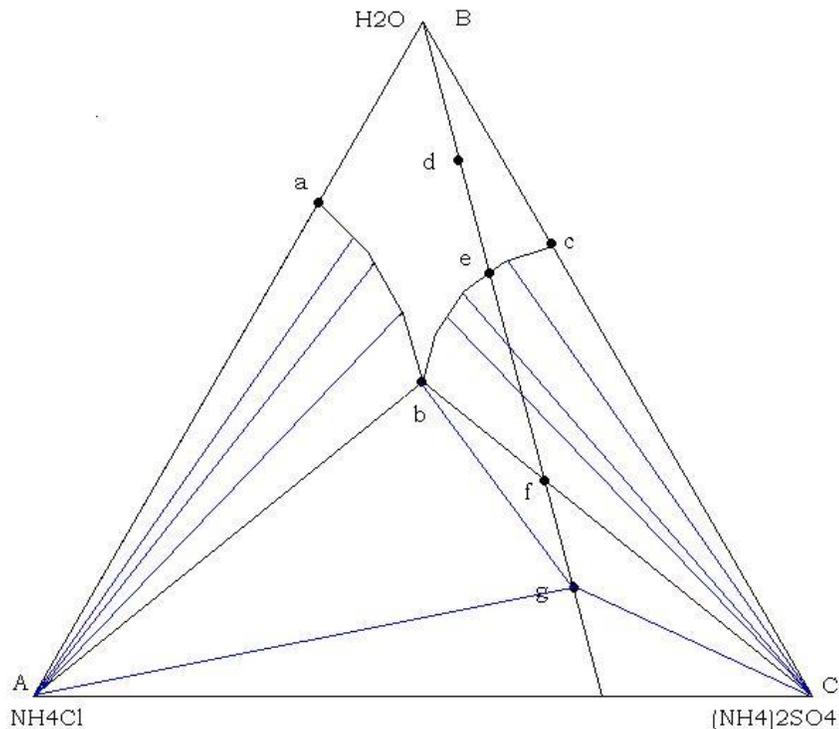
2.2.1. Líneas de enlace

Según Serrano, el área debajo de la línea de solubilidad representa que cualquier punto con esas composiciones, será una mezcla que formará dos fases: la acuosa, la que tiene mayor cantidad de agua; y la orgánica, la que tiene mayor cantidad de un solvente orgánico. donde cada una de estas fases tendrá una concentración que es equivalente a los extremos de la curva de equilibrio de solubilidad. Se le conoce como línea de enlace a la unión estos dos puntos mediante una línea recta, cabe resaltar que cada línea de enlace tiene una diferente pendiente, lo que si tienen en común es una tendencia; al graficar 3 o más puntos, se puede trazar la línea a un eje y encontrar la intersección de las líneas de enlace para determinar un punto en común de intersección, donde todas las líneas de enlace tienen que estar cercano a este punto.

Además, para conocer las cantidades de una fase, existen varios métodos: por medio de titulación, por absorbancia y por cromatografía de líquidos; este último es el que se utilizó en este diseño experimental, por ello se explicará con mayor detalle más adelante.

Al determinar la cantidad del componente extractor, se deben realizar balances de masa de la solución inicial total y de cada fase para determinar las demás composiciones de los demás componentes.

Figura 3. Líneas de enlace



Fuente: *Líneas de enlace*. https://www.google.com/search?rlz=1C1GCEA_enGT850GT850&biw=1366&bih=657&tbn=isch&sxsrf=ACYBGNT8jOcZ7kLtg3wiZkz3jdyCNSvDnA%3A1569430493929&sa=1&ei=3ZuLXeaLOMGC5wK0tITIAQ&q=lineas+de+enlace+diagrama+ternario&oq=lineas+de+enlace+diagrama+ternario&gs_l=img.3...2011.3934..4129...0.0..1.498.3187.2j12j1j2...0....1..gws-wiz-img.....0i30.gHC2UiLa36o&ved=0ahUKEwimiNyYuOzkAhVBwVkkHTQaARkQ4dUDCAc&uact=5#imgrc=DgIPFQphy22BEM: Consulta: 25 de septiembre de 2019.

2.2.1.1. Por medio de titulación

Para obtener un diagrama ternario, con el que se pueden obtener las líneas de distribución mediante titulación se debe cumplir con las siguientes características: agua, un solvente orgánico y un ácido de preferencia de nivel de disociación débil.

Al obtener la fase de interés con el ácido, se debe colocar un indicador ácido/base en la solución, preparar una solución monoprótica básica; es decir, que al momento de disociarse solo genere un hidroxilo (OH^{-1}) por cada molécula de base, con concentración molar conocida y luego agregar esta solución hasta cumplir con el indicador ácido/base y anotar el volumen desplazado, al realizar el producto del volumen desplazado de la solución básica por la concentración molar se obtienen la cantidad de moles del ácido y mediante su peso molecular se obtiene la cantidad de masa de dicho ácido en esa fase; luego, se determina la demás cantidades por balance de masa.

2.2.1.2. Por medio de absorbancia

Para obtener un diagrama ternario, con el cual se pueden obtener las líneas de distribución mediante uso de absorbancia se debe cumplir con las siguientes características: agua, solvente orgánico y aceite esencial que no sea una mezcla con color.

Inicialmente se debe determinar el índice de absorbancia del aceite esencial en el solvente orgánico. Al obtener la fase orgánica, se anota su peso y su volumen, de las líneas de distribución, se mide la absorbancia de la solución para así obtener la concentración del aceite esencial y al multiplicarse por su volumen se obtiene la cantidad de masa del aceite esencial y mediante balance se determinan las demás cantidades.

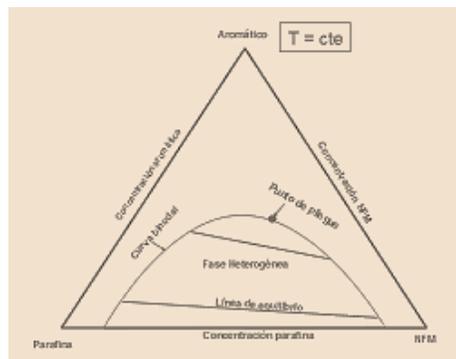
2.2.2. Punto de pliegue

El punto de pliegue, o punto crítico isotérmico, es el límite en la curva de solubilidad al cual las líneas de enlace tienden. En los sistemas ternarios líquido-líquido, en el cual, existe una muestra cuya composición sean debajo de

la curva de solubilidad, formará las dos fases, es decir, la fase acuosa y orgánica, en este punto de pliegue las composiciones de ambas fases son iguales.

Además, es el límite de extracción en el cual la mezcla ternaria se comporta como una solución homogénea, es la concentración máxima que se puede obtener de una solución miscible.

Figura 4. **Punto de pliegue**



Fuente: *Punto de pliegue.*

https://www.google.com/search?rlz=1C1GCEA_enGT850GT850&biw=1366bih=657&tbm=isch&sxsr=ACYBGNTQoN6dRkPAJPIY6vnmsgLZfXuag%3A15694309960&sa=1&ei=1J2LXabGM82r5wKMxqCAAw&q=punto+de+pliegue+diagrama+ternario&oq=punto+de+pliegue+diagrama+ternario&gs_l=img.3...428567.431138.431342...0.0..0.158.1579.15j2.....0....1..gws-wiz-mg.....0i7i5i30j0i8i7i30.qFZ2uekg5w&ved=0ahUKEwimgMSluu kAhXN1VvKkHQwjCDAQ4dUDCAc&uact=5#imgrc=v2v_SuV_uzsfZM: Consulta: 25 de septiembre de 2019.

2.2.3. Coeficiente de reparto

El equilibrio de un diagrama ternario es posible si existe dos sustancias inmiscibles entre sí; en este diseño experimental es el aceite esencial de

mandarina y agua; una tercera sustancia que es miscible en ambas, en este diseño experimental es el etanol,;entonces, al tener una solución ternaria en la región por debajo de la curva de solubilidad se obtendrán dos soluciones: una con mayor porcentaje de agua, es decir, la fase acuosa; y la otra con mayor porcentaje de aceite de mandarina, es decir, la fase orgánica.

En el etanol que es una sustancia miscible, se reparte en cada fase, con un método de inspección visual no se puede determinar a qué fase es más afín; debido a eso nace la variable de coeficiente de reparto, el cual está dado por la razón entre la concentración del agente miscible en la fase orgánica y la concentración del agente miscible en la fase acuosa.

Las dimensiones del coeficiente de reparto son adimensionales; de acuerdo al valor de K, se tiene el siguiente concepto:

- Si $K = 1$, la afinidad del agente miscible o extracción es igual en ambas fases.
- Si $K > 1$, la afinidad del agente miscible o extractor es mayor en la fase orgánica que en la fase acuosa.
- Si $K < 1$, la afinidad del agente miscible o extractor es mayor en la fase acuosa que en la fase orgánica.

2.2.3.1. Factores que afectan el coeficiente de reparto

El coeficiente de reparto por su concepto matemático es la razón entre dos concentraciones de un compuesto en diferentes fases; entonces, el coeficiente

de reparto está en función de las diferentes concentraciones; entonces, los factores que afecten a la concentración de un componente en una solución van a afectar al coeficiente de reparto.

2.2.3.1.1. Temperatura o presión

La concentración está en función de la masa del componente y el volumen de la solución, pero el volumen está en función de la temperatura y presión, donde generalmente a mayor temperatura el volumen aumenta; caso contrario de la presión, que a mayor presión el volumen disminuye. Hay que considerar que se tienen dos diferentes solventes: uno por la fase acuosa y el otro por la fase orgánica; donde cada comportamiento del volumen en función de la temperatura o presión es propio de cada solvente y, por eso, cada concentración tendrá su propio comportamiento; es por ello que no se puede indicar una tendencia del coeficiente del reparto en función de la temperatura o presión, pero el coeficiente de reparto sí varía si cambia la temperatura o la presión.

2.2.3.1.2. Agregar componentes de la mezcla ternaria

La concentración del componente miscible en la fase orgánica o la fase acuosa depende de las interacciones químicas y su afinidad de los componentes de cada fase; sin embargo, la afinidad de combinarse en cada fase depende de la cantidad total de los demás compuestos; donde esta afinidad puede aumentar o disminuir depende de las interacciones propias de cada compuesto en su respectiva solución.

2.3. Cromatografía

La cromatografía es una técnica de identificación de componentes en una solución, su precisión es alta. La cromatografía cuenta con dos fases que pueden ser: sólida, líquida o gas; una fase se denomina móvil y otra estacionaria. La muestra a analizar se coloca en cada fase. Los componentes de la solución se separan y al separarse recorren cada una de las fases; cada fase es recorrida con un tiempo diferente, esto a su vez produce la separación. El mayor tiempo que pase cada componente en cada fase depende de su afinidad a cada una; si el componente es a favor de la fase móvil significa que el producto se mueve rápidamente; y si se encuentra en mayor tiempo en la fase estacionaria, el producto queda retenido y su salida es lenta.

2.3.1. Cromatografía gaseosa acoplada, espectrometría de masas (GC-MS)

Una solución de diferentes compuestos al inyectarse en el cromatógrafo de gases se separa en la columna cromatográfica obteniendo una separación de sustancias aisladas que pasan al espectrómetro de masas para su identificación. Cada componente se registra en forma de pico cromatográfico y se identifica más con el espectro de masas que se utilizó para cada pico.

Durante el proceso, el espectro de masas, también actúa como detector cromatográfico al reconocer la corriente iónica total generada en la fuente iónica, cuya gráfica forma el cromatograma. La corriente iónica ocasionada por todos los iones forma un pico de área proporcional a la concentración del compuesto detectado.

2.4. Aceite esencial de mandarina

La mandarina pertenece a la familia de los cítricos, tiene un parecido con la naranja y varias ocasiones se confunden, su nombre científico es *Citrus tangerina*. El aceite esencial de mandarina es extraído principalmente de la cascara externa, tiene un olor dulce y crítico y característico de la fruta.

El aceite de mandarina al momento de extraerse está en estado líquido de color naranja con una pequeña apariencia de violeta azulado, no es tóxico, no irritante y no sensibiliza.

Figura 5. **Aceite esencial de mandarina**



Fuente: *Aceite esencial de mandarina*. https://www.google.com/search?q=aceite+esencial+de+mandarina&rlz=1C1GCEA_enGT850GT850&sxsrf=ACYBGNRri9QFmsIM_ZKxmEWs7Ju87wjx0A:1569431648024&source=lnms&tbm=isch&sa=X&ved=0ahUKEwiQwYS_vOzKAhWDxVkkHT0_CbcQ_AUIEigB&biw=1366&bih=657#imgrc=FH0M5WpWQ3wwsM: Consulta: 25 de septiembre de 2019.

2.4.1. Extracción

El aceite esencial de mandarina se obtiene mediante destilación por arrastre vapor de las hojas, cáscara y ramillas de la planta.

Algunos compuestos orgánicos tienden a separarse a determinadas temperaturas no cercanas al ambiente; se colocan las partes ya mencionada de la mandarina en un balón, pero está conectado con un balón, con un solvente; generalmente, se utiliza el agua como solvente.

Entonces, al ocasionar el cambio de fase del agua, genera vapor de agua que se mueve en dirección de las hojas; entonces, algunos compuestos orgánicos al entrar en contacto con el vapor por equilibrio térmico, la planta comienza a subir la temperatura ocasionando que se comiencen a separar los compuestos orgánicos; entonces, la fase de vapor ya contiene moléculas de los compuestos orgánicos de la planta, que ocasiona así un vapor de agua con los componentes de la planta.

Esta fase gaseosa se desplaza y pasa por un equipo de enfriamiento, dado que el agua y los compuestos orgánicos de la planta tienen diferente punto de condensación ocasiona que se puedan separar, se obtiene así el agua y los compuestos orgánicos, que esto a su vez se conoce como aceite esencial; dado que estos compuestos orgánicos vienen de una planta en específico, tienen propiedades o características relacionadas a esta planta.

Figura 6. Destilación por arrastre de vapor



Fuente: *Destilación por arrastre de vapor.*

https://www.google.com/search?rlz=1C1GCEA_enGT850GT850&biw=1366&bih=657&tbn=isch&sxsrf=ACYBGNTZiLF8UG_arwC5Y7Gcf7-GbJ4Rqg%3A1570657999996&sa=1&ei=z1aeXauyPKyt5wKE44KQAw&q=extracci%C3%B3n+por+arrastre+de+vapor+de+aceite+esencial+del+romero&oq=extracci%C3%B3n+por+a&gs_l=img.3.1.35i39j0i24l2.5161.6830..7858...0.0..0.86.977.13.....0....1..gws-wiz-img.....0.KamxTKQLorE#imgrc=Yo49Xacz9CgNyM: Consulta: 9 de octubre de 2019.

2.4.2. Beneficios del aceite esencial de mandarina

El aceite esencial de mandarina se utiliza en la industria de alimentos y medicamentos. En el ámbito de medicamentos tienen beneficios en: efectos calmantes, en la controlar espasmos, en ser purificador de sangre, en cuidados de piel y cabello y en la pérdida de peso; al usarse se recomienda utilizarse en solución diluida. En el ámbito de la industria de alimentos se puede utilizar en: coloraciones, en helados y productos de panaderías.

2.4.3. Composición química

La composición química del aceite esencial de mandarina está dada por la siguiente imagen: la primera columna es el nombre del compuesto; la segunda está en blanco; la tercera, el resultado del lote de producción; y la cuarta, los valores que puede tomar la composición de cada compuesto:

Figura 7. Composición del aceite esencial de mandarina



Fuente: *Aceite esencial de mandarina*. https://www.google.com/search?q=aceite+esencial+de+mandarina&rlz=1C1GCEA_enGT850GT850&sxsrf=ACYBGNRri9QFmsIM_ZKxmEWs7Ju87wjx0A:1569431648024&source=lnms&tbn=isch&sa=X&ved=0ahUKEwiQwYS_vOzKAhWDxVkkHT0_CbcQ_AUIEigB&biw=1366&bih=657#imgrc=FH0M5WpWQ3wwsM: Consulta: 25 de septiembre de 2019.

2.4.4. Propiedades del aceite esencial de mandarina

A continuación, se muestra una imagen de las propiedades del aceite esencial de mandarina; la primera columna es el tipo de ensayo; la segunda columna es el método; la tercera columna es el resultado del ensayo, y la cuarta columna son los parámetros permitidos; se hizo el ensayo a temperatura de 24,9 °C.

Figura 8. Propiedades del aceite esencial de mandarina



Fuente: *Aceite esencial de mandarina*. https://www.google.com/search?q=aceite+esencial+de+mandarina&rlz=1C1GCEA_enGT850GT850&sxsrf=ACYBGNRri9QFmsIM_ZKxmEWs7Ju87wjx0A:1569431648024&source=lnms&tbn=isch&sa=X&ved=0ahUKEwiQwYS_vOzKAhWDxVkkHT0_CbcQ_AUIEigB&biw=1366&bih=657#imgrc=FH0M5WpWQ3wwsM: Consulta: 25 de septiembre de 2019.

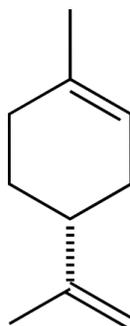
2.4.5. Principios activos

Los principios activos del aceite esencial de mandarina forman una mezcla de componentes; entre los que se encuentran en mayor proporción están limoneno-D y gamma terpineno.

2.4.5.1. Limoneno-D

El nombre IUPAC es 1-Metil-4-(1-metiletinil)-ciclohexeno y tiene un número CAS 138-86-3. Es un líquido incoloro de temperatura ambiente y olor a crítico. Su punto de ebullición es 176 °C a 760 mm Hg; el punto de fusión es -74,35 °C. Su densidad relativa es aproximadamente 0,84 y su masa molar es 136,23 g/mol.

Figura 9. Estructura química del limoneno



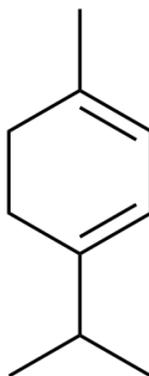
Fuente: *Estructura química del limoneno.*

https://www.google.com.gt/search?q=estructura+quimica+del+limoneno&sxsrf=ACYBGNSjW7nII9Fsazf7fHzsse4Rnc87XA:1573826623046&source=Inms&tbn=isch&sa=X&ved=0ahUKEwiFzreGsezlAhVJpFkKHRmiA9YQ_AUIEigB&biw=1511&bih=730. Consulta: 28 de septiembre de 2019.

2.4.5.2. Gamma terpineno

Su nombre IUPAC es 4-Methyl-1-(1-methylethyl)-1,3-cyclohexadiene, tiene un número de CAS 99-84-3. Son naturales y provienen de compuestos orgánicos. Su masa molar es 136,23 g/mol, su punto de fusión es de -213 °C a 760 mm Hg y su punto de ebullición es de -100 °C.

Figura 10. Estructura química del terpineno



Fuente: *Estructura química del terpineno.*

https://www.google.com.gt/search?q=estructura+quimica+del+limoneno&sxsrf=ACYBGNSjW7nII9Fsazf7fHzsse4Rnc87XA:1573826623046&source=lnms&tbn=isch&sa=X&ved=0ahUKEwiFzreGsezlAhVJpFkKHRmiA9YQ_AUIEigB&biw=1511&bih=730. Consulta: 28 de septiembre de 2019.

3. DISEÑO METODOLÓGICO

3.1. Localización

El desarrollo experimental de la investigación se realizó en el Laboratorio del Área de Fisicoquímica, la Escuela de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de San Carlos de Guatemala.

La determinación de masa de etanol por medio de cromatografía de gases, fue realizado en el Laboratorio Instrumentación Química Avanzada, Edificio II1, Universidad del Valle Guatemala.

3.2. Variables

Son los parámetros a utilizar que están sujeto a cambiar su medida; se dividen en dependientes e independientes.

3.2.1. Variables dependientes

- Composición de la fracción másica del equilibrio ternario
- Masa de la solución final
- Masa de etanol en fase acuosa
- Masa de etanol en fase orgánica
- Masa de la fase acuosa
- Masa de la fase orgánica

3.2.2. Variables independientes

- Composición de la fracción másica entre agua y el aceite esencial de mandarina
- Cantidad de masa de agua, aceite esencial de mandarina y etanol, en la región debajo la curva de solubilidad que genera una separación de los componentes en una fase acuosa y una fase orgánica.

3.3. Delimitación del campo de estudio

Este trabajo es de carácter cuantitativo; se realizará el diagrama de equilibrio líquido-líquido de un equilibrio ternario del sistema aceite esencial de mandarina-agua-etanol, con el fin de realizar una curva de solubilidad en representación gráfica, con los elementos esenciales; es decir, punto de pliegue y líneas de enlace.

Se realizaron soluciones ubicadas por debajo de la curva de solubilidad del equilibrio ternario; cada solución se separa para formar una fase acuosa y una fase orgánica; se obtuvo la cantidad de etanol en cada fase por medio de cromatografía de gases.

3.4. Diseño experimental

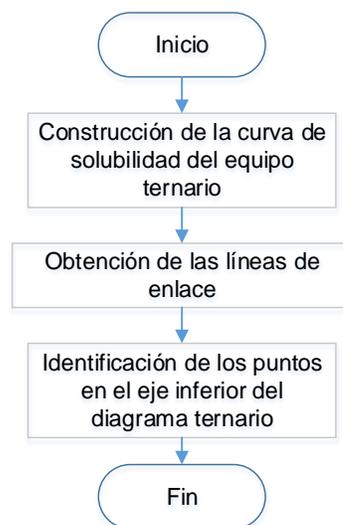
Para el diseño experimental se utilizó un diseño predeterminado. Se prepararon soluciones líquidas binarias de aceite esencial de mandarina y agua, donde se hicieron 9 muestras; cambian su composición másica de un valor igual entre cada muestra. Se conoce el peso total de la solución binaria; se coloca etanol hasta observar una miscibilidad total de los tres componentes;

luego, se pesa la solución ternaria, que es la solución binaria originalmente más la masa agregada de etanol.

Después de obtener la curva de solubilidad del equilibrio ternario de aceite esencial de mandarina, agua y etanol, se buscaron 4 puntos debajo de la región de miscibilidad. Estos puntos se convierten en soluciones ternarias; se elaboran a una fracción constante de aceite esencial; se deja reposar por 2 horas; se decanta para separar la fase orgánica y de la acuosa.

Después de obtener 4 soluciones acuosas y 4 soluciones orgánicas, se procedió a determinar la cantidad de etanol en cada solución, por medio de cromatografía de gases; se obtiene cada concentración másica para así graficarlo en la curva de solubilidad y se unen los puntos correspondientes a cada solución ternaria inicial; para luego obtener la tendencia de estos 4 puntos y así determinar el punto de pliegue.

Figura 11. **Diagrama de diseño experimental**



Fuente: elaboración propia.

3.5. Recurso humano disponible

- Investigador: Christian Daniel Estrada Santizo
- Asesor: Ing. Qco. César Ariel Villela Rodas

3.6. Recurso material disponible

A continuación, se describe el material disponible para la investigación; se clasifica en materia prima, reactivos, cristalería, equipo y materiales auxiliares.

3.6.1. Materia prima

En este diseño experimental no se utilizó materia prima; todos los reactivos utilizados se compraron.

3.6.2. Reactivos

- Agua desmineralizada
- Alcohol absoluto
- Aceite esencial de mandarina

3.6.3. Cristalería

- *Beaker* 50 ml
- *Beaker* 100 ml
- *Beaker* 250 ml
- Piseta de práctica
- Pipeta de 5 ml
- Pipeta de 10 ml

- Bureta de 25 ml
- Ampolla de decantación 250 ml
- Ampolla de decantación 250 ml
- Ampolla de decantación 250 ml
- Embudo
- Embudo

3.6.4. Equipo

- Balanza analítica
- Balanza analítica
- Soporte
- Pinzas
- Cromatógrafo de gases con acoplamiento a espectrometría de masas

3.6.5. Materiales auxiliares

- Computadora
- Impresora
- Lapiceros
- Marcadores
- Hojas bond
- Papel parafilm
- Guantes de latex
- Recipientes de plástico
- Bata
- *Masking tape*

3.7. Técnica cuantitativa

Las variables a medir y controlar corresponden a valores numéricos reales, estos asociados a la cantidad de masa que se necesita para lograr el equilibrio ternario de solubilidad y a la composición de las diferentes mezclas. El estudio adoptará un diseño experimental, dado que la información acerca de la representación gráfica del equilibrio ternario de solubilidad se obtendrá al realizar soluciones ternarias cuyos puntos estén representados en la región de inmiscibilidad del domo; cuyo tratamiento mediante uso de cromatografía de gases, servirá para determinar las composiciones de la fase orgánica y de la fase acuosa; para finalmente determinar las líneas de enlace y el punto de pliegue de la representación gráfica del equilibrio ternario de solubilidad, además de obtener variables cuantitativa como coeficiente de reparto de etanol entre ambas fases.

3.8. Procedimiento

A continuación, se presenta el procedimiento de la obtención de la curva de solubilidad del equilibrio ternario, obtención de las muestras para las líneas de enlace y obtención de los puntos de inicio en el eje inferior binario.

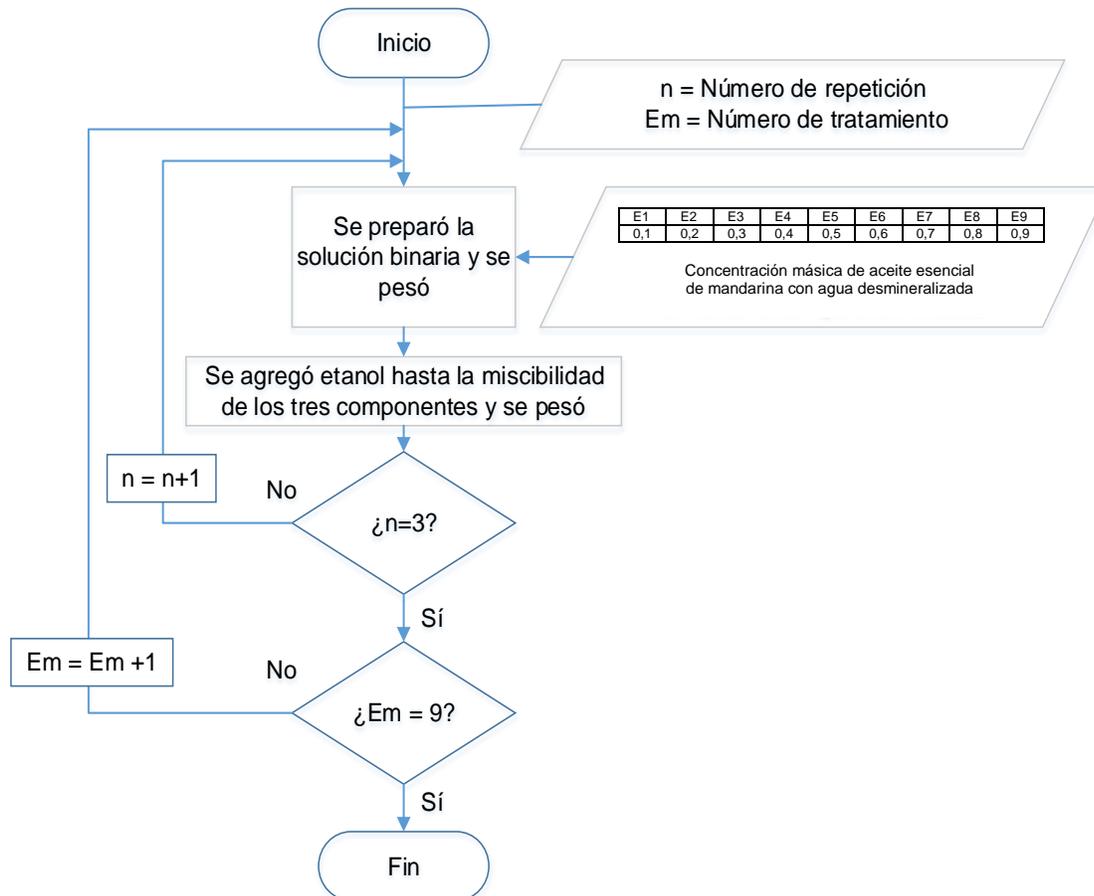
3.8.1. Curva de solubilidad del equilibrio ternario

- Se limpió el lugar de trabajo
- Se calibró la balanza
- Se taró el *beaker* vacío
- Se prepararon 9 soluciones de aceite esencial de mandarina-agua a diferentes concentraciones máxicas en función del aceite esencial de

mandarina, de 0,1 a 0,9, cuya muestra de cálculo del peso de la solución era 5 gramos.

- Se pesó cada muestra, siendo este el peso de mezcla binaria.
- Se agregó etanol con ayuda de una probeta gota a gota hasta que los tres componentes sean miscibles entre sí, por medio de inspección visual.
- Se pesó la mezcla, este es el peso de la solución ternaria y se anotó el dato.
- Se repitieron 2 veces los pasos anteriores veces para cada mezcla binaria, para obtener un total de 3 corridas.
- Se repitió el mismo procedimiento para cada mezcla binaria aceite esencial de mandarina-agua, para obtener un total de 9 repeticiones.
- Se colocaron los residuos en un *beaker* debidamente rotulado
- Se lavó el equipo utilizado y se limpió el área de trabajo.

Figura 12. Diagrama de flujo para la realización de la curva de solubilidad del equilibrio ternario



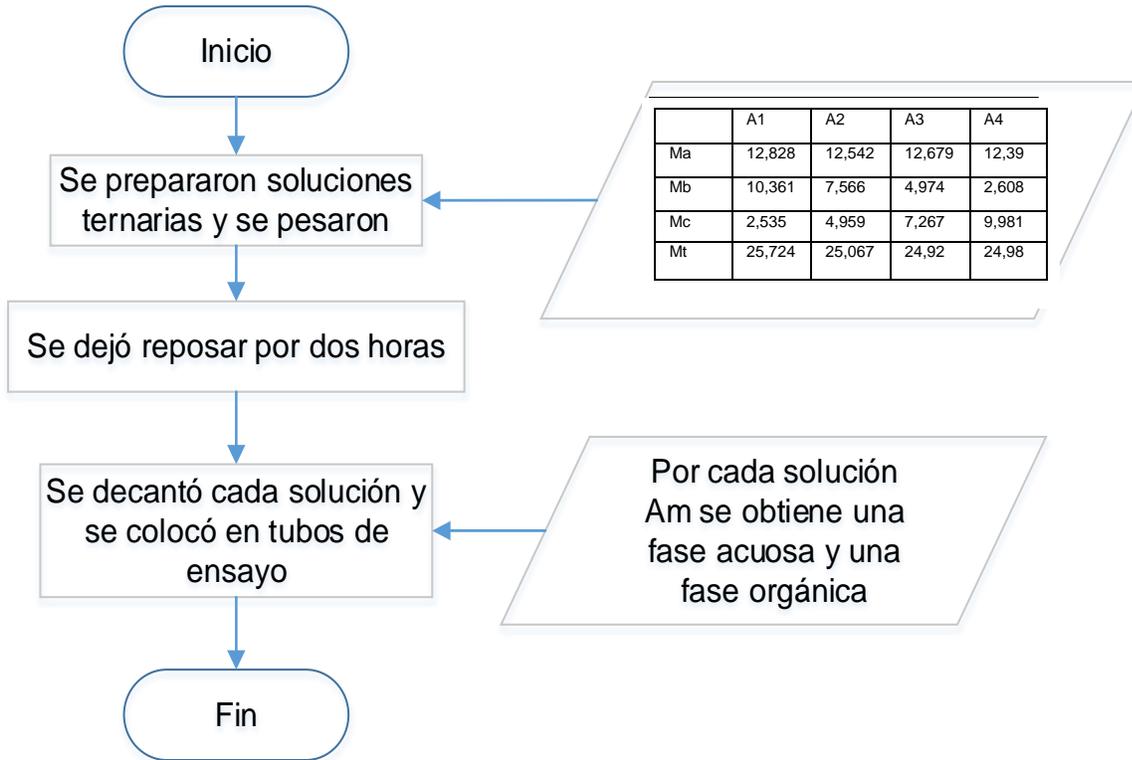
Fuente: elaboración propia.

3.8.2. Obtención de las muestras para las líneas de enlace

- Se limpió el lugar de trabajo.
- Se calibró la balanza.
- Se taró el *beaker* vacío.

- Se preparó la solución ternaria del punto a analizar y se colocó la muestra en una ampolla de decantación.
- Se dejó reposar durante 4 horas para que se separen las fases.
- Se tararon dos probetas, siendo uno para la fase acuosa y el otro para la fase orgánica, además de identificar cada una.
- Se decantó cada fase en cada probeta debidamente identificada.
- Se pesó cada probeta y se anotó cada dato.
- Se midió el volumen de cada probeta y se anotó cada dato.
- Se vertió cada probeta en un tubo de ensayo y se identificó.
- Se realizó el mismo procedimiento anterior para los 3 puntos restantes, para hacer un total de 4 muestras.
- Se limpió el equipo utilizado y el área de trabajo.

Figura 13. Diagrama de flujo de la obtención de las muestras para las líneas de enlace



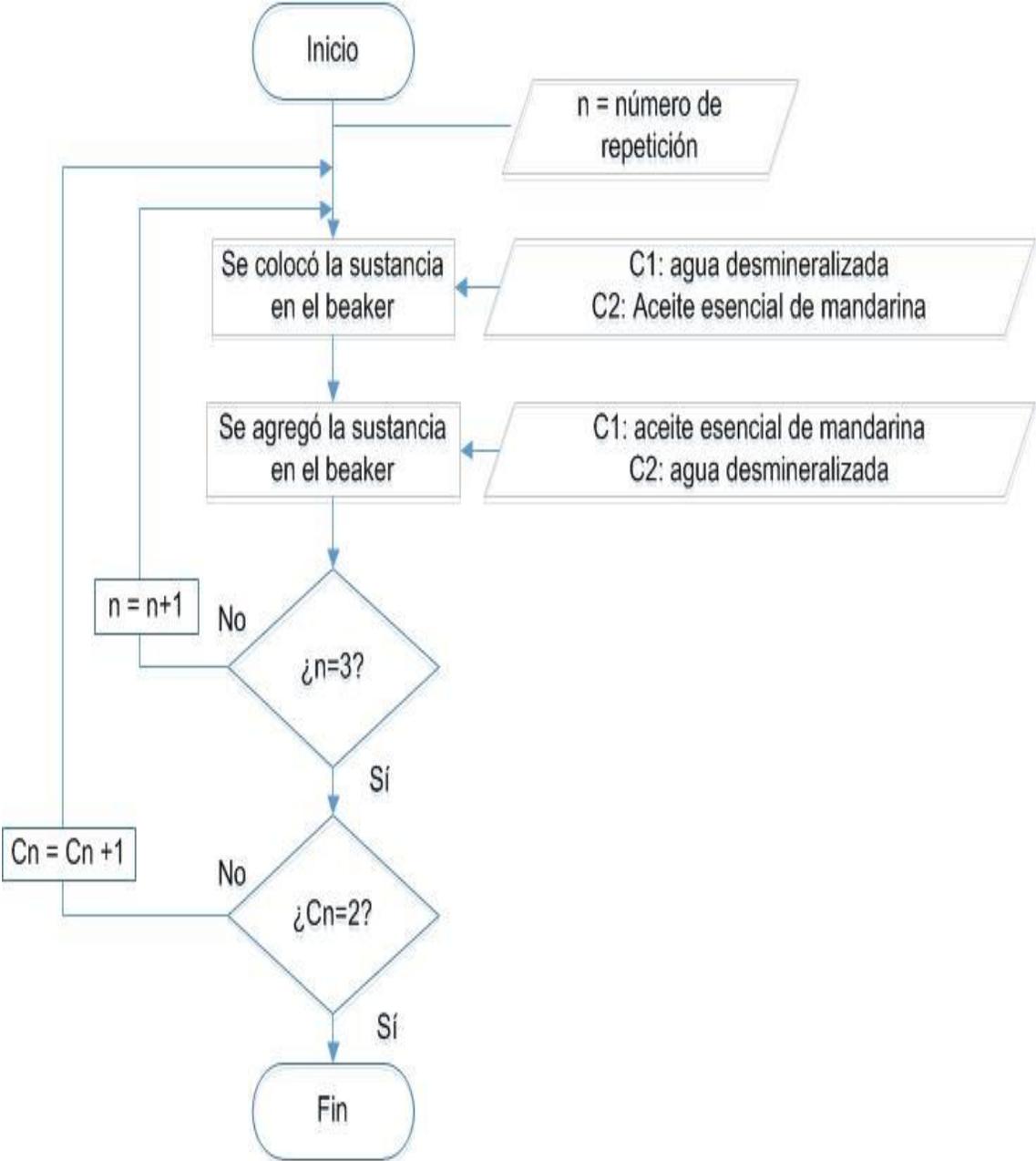
Fuente: elaboración propia.

3.8.3. Obtención de los puntos de inicio en el eje inferior binario

- Se limpió el lugar de trabajo
- Se calibró la balanza.
- Se taró el *beaker* vacío.

- Se colocaron 5 gramos de aceite esencial de mandarina en el *beaker*, se pesó y se anotó el dato.
- Se colocó agua desmineralizada en un gotero.
- Se agregó gota a gota del agua desmineralizada en el *beaker* hasta observar inmiscibilidad en la solución binaria.
- Se pesó la solución binaria y se anotó el dato.
- Se realizó 2 veces el mismo procedimiento anterior para obtener un total de 3 repeticiones.
- Se decantó cada fase en cada probeta debidamente identificada.
- Se colocaron 5 gramos agua en el beaker, se pesó y se anotó el dato.
- Se colocó aceite esencial de mandarina en un gotero.
- Se agregó gota a gota del aceite esencial de mandarina en el *beaker* hasta observar inmiscibilidad en la solución binaria.
- Se pesó la solución binaria y se anotó el dato.
- Se limpió el equipo utilizado y el área de trabajo.

Figura 14. Diagrama de flujo de la obtención de las muestras para las líneas de enlace



Fuente: elaboración propia.

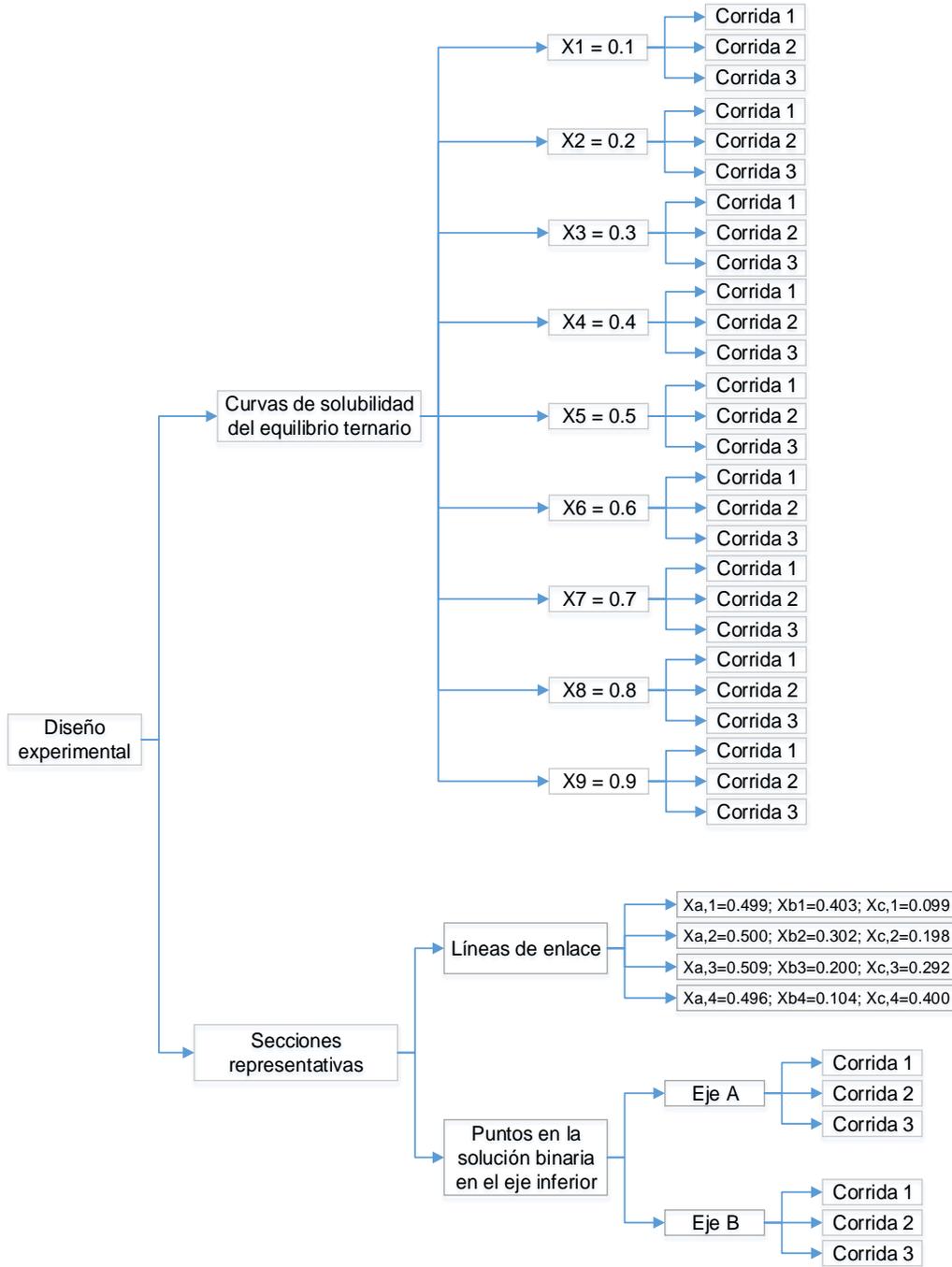
3.9. Diseño de tratamientos

El diseño experimental se clasificó en dos grupos:

- Curva de solubilidad del equilibrio ternario.
- Obtención de puntos representativos de la curva de solubilidad del equilibrio ternario.
- De la curva de solubilidad del equilibrio ternario parte de 9 tratamientos de soluciones binarias; de cada tratamiento se hicieron 3 repeticiones.
- Que a su vez el grupo de la obtención de puntos representativos de la curva de solubilidad del equilibrio ternario, se subdivide en dos subgrupos, dependiendo de la sección a encontrar.
- Líneas de enlace.
- Puntos de la solución binaria en el eje inferior del diagrama ternario.

De las líneas de enlace se hicieron 4 tratamientos y de los puntos de la solución binaria se hicieron 2 tratamientos con 3 repeticiones de cada uno.

Figura 15. Clasificación de tratamientos



Fuente: elaboración propia.

3.10. Recolección y ordenamiento de información

A continuación, se muestran los datos obtenidos en la realización del diseño experimental de esta investigación, los cuales abarcan: la realización de la curva de solubilidad del equilibrio ternario, la obtención de las líneas de enlace, los componentes de las fases acuosas y los puntos iniciales del eje inferior del diagrama ternario.

Tabla I. **Cantidad en masa de los componentes de la curva de solubilidad del equilibrio ternario**

Punto de domo	Corrida	Masa aceite esencial de mandarina (g)	Masa de agua (g)	Masa de Etanol (g)
1	1	0,646	4,614	10,394
	2	0,460	4,476	11,095
	3	0,545	4,440	10,576
2	1	1,191	4,044	13,611
	2	0,984	3,965	10,481
	3	1,135	4,125	12,145
3	1	1,347	3,617	12,450
	2	1,761	3,496	10,951
	3	1,786	3,678	12,178
4	1	2,041	3,127	13,649
	2	2,249	3,145	12,469
	3	2,107	3,079	13,876
5	1	3,000	2,497	10,470
	2	2,681	2,548	11,927
	3	2,643	2,450	13,021
6	1	2,951	1,965	8,576
	2	3,118	2,064	9,614
	3	3,026	1,973	11,025
7	1	4,000	1,518	7,328
	2	3,348	1,603	10,120
	3	3,426	1,520	10,798
8	1	4,160	1,024	7,101
	2	4,063	1,043	9,758
	3	4,213	1,017	9,256
9	1	4,574	0,587	6,565
	2	4,865	0,564	7,590
	3	4,645	0,590	7,065

Fuente: elaboración propia.

Tabla II. **Cantidad en masa de los componentes para los puntos iniciales del eje inferior del diagrama ternario**

Eje	Corrida	Masa aceite esencial de mandarina (g)	Masa de agua (g)	Masa total (g)
A	1	0,065	6,478	6,543
	2	0,016	1,692	1,708
	3	0,035	3,536	3,571
B	1	2,827	0,107	2,934
	2	3,806	0,021	3,827
	3	5,534	0,066	5,600

Fuente: elaboración propia.

Tabla III. **Cantidad en masa de los componentes para la obtención de las líneas de enlace**

Punto para líneas de enlace	Masa aceite esencial de mandarina (g)	Masa de agua (g)	Masa de etanol (g)	Masa total (g)
1	12,828	10,361	2,535	25,724
2	12,542	7,566	4,959	25,067
3	12,679	4,974	7,267	24,92
4	12,390	2,608	9,981	24,979

Fuente: elaboración propia.

Tabla IV. **Concentraciones obtenidas de las cuatro fases acuosas de los puntos en la región debajo de la curva de solubilidad**

Muestra	%metanol sin dilución	% etanol sin dilución	Concentración metanol %(p/v)	Concentración etanol %(p/v)
FA1	0,009	9,951	0,012	13,268
FA2	0,020	46,686	0,027	20,915
FA3	0,012	13,346	0,053	31,518
FA4	0,012	12,547	0,034	57,032

Fuente: elaboración propia.

Tabla V. **Cantidad de masa total de la fase acuosa, cantidad de volumen total de la fase orgánica y cantidad total de volumen de la fase acuosa**

Fase orgánica	Fase acuosa	
Volumen total (mL)	Masa total (g)	Volumen total (mL)
15,5	11,153	11,800
18,4	9,377	10,500
22,0	6,504	7,000
21,5	6,561	7,500

Fuente: elaboración propia.

3.11. **Tabulación, ordenamiento y procesamiento de la información**

A continuación, se presentan los cálculos a partir de la información del diseño experimental, así como: la realización de la curva de solubilidad del equilibrio ternario, la obtención de las líneas de enlace, los componentes de las fases orgánicas y de las fases acuosas, los puntos iniciales del eje inferior del diagrama ternario y el coeficiente de reparto del etanol en la fase orgánica y fase acuosa.

Tabla VI. **Composición másica de la primera corrida de la solución binaria antes de formar la curva de solubilidad del equilibrio ternario y fracción real de aceite esencial de mandarina**

Punto domo	Fracción propuesta de aceite esencial	Masa aceite esencial de mandarina (g)	Masa agua (g)	Masa total (g)	Fracción real de aceite esencial de mandarina
1	0,100	0,646	4,614	5,260	0,123
2	0,200	1,191	4,044	5,235	0,228
3	0,300	1,347	3,617	4,964	0,271
4	0,400	2,041	3,127	5,168	0,395
5	0,500	3,000	2,497	5,497	0,546
6	0,600	2,951	1,965	4,916	0,600
7	0,700	4,000	1,518	5,518	0,725
8	0,800	4,160	1,024	5,184	0,802
9	0,900	4,574	0,587	5,161	0,886

Fuente: elaboración propia.

Tabla VII. **Composición másica de la segunda corrida de la solución binaria antes de formar la curva de solubilidad del equilibrio ternario y fracción real de aceite esencial de mandarina**

Punto domo	Fracción propuesta de aceite esencial	Masa aceite esencial de mandarina (g)	Masa agua (g)	Masa total (g)	Fracción real de aceite esencial de mandarina
1	0,100	0,460	4,476	4,936	0,093
2	0,200	0,984	3,965	4,949	0,199
3	0,300	1,761	3,496	5,257	0,335
4	0,400	2,249	3,145	5,394	0,417
5	0,500	2,681	2,548	5,229	0,513
6	0,600	3,118	2,064	5,182	0,602
7	0,700	3,348	1,603	4,951	0,676
8	0,800	4,063	1,043	5,106	0,796
9	0,900	4,865	0,564	5,429	0,896

Fuente: elaboración propia.

Tabla VIII. **Composición másica de la tercera corrida de la solución binaria antes de formar la curva de solubilidad del equilibrio ternario y fracción real de aceite esencial de mandarina**

Punto domo	Fracción propuesta de aceite esencial	Masa aceite esencial de mandarina (g)	Masa agua (g)	Masa total (g)	Fracción real de aceite esencial de mandarina
1	0,100	0,545	4,440	4,985	0,109
2	0,200	1,135	4,125	5,260	0,216
3	0,300	1,786	3,678	5,464	0,327
4	0,400	2,107	3,079	5,186	0,406
5	0,500	2,643	2,450	5,093	0,519
6	0,600	3,026	1,973	4,999	0,605
7	0,700	3,426	1,520	4,946	0,693
8	0,800	4,213	1,017	5,230	0,806
9	0,900	4,645	0,590	5,235	0,887

Fuente: elaboración propia.

Tabla IX. **Cantidad másica de la primera corrida de cada componente en la solución ternaria que forma la curva de solubilidad del equilibrio ternario**

Punto domo	Masa aceite esencial de mandarina (g)	Masa agua (g)	Masa etanol (g)	Masa total (g)
1	0,646	4,614	10,394	15,654
2	1,191	4,044	13,611	18,846
3	1,347	3,617	12,450	17,414
4	2,041	3,127	13,649	18,817
5	3,000	2,497	10,470	15,967
6	2,951	1,965	8,576	13,492
7	4,000	1,518	7,328	12,846
8	4,160	1,024	7,101	12,285
9	4,574	0,587	6,565	11,726

Fuente: elaboración propia.

Tabla X. **Fracciones másicas de la primera corrida de cada componente en la solución ternaria que forma la curva de solubilidad del equilibrio ternario**

Punto domo	Fracción másica aceite esencial de mandarina	Fracción másica agua	Fracción másica etanol
1	0,041	0,295	0,664
2	0,063	0,215	0,722
3	0,077	0,208	0,715
4	0,108	0,166	0,725
5	0,188	0,156	0,656
6	0,219	0,146	0,636
7	0,311	0,118	0,570
8	0,339	0,083	0,578
9	0,390	0,050	0,560

Fuente: elaboración propia.

Tabla XI. **Cantidad másica de la segunda corrida de cada componente en la solución ternaria que forma la curva de solubilidad del equilibrio ternario**

Punto domo	Masa aceite esencial de mandarina (g)	Masa agua (g)	Masa etanol (g)	Masa total (g)
1	0,460	4,476	11,095	16,031
2	0,984	3,965	10,481	15,430
3	1,761	3,496	10,951	16,208
4	2,249	3,145	12,469	17,863
5	2,681	2,548	11,927	17,156
6	3,118	2,064	9,614	14,796
7	3,348	1,603	10,120	15,071
8	4,063	1,043	9,758	14,864
9	4,865	0,564	7,590	13,019

Fuente: elaboración propia.

Tabla XII. **Fracciones másicas de la segunda corrida de cada componente en la solución ternaria que forma la curva de solubilidad del equilibrio ternario**

Punto domo	Fracción másica aceite esencial de mandarina	Fracción másica agua	Fracción másica etanol
1	0,029	0,279	0,692
2	0,064	0,257	0,679
3	0,109	0,216	0,676
4	0,126	0,176	0,698
5	0,156	0,149	0,695
6	0,211	0,140	0,650
7	0,222	0,106	0,671
8	0,273	0,070	0,656
9	0,374	0,043	0,583

Fuente: elaboración propia.

Tabla XIII. **Cantidad másica de la tercera corrida de cada componente en la solución ternaria que forma la curva de solubilidad del equilibrio ternario**

Punto domo	Masa aceite esencial de mandarina (g)	Masa agua (g)	Masa etanol (g)	Masa total (g)
1	0,545	4,440	10,576	15,561
2	1,135	4,125	12,145	17,405
3	1,786	3,678	12,178	17,642
4	2,107	3,079	13,876	19,062
5	2,643	2,450	13,021	18,114
6	3,026	1,973	11,025	16,024
7	3,426	1,520	10,798	15,744
8	4,213	1,017	9,256	14,486
9	4,645	0,590	7,065	12,300

Fuente: elaboración propia.

Tabla XIV. **Fracciones másicas de la tercera corrida de cada componente en la solución ternaria que forma la curva de solubilidad del equilibrio ternario**

Punto domo	Fracción másica aceite esencial de mandarina	Fracción másica agua	Fracción másica etanol
1	0,035	0,285	0,680
2	0,065	0,237	0,698
3	0,101	0,208	0,690
4	0,111	0,162	0,728
5	0,146	0,135	0,719
6	0,189	0,123	0,688
7	0,218	0,097	0,686
8	0,291	0,070	0,639
9	0,378	0,048	0,574

Fuente: elaboración propia.

Tabla XV. **Promedio y desviación estándar de cada fracción másica del aceite esencial de mandarina en la obtención de la curva de solubilidad del equilibrio ternario**

	Media	Desviación estándar
Punto domo	Fracción másica aceite esencial de mandarina	
1	0,035	0,005
2	0,064	0,001
3	0,096	0,013
4	0,115	0,008
5	0,163	0,018
6	0,206	0,013
7	0,250	0,043
8	0,301	0,028
9	0,380	0,007

Fuente: elaboración propia.

Tabla XVI. **Promedio y desviación estándar de cada fracción másica del agua en la obtención de la curva de solubilidad del equilibrio ternario**

	Media	Desviación estándar
Punto domo	Fracción másica agua	
1	0,286	0,006
2	0,236	0,017
3	0,211	0,004
4	0,168	0,006
5	0,147	0,009
6	0,136	0,010
7	0,107	0,009
8	0,075	0,006
9	0,047	0,003

Fuente: elaboración propia.

Tabla XVII. **Promedio y desviación estándar de cada fracción másica del etanol en la obtención de la curva de solubilidad del equilibrio ternario**

	Media	Desviación estándar
Punto domo	Fracción másica etanol	
1	0,679	0,011
2	0,700	0,018
3	0,694	0,016
4	0,717	0,014
5	0,690	0,026
6	0,658	0,022
7	0,643	0,051
8	0,624	0,034
9	0,572	0,010

Fuente: elaboración propia.

Tabla XVIII. **Fracciones másicas del aceite esencial de mandarina y el agua del eje binario de la parte inferior del domo**

Eje	Corrida	Masa aceite esencial de mandarina (g)	Masa agua (g)	Masa total (g)	Fracción másica aceite esencial de mandarina	Fracción másica agua
A	1	2,827	0,107	2,934	0,964	0,036
	2	3,806	0,021	3,827	0,995	0,005
	3	5,534	0,066	5,600	0,988	0,012
B	1	0,065	6,478	6,543	0,010	0,990
	2	0,016	1,692	1,708	0,009	0,991
	3	0,035	3,536	3,571	0,010	0,990

Fuente: elaboración propia.

Tabla XIX. **Fracciones másicas promedios con su respectiva desviación estándar del aceite esencial de mandarina y el agua del eje binario de la parte inferior del domo**

Eje	Fracción másica aceite esencial de mandarina		Fracción másica agua	
	Media	Desviación estándar	Media	Desviación estándar
A	0,982	0,013	0,018	0,013
B	0,010	0,001	0,990	0,000

Fuente: elaboración propia.

Tabla XX. **Cantidad másica de los tres componentes de los cuatro puntos ubicados en la región de inmiscibilidad de la curva de solubilidad**

Punto para líneas de enlace	Masa aceite esencial de mandarina (g)	Masa agua (g)	Masa etanol (g)	Masa total (g)
1	12,828	10,361	2,535	25,724
2	12,542	7,566	4,959	25,067
3	12,679	4,974	7,267	24,92
4	12,39	2,608	9,981	24,979

Fuente: elaboración propia.

Tabla XXI. **Fracción másica de los tres componentes de los cuatro puntos ubicados en la región de inmiscibilidad de la curva de solubilidad**

Punto para líneas de enlace	Fracción másica aceite esencial de mandarina	Fracción másica agua	Fracción másica etanol
1	0,499	0,403	0,099
2	0,500	0,302	0,198
3	0,509	0,200	0,292
4	0,496	0,104	0,400

Fuente: elaboración propia.

Tabla XXII. **Cantidad de masa de la fase acuosa de los cuatro puntos ubicados en la región de inmiscibilidad de la curva de solubilidad**

Punto para líneas de enlace	Masa aceite esencial de mandarina (g)	Masa agua (g)	Masa etanol (g)	Masa total (g)	Volumen total (mL)
1	0,000	9,587	1,566	11,153	11,800
2	0,000	7,181	2,196	9,377	10,500
3	0,000	4,298	2,206	6,504	7,000
4	0,000	2,284	4,277	6,561	7,500

Fuente: elaboración propia.

Tabla XXIII. **Composición de la fracción másica de la fase acuosa de los cuatro puntos ubicados en la región de inmiscibilidad de la curva de solubilidad**

Punto para líneas de enlace	Fracción másica aceite esencial de mandarina	Fracción másica agua	Fracción másica etanol
1	0,000	0,860	0,140
2	0,000	0,766	0,234
3	0,000	0,661	0,339
4	0,000	0,348	0,652

Fuente: elaboración propia.

Tabla XXIV. **Cantidad másica de la fase orgánica de los cuatro puntos ubicados en la región de inmiscibilidad de la curva de solubilidad**

Punto para líneas de enlace	Masa aceite esencial de mandarina (g)	Masa agua (g)	Masa etanol (g)	Masa total (g)	Volumen total (mL)
1	13,602	0,000	0,969	14,571	15,500
2	12,927	0,000	2,763	15,690	18,400
3	13,355	0,000	5,061	18,416	22,000
4	12,714	0,000	5,704	18,418	21,500

Fuente: elaboración propia.

Tabla XXV. **Composición de la fracción másica de la fase orgánica de los cuatro puntos ubicados en la región de inmiscibilidad de la curva de solubilidad**

Punto para líneas de enlace	Fracción másica aceite esencial de mandarina	Fracción másica agua	Fracción másica etanol
1	0,933	0,000	0,067
2	0,824	0,000	0,176
3	0,725	0,000	0,275
4	0,690	0,000	0,310

Fuente: elaboración propia.

Tabla XXVI. **Concentración molar del etanol en las cuatro fases acuosas**

Punto del domo	Masa etanol (g)	Peso molecular de etanol (g/mol)	Moles de etanol	Volumen solución (L)	Concentración de etanol (mol/L)
1	1,566	46,070	0,034	0,012	2,880
2	2,196	46,070	0,048	0,011	4,540
3	2,206	46,070	0,048	0,007	6,841
4	4,277	46,070	0,093	0,008	12,379

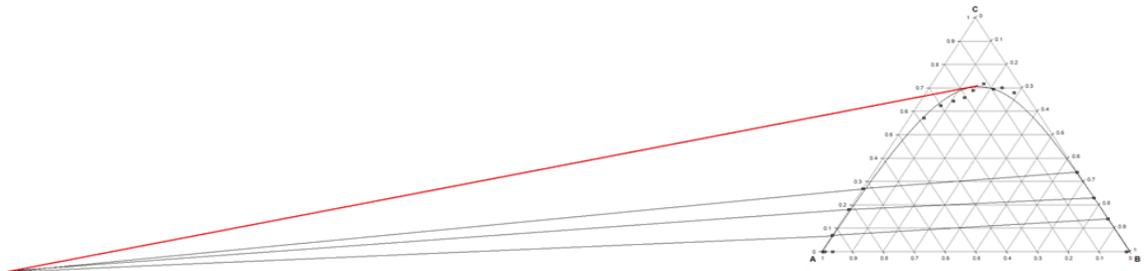
Fuente: elaboración propia.

Tabla XXVII. **Concentración molar del etanol en las cuatro fases orgánicas**

Punto del domo	Masa etanol (g)	Peso molecular de etanol (g/mol)	Moles de etanol	Volumen solución (L)	Concentración de etanol (mol/L)
1	0,969	46,070	0,021	0,016	1,358
2	2,763	47,070	0,059	0,018	3,190
3	5,061	48,070	0,105	0,022	4,785
4	5,704	49,070	0,116	0,022	5,406

Fuente: elaboración propia.

Figura 16. **Determinación del punto de pliegue por método gráfico**



Fuente: elaboración propia.

Tabla XXVIII. **Coefficiente de reparto para los 4 puntos ubicados en la región de inmiscibilidad de la curva de solubilidad**

Punto para líneas de enlace	Concentración de etanol en la fase orgánica (mol/L)	Concentración de etanol en la fase acuosa(mol/L)	Coefficiente de reparto
1	1,358	2,880	0,471
2	3,190	4,540	0,703
3	4,785	6,841	0,699
4	5,406	12,379	0,437

Fuente: elaboración propia.

3.12. Análisis estadístico

El análisis estadístico de este estudio se divide en dos herramientas de análisis: la primera es mediante el estudio de Anova, este fue utilizado para determinar si la cantidad de masa de etanol agregada en la solución binaria de agua y aceite esencial tiene un efecto significativo en los 9 puntos del domo.

La siguiente herramienta es mediante el coeficiente de correlación entre dos variables en una representación gráfica lineal, esta técnica se utilizó para evaluar las siguientes relaciones:

- Los valores de la fracción másica de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad, respecto a la fracción másica de etanol de la fase acuosa y respecto a la fracción másica de etanol de la fase orgánica.
- Los valores de la masa de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad respecto a la cantidad de masa en el etanol en la fase orgánica y fase acuosa.

- Los valores de la concentración molar de etanol en la fase acuosa respecto a la concentración molar de etanol en la fase orgánica.

Tabla XXIX. **Información para el análisis estadístico de la cantidad de masa agregada de etanol respecto a la solución binaria**

Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Masa etanol primera corrida (g)	9	90,144	10,016	7,763
Masa etanol segunda corrida (g)	9	94,004	10,445	2,049
Masa etanol tercera corrida (g)	9	99,940	11,104	4,213

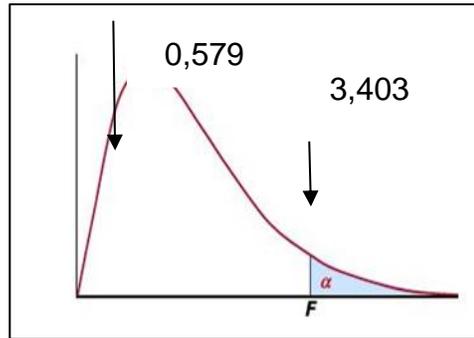
Fuente: elaboración propia.

Tabla XXX. **Anova de la cantidad de masa agregada de etanol respecto a la solución binaria**

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Valor crítico para F
Entre grupos	5,411	2	2,705	0,579	3,403
Dentro de los grupos	112,198	24	4,675		
Total	117,609	26			

Fuente: elaboración propia.

Figura 17. **Región crítica de la cantidad de masa agregada de etanol respecto a la solución binaria**



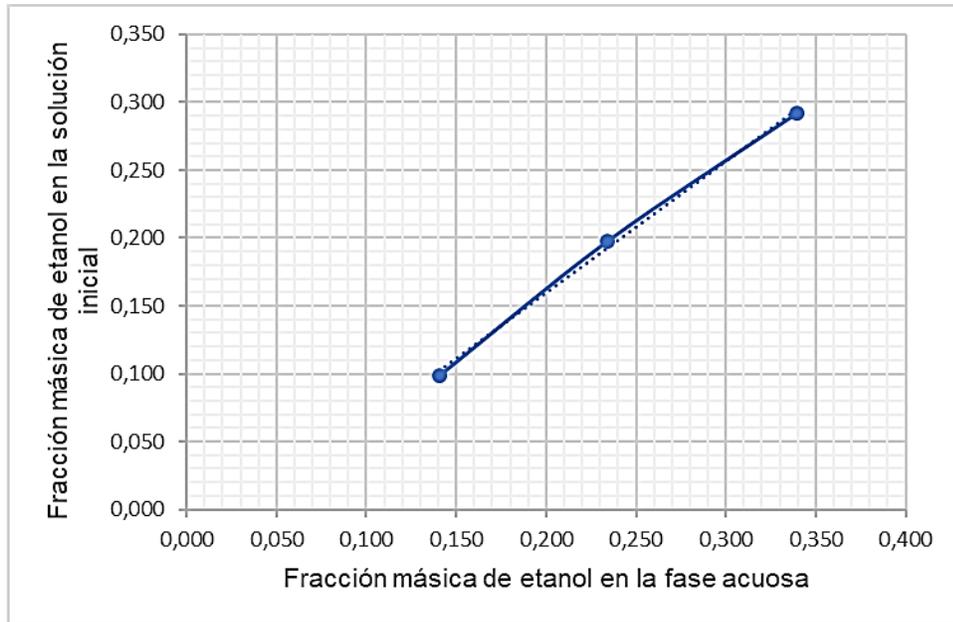
Fuente: elaboración propia.

Tabla XXXI. **Información de los valores la fracción másica de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad, respecto a la fracción másica de etanol de la fase acuosa**

Punto de línea de enlace	Fracción másica de etanol en la fase acuosa	Fracción másica de etanol en la solución inicial	Valor de R
1	0,140	0,099	0,999
2	0,234	0,198	
3	0,339	0,292	

Fuente: elaboración propia.

Figura 18. **Relación lineal de la fracción másica de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad, respecto a la fracción másica de etanol de la fase acuosa**



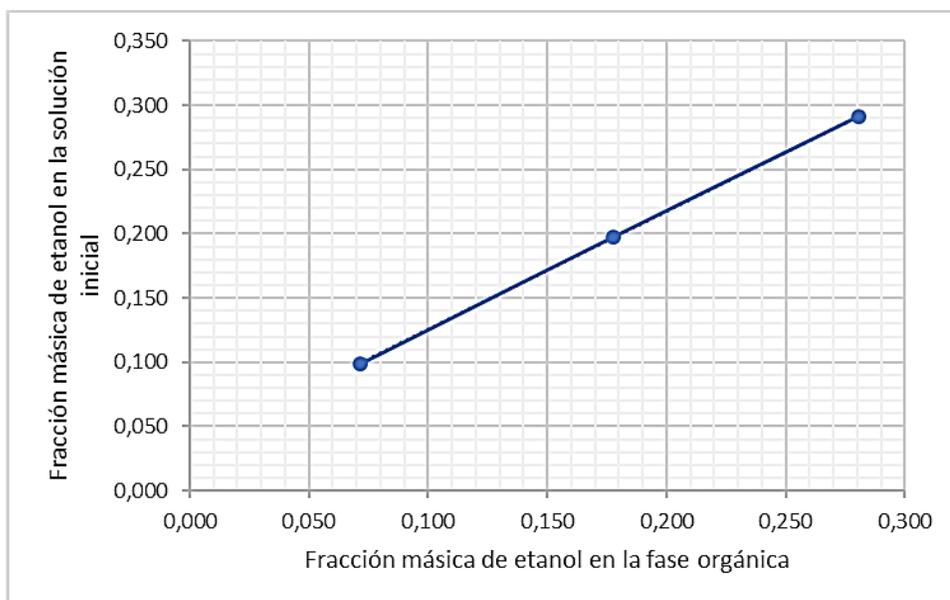
Fuente: elaboración propia.

Tabla XXXII. **Información de los valores la fracción másica de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad, respecto a la fracción másica de etanol de la fase orgánica**

Punto de línea de enlace	Fracción másica de etanol en la fase orgánica	Fracción másica de etanol en la solución inicial	Valor de R
1	0,071	0,099	1
2	0,178	0,198	
3	0,281	0,292	

Fuente: elaboración propia.

Figura 19. **Relación lineal de la fracción másica de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad, respecto a la fracción másica de etanol de la fase orgánica**



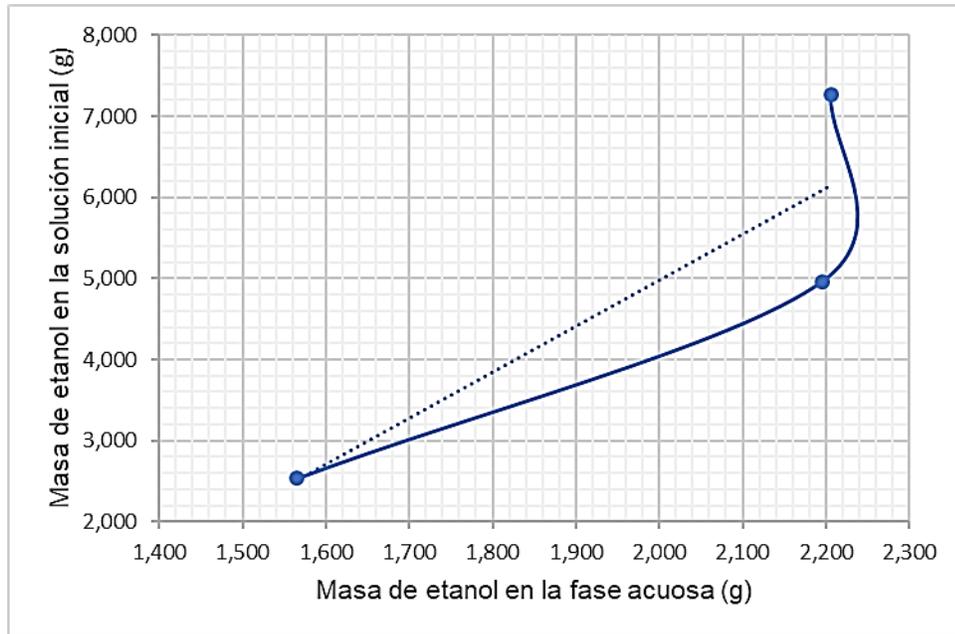
Fuente: elaboración propia.

Tabla XXXIII. **Información de los valores de la masa de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad respecto a la cantidad de masa en el etanol en la fase acuosa**

Punto de línea de enlace	Masa de etanol en la fase acuosa (g)	Masa de etanol en la solución inicial (g)	R
1	1,566	2,535	0,880
2	2,196	4,959	
3	2,206	7,267	

Fuente: elaboración propia.

Figura 20. **Relación lineal de los valores de la masa de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad respecto a la cantidad de masa en el etanol en la fase acuosa**



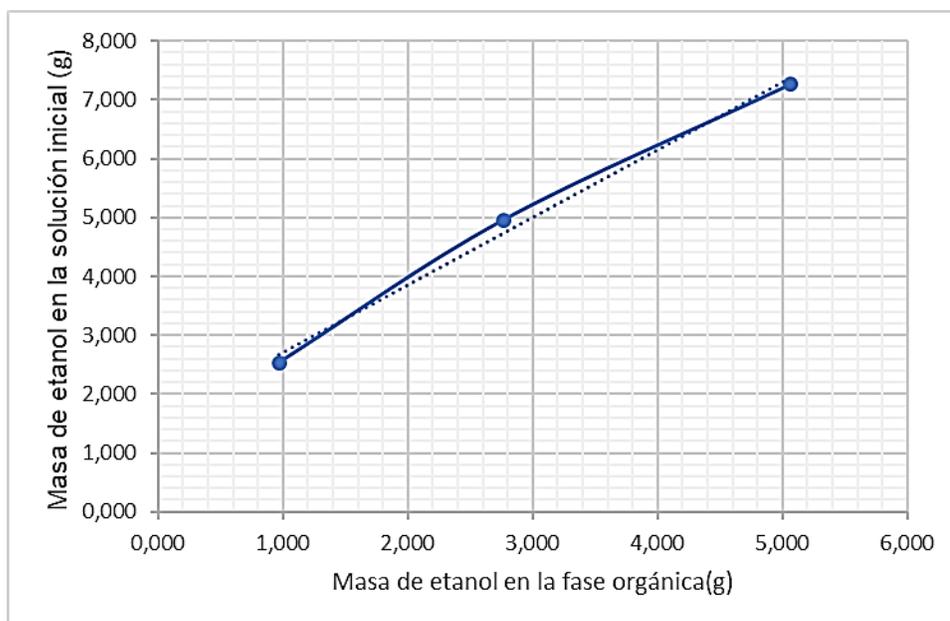
Fuente: elaboración propia.

Tabla XXXIV. **Información de los valores de la masa de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad respecto a la cantidad de masa en el etanol en la fase orgánica**

Punto de línea de enlace	Masa de etanol en la fase orgánica (g)	Masa etanol en la solución inicial (g)	R
1	0,969	2,535	0,996
2	2,763	4,959	
3	5,061	7,267	

Fuente: elaboración propia.

Figura 21. **Relación lineal de los valores de la masa de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad respecto a la cantidad de masa en el etanol en la fase orgánica**



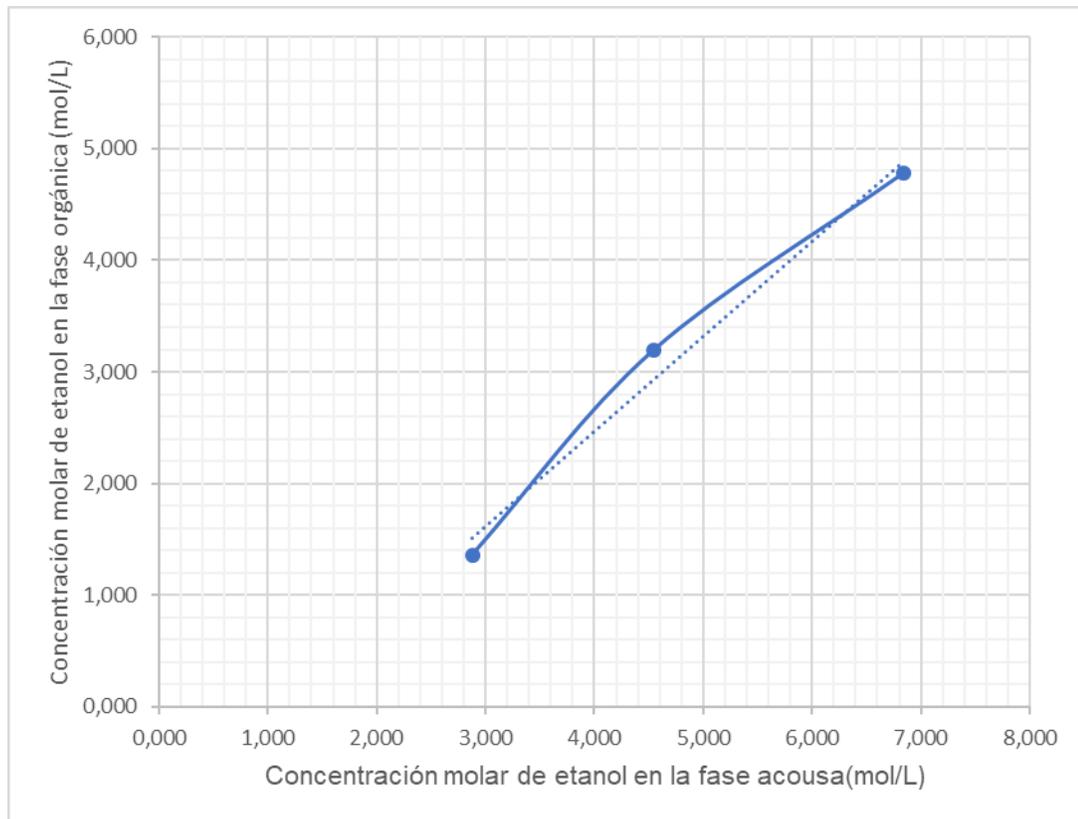
Fuente: elaboración propia.

Tabla XXXV. **Información de los valores de la concentración molar de etanol en la fase acuosa respecto a la concentración molar de etanol en la fase orgánica**

Punto para líneas de enlace	Concentración molar de etanol en la fase acuosa (mol/L)	Concentración molar de etanol en la fase orgánica (mol/L)	R
1	2,880	1,358	0,991
2	4,540	3,190	
3	6,841	4,785	

Fuente: elaboración propia.

Figura 22. **Relación lineal de los valores de la concentración molar de etanol en la fase acuosa respecto a la concentración molar de etanol en la fase orgánica**



Fuente: elaboración propia.

Para realizar el análisis de varianza (Anova) se utilizó una distribución de Fisher con un nivel de confianza del 95 %, para determinar si es una hipótesis nula o una hipótesis alternativa de la única hipótesis estadística evaluada mediante este método tomando en cuenta los siguientes criterios:

- Si la F es mayor a la F crítica, se acepta la hipótesis alternativa y se rechaza la hipótesis nula.

- Si la F es menor que la F crítica, se acepta la hipótesis nula y se rechaza la hipótesis alternativa.

Tabla XXXVI. **Resumen de Anova**

Análisis	F	F crítico	Hipótesis nula	Hipótesis alternativa
Los valores agregados de masa agregada de etanol y la cantidad de masa de la mezcla agua-aceite esencial de mandarina.	0,579	3,403	X	

Fuente: elaboración propia.

Para el análisis estadístico de dependencia lineal se utilizó una hoja electrónica donde el programa determinaba el valor de R^2 , al obtener el valor lineal se conoce como coeficiente de correlación, donde depende de su valor es el significado que tiene:

- Si el módulo de $R = 1$, es una relación lineal perfecta
- Si el módulo es $0,90 < R < 1$, es una relación lineal muy fuerte
- Si el módulo es $0,75 < R < 0,90$, es una relación lineal fuerte
- Si el módulo es $0,25 < R < 0,75$, es una relación lineal baja
- Si el módulo es $0 < R < 0,25$, es una relación muy baja

Si el signo de R es positivo significa que la relación es ascendente; y si el signo de R es negativo, significa que la relación es descendente.

Tabla XXXVII. **Resumen del análisis de la dependencia lineal**

Análisis		R	Conclusión
Valores de la fracción de etanol en la solución inicial respecto a la fracción másica de la fase	Acuosa	0,999	Muy fuerte
	Orgánica	1	Perfecta
Valores de la masa de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad respecto a la cantidad de masa en el etanol	Acuosa	0,880	Fuerte
	Orgánica	0,996	Muy fuerte
Valores de la concentración molar de etanol en la fase acuosa respecto a la concentración molar de etanol en la fase orgánica		0,991	Muy fuerte

Fuente: elaboración propia.

4. RESULTADOS

A continuación, se muestran los resultados del diseño experimental en relación a la curva de solubilidad del equilibrio ternario de aceite esencial de mandarina, agua y etanol.

Tabla XXXVIII. **Valores promedio de las fracciones másicas de los nueve puntos de la curva de solubilidad de cada componente**

Punto domo	Fracción másica aceite esencial de mandarina	Fracción másica agua	Fracción másica etanol
1	0,035	0,286	0,679
2	0,064	0,236	0,700
3	0,096	0,211	0,694
4	0,115	0,168	0,717
5	0,163	0,147	0,690
6	0,206	0,136	0,658
7	0,250	0,107	0,643
8	0,301	0,075	0,624
9	0,380	0,047	0,572

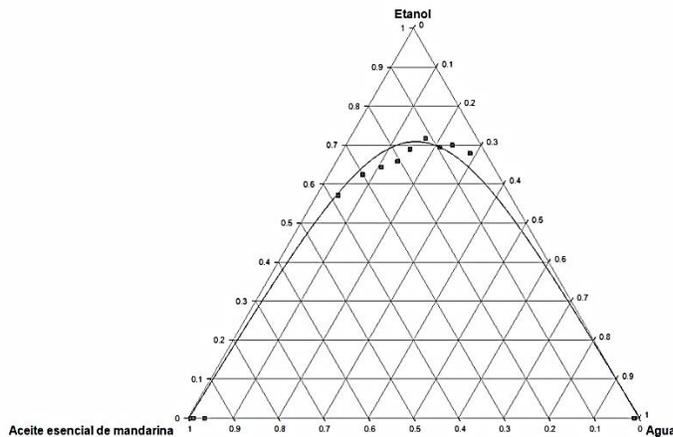
Fuente: elaboración propia.

Tabla XXXIX. **Valores de las desviaciones estándar de los nueve puntos de la curva de solubilidad de cada componente**

Punto domo	Fracción másica aceite esencial de mandarina	Fracción másica agua	Fracción másica etanol
1	0,005	0,006	0,011
2	0,001	0,017	0,018
3	0,013	0,004	0,016
4	0,008	0,006	0,014
5	0,018	0,009	0,026
6	0,013	0,010	0,022
7	0,043	0,009	0,051
8	0,028	0,006	0,034
9	0,007	0,003	0,010

Fuente: elaboración propia.

Figura 23. **Curva de solubilidad del equilibrio ternario de aceite esencial de mandarina, agua y etanol**



Fuente: elaboración propia.

Tabla XL. **Fracciones másicas de las fases acuosas que forman las líneas de enlace**

Puntos	Fracción másica aceite esencial de mandarina	Fracción másica agua	Fracción másica etanol
1	0,000	0,860	0,140
2	0,000	0,766	0,234
3	0,000	0,661	0,339

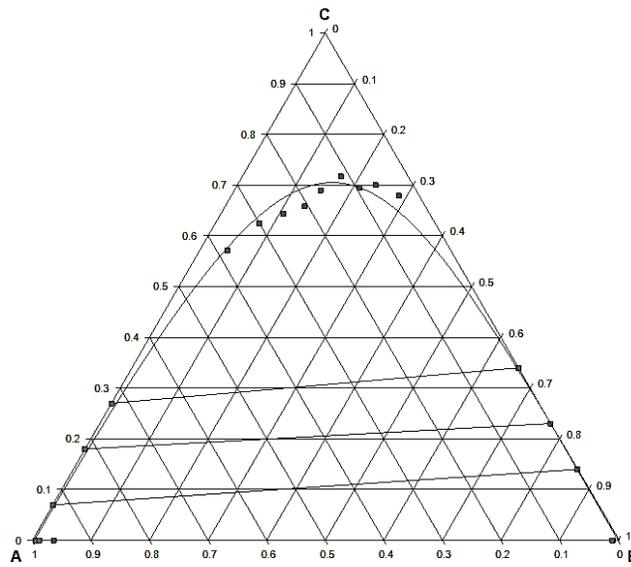
Fuente: elaboración propia.

Tabla XLI. **Fracciones másicas de las fases orgánicas que forman las líneas de enlace**

Puntos	Fracción másica aceite esencial de mandarina	Fracción másica agua	Fracción másica etanol
1	0,933	0,000	0,067
2	0,824	0,000	0,176
3	0,725	0,000	0,275

Fuente: elaboración propia.

Figura 24. **Curva de solubilidad del equilibrio ternario del aceite esencial de mandarina, agua y etanol con las líneas de enlace**



Fuente: elaboración propia.

Tabla XLII. **Coefficiente de reparto en función de los puntos debajo del domo**

Punto para líneas de enlace	Coefficiente de reparto
1	0,471
2	0,703
3	0,699

Fuente: elaboración propia.

Tabla XLIII. **Fracción másica de cada componente del punto de pliegue**

Fracción másica aceite esencial de mandarina	Fracción másica agua	Fracción másica etanol
0,14	0,15	0,71

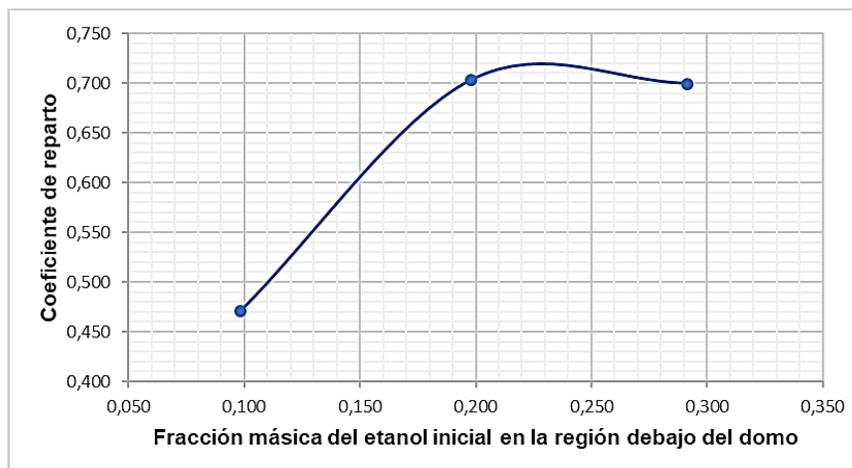
Fuente: elaboración propia.

Tabla XLIV. **Coefficiente de reparto en función de la fracción másica inicial del etanol en los puntos debajo del domo**

Punto para líneas de enlace	Fracción másica de etanol inicial	Coefficiente de reparto
1	0,099	0,471
2	0,198	0,703
3	0,292	0,699

Fuente: elaboración propia.

Figura 25. **Coefficiente de reparto en función de la fracción másica del etanol inicial en la región debajo del domo**



Fuente: elaboración propia.

Figura 26. **Modelo matemático del coeficiente de reparto en función de la fracción másica inicial del etanol en los puntos debajo del domo**

Color	Modelo matemático	R	Rango de validez
	$Ka = -12,246(X_{C,III,LE})^2 + 5,959(X_{C,III,LE}) + 0,03$	1	[0,099-0,292]

Fuente: elaboración propia.

Tabla XLV. **Prueba de hipótesis por análisis de varianza (Anova) de un solo factor**

Análisis	Conclusión
Los valores agregados de masa agregada de etanol y la cantidad de masa de la mezcla agua-aceite esencial de mandarina.	No tienen diferencia significativa.

Fuente: elaboración propia.

Tabla XLVI. **Prueba de hipótesis por dependencia lineal**

Análisis	Relación	
Valores de la fracción de etanol en la solución inicial respecto a la fracción másica de la fase	Acuosa	Muy fuerte
	Orgánica	Perfecta
Valores de la masa de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad respecto a la cantidad de masa en el etanol	Acuosa	Fuerte
	Orgánica	Muy fuerte
Valores de la concentración molar de etanol en la fase acuosa respecto a la concentración molar de etanol en la fase orgánica	Muy fuerte	

Fuente: elaboración propia.

5. INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS

La curva de solubilidad del equilibrio ternario del aceite esencial de mandarina, agua y etanol, cuya representación gráfica es la figura 23 se caracteriza que los trazos laterales, la curva, son cercanas a los ejes del triángulo de lectura de composiciones másicas de los diferentes componentes; esto es apreciable de una fracción másica en la solución ternaria de etanol de 0,0 hasta 0,4; indica así que las fases acuosas y orgánicas en este rango de fracción másica de etanol tiene un comportamiento cercano o igual a como si se tratara de un comportamiento binario; en el caso de la fase acuosa sería un sistema bifásico de agua y etanol; en el caso de la fase orgánica sería respecto al etanol y aceite de mandarina; esto ocasiona que se pueda suponer que en la fase orgánica se asuma que la cantidad de masa de agua es despreciable y la cantidad de masa de aceite esencial de mandarina es despreciable en la fase orgánica.

Esto se debe a la afinidad que tiene el agente extractor (etanol) de poder mezclarse totalmente en una solución binaria en cualquier otro componente, ya sea una solución binaria de aceite esencial de mandarina y etanol o una solución binaria de agua y etanol.

Además, la figura 23 indica que la curva de solubilidad del equilibrio derecho es muy cercana a cada lado del triángulo de la lectura de las composiciones de cada componente; esto indica que su comportamiento en ese sector de la curva de solubilidad es muy cercano al comportamiento de una solución binaria.

En el lado superior derecho del triángulo el comportamiento es representando por los ejes A-B; es decir, la solución binaria entre el agua y el etanol, en el lado superior izquierdo del triángulo el comportamiento es una solución binaria entre los ejes A-C; es decir, de aceite esencial de mandarina y etanol, con base en la figura 23 se establece que la curva de solubilidad es más cercana al eje A-B que al eje A-C.

Además, se observa que se forma un único diagrama dado que el agua y el aceite esencial de mandarina son totalmente inmiscibles; esto se pudo observar de mejor manera ya que en el momento de la obtención de los puntos iniciales en el eje A-B; es decir, el aceite esencial de mandarina y agua; de la curva de solubilidad del equilibrio ternario se pudo establecer que el valor del eje A tiende al valor 1,0,0 y del eje B tiende al 0,1,0; con base en esto se determina que sin importar la cantidad de agua o de aceite esencial de mandarina el resultada será una solución binaria inmiscible.

El sistema bifásico en un eje que tiene un comportamiento más cercano al domo es el sistema formado por agua y etanol que indica que estas aproximaciones serán más cercanas, esto se debe a que la facilidad de mezclar agua con etanol es levemente mayor a mezcla aceite de mandarina con etanol. Las fases acuosas y fases orgánicas mayores de 0,4 fracción de etanol, no deben tomarse en cuenta ya que refleja una desviación en la lectura de la curva de solubilidad respecto a cualquier sistema bifásico en un eje.

El cuarto punto obtenido está ubicado en este rango; ocasiona así que no se puede tomar en cuenta para la suposiciones anteriormente detalladas en la fase acuosa y orgánica; esto puede ser a que el tiempo de espera para la separación de cada fase debe ser mayor a 4 horas; un punto al estar ubicado en la región de inmiscibilidad por debajo de la curva de solubilidad formará dos

fases, el tiempo para la separación de estas fases depende de las fuerzas intermoleculares entre el agua y el aceite esencial de mandarina, la cantidad en masa de cada uno y la afinidad de etanol de distribuirse en cada fase, inicialmente en el punto 4, el cual tiene una desviación gráficamente significativa; la cantidad de aceite esencial de mandarina es aproximadamente 4 veces mayor a la cantidad de agua; mientras que el punto 3 la relación la cantidad de aceite esencial de mandarina es aproximadamente 1,5 veces mayor a la cantidad de agua y la afinidad de etanol con el agua respecto a la aceite esencial de mandarina.

Toma estos factores explica porque en el punto 4 la cantidad de 4 horas de espera para la separación de fases no es suficiente, y al momento de decantar la solución, se obtiene una fase orgánica y una fase acuosa cuya concentración másica de etanol es mayor a 0,4 que ocasion que su representación gráfica sea en la región donde no se puede asumir el comportamiento bifásico, ya sea del eje A-C para la fase orgánica o bien del eje B-C para la fase acuosa; por eso, ese punto se descarta para las líneas de enlace.

Al obtener las fases acuosas y fases orgánicas de formar soluciones ternarias cuyas fracciones másicas se encuentran por debajo de la región del domo; se establece mediante la figura 24 que las diferentes fracciones másicas de etanol en la fase acuosa son mayores a las diferentes másicas de etanol en la fase orgánica. Esto indica que al momento de formar una solución ternaria en la región que obtenga una misma fase, la fracción másica de agua será mayor a la fracción másica de aceite esencial de mandarina; también, establece que al momento de graficar puntos en la región de inmiscibilidad por debajo de la curva de solubilidad se obtendrán que las composiciones másicas de etanol en

las fases acuosas serán mayores a las composiciones másicas de etanol en las fases orgánicas.

Las líneas de enlace obtenidos de tres puntos, muestran pendientes no iguales pero similares entre sí; es por eso que al momento de buscar un punto en común se debe ampliar del lado izquierdo considerablemente para determinar el punto de pliegue; si las líneas llegasen a presentar la misma pendiente, significa que son rectas paralelas; eso ocasionaría que nunca se obtenga un punto de intersección en el espacio, dificultando así la obtención del punto de pliegue mediante forma gráfica.

Además, se observa, con base en la figura 24, que las 3 líneas de enlace intersecan el punto en el cual fueron formadas las soluciones ternarias en la región debajo del domo, donde la más exacta es la línea del punto 2.

La fracción másica del aceite esencial de mandarina, agua y etanol, del punto de pliegue es de 0,14, 0,15 y 0,71, respectivamente; dado que la fracción másica de agua es mayor a la fracción másica de aceite esencial de mandarina, se determina que la fase acuosa es más representativa que la fase orgánica.

El coeficiente de reparto indica la relación entre las concentraciones molares entre la fase orgánica y la fase acuosa, los valores obtenidos son: 0,471, 0,703 y 0,699 para los puntos 1,2,3, respectivamente; para un rango de validez de 0,099 a 0,292 en la fracción másica inicial del etanol en los puntos debajo de la curva de solubilidad, se determina que el valor más alto de coeficiente de reparto es el punto 2; lo cual coincide con que la línea de enlace del punto 2 es la más exacta de intersecar a su punto inicial de solución ternaria debajo de la curva de solubilidad.

Con base en los valores obtenidos, se establece que el coeficiente no es constante en las líneas de enlace; además, que la curva puede tomar una representación gráfica de polinómica de grado 2, cuyo modelo es $Ka = -12,246(X_{c,III,LE})^2 + 5,959(X_{c,III,LE}) + 0,03$ y su rango de validez es 0,099 a 0,292. En base a la gráfica se estima que puede existir un máximo valor de coeficiente de reparto entre los valores de $X_{c,III,LE}$ de 0,210 - 0,240. En base a los valores tomados del coeficiente de reparto, donde todos estos son menores a 1, indica que el etanol en un sistema ternario tiene mayor afinidad a mezclarse con el agua que con el aceite esencial de mandarina,

En base a la prueba de hipótesis mediante el análisis de varianza por Anova, determina que no existe una diferencia significativa, al momento de comparar la masa de solución binaria inicial para formar la curva de solubilidad respecto a la cantidad agregada de etanol; indica que la cantidad de masa agregada de etanol no depende estadística de la cantidad inicial de solución binaria, eso concuerda con que la curva de solubilidad del equilibrio ternario depende únicamente de la afinidad de los tres componentes, dado que la interacción química no se puede calcular mediante modelos matemáticos con una precisión exacta; se debe tomar en cuenta el grado de pureza de cada componente esto afecta la interacción, su cantidad de masa por componente, condiciones del ambiente y condiciones externas, como agitación, corriente de aire, entre otras.

Con base en la prueba de hipótesis mediante el coeficiente de correlación, la fracción de etanol en la solución inicial respecto a la fracción másica de la fase acuosa y orgánica tienen una relación muy fuerte y perfecta, respectivamente; además, indica de la masa de etanol en la región debajo de la curva de solubilidad respecto a la cantidad de masa en el etanol en la fase acuosa y orgánica tienen una relación fuerte y muy fuerte respectivamente,

indica que las variables anteriormente descritas tienen una proporción directa de su cantidad respecto a la otra variable; con base en esta información se podrán establecer tendencias de los valores que podrían tomar las variables anteriormente descritas; esto se podrá hacer mediante modelos matemáticos de funciones de la línea recta.

Se determina que la relación de la concentración molar de etanol en la fase acuosa respecto a la concentración molar de etanol en la fase orgánica muy fuerte; esta relación indica que estas variables son proporcionales entre sí, pero esta misma relación es el coeficiente de reparto, pero se utiliza un modelo de polinomio de grado 2 dado que su coeficiente de correlación es 1, significa que su relación perfecta; se estableció así que el modelo que representa de mejor manera al coeficiente de reparto es el de grado 2.

En la parte de apéndices, en el último, se muestra un manual en relación a la práctica del Laboratorio de Físicoquímica 2, de la Escuela de Ingeniería Química; esto con el objetivo de plasmar el diseño experimental con un fin didáctico a los estudiantes de dicho curso; además de ejemplificar cada sección para alcanzar paso a paso para la obtención de datos o muestras necesarios de este diseño experimental.

También, se establecen los resultados que se deben reportar por parte de los estudiantes del curso de con el fin de Laboratorio de Físicoquímica 2, de la Escuela de Ingeniería Química, con la finalidad de alcanzar los objetivos de este estudio experimental; también se hace la recomendación de la adquisición del equipo de cromatografía para ampliar los estudios de investigación y tener mejor proyección del alcance didáctico.

Los errores de dicho estudio se dividen en cuatro grupos: el error humano, error por contaminación, el proceso de decantación y asumir condiciones en la fase orgánica y en la fase acuosa.

El error humano es una cualidad de cada persona, en toda medición siempre estará presente; este error está vinculado en todo el equipo que se utilizó, en el momento de medir datos en la cristalería, en el cromatógrafo, en la calibración y los datos de la balanza, en el método gráfico del punto de pliegue y todo dato obtenido de cualquier medición.

El error por contaminación existe cuando no se tiene la certeza del grado de pureza de los reactivos, el caso de agua depende del método que se uso para su obtención; el aceite esencial de mandarina como tal es una mezcla de componentes; sin embargo, cada componente no es una proporción fija y cada componente debe estar ubicado en un rango que genera que en cada lote de aceite esencia de mandarina no se cuenta con la misma proporción de sus componentes, y el etanol también depende del método de extracción; al momento de obtener los valores de concentración de etanol en la fase acuosa por medio cromatógrafo se determina que existe presencia de metanol, por lo cual se establece que el etanol utilizado no era una solución pura.

Si los componentes no son puros al momento de utilizarse, significa que en la solución hay compuestos que no son de interés en el diseño experimental, lo cual ocasiona que la interacción química obtenida final tenga una desviación a la que debería tomar si los componentes fueran puros; lo cual ocasiona una variación de los datos obtenidos; debido a que este diseño experimental se basa en la interacción química de cada componente, ya sea en solución binaria o solución ternaria.

El proceso de decantación puede presentar dos tipos de errores: el primero es que el tiempo de espera para proceder a decantar sea menor al esperado, ocasionando que presenten fases no correctas en su totalidad, como fue el caso del punto 4 y el segundo es error en la inspección visual, dado que la cantidad a separar, que es la fase acuosa del punto, depende de la validación que se mediante inspección visual.

Al momento de asumir que en la fase orgánica no existe cantidad de masa de agua y que en la fase acuosa no existe cantidad de masa de aceite esencial de mandarina, genera un error gráfico en el momento de calcular los puntos de cada fase y así mismo en las líneas de enlace; donde, a su vez, también, genera error en el punto de pliegue; también, genera error en el cálculo del punto de pliegue; sin embargo, se toma que esta desviación o error no es significativo dado que su proximidad de la curva de solubilidad del equilibrio ternario con los ejes A-C, B-C es cercana.

CONCLUSIONES

1. Se obtuvo la curva de solubilidad del equilibrio ternario de aceite esencial de mandarina, agua y etanol, las líneas de enlace de tres puntos y el punto de pliegue, a condiciones ambientales.
2. Los valores de la fracción másica del aceite esencial de mandarina, agua y etanol, de las fases acuosas fueron: 0,000, 0,860 y 0,140, respectivamente para el punto 1; 0,000, 0,766 y 0,234, respectivamente para el punto 2; 0,000, 0,661 y 0,399, respectivamente para el punto 3, suponiendo con base en el diagrama ternario que en la fase acuosa la cantidad del aceite esencial de mandarina es despreciable.
3. Los valores de la fracción másica del aceite esencial de mandarina, agua y etanol, de las fases orgánicas fueron: 0,933, 0,000 y 0,067, respectivamente para el punto 1; 0,824, 0,000 y 0,176, respectivamente para el punto 2; 0,725, 0,000 y 0,275, respectivamente para el punto 3, suponiendo con base en el diagrama ternario que en la fase orgánica la cantidad del agua es despreciable.
4. Las pendientes de las líneas de enlace pueden ser similares, pero nunca iguales, por que si fueran iguales se volverían rectas paralelas ocasionado así que nunca se intercepten, dificultando la obtención del punto de pliegue de forma gráfica.
5. La fracción másica del aceite esencial de mandarina, agua y etanol, del punto de pliegue es de 0,14, 0,15 y 0,71 respectivamente.

6. Se establece que la relación entre coeficiente de reparto y en función de la fracción másica del etanol en la composición inicial en la región debajo del domo está dado por $K_a = 12,246(X_{C,III,LE})^2 + 5,959(X_{C,III,LE}) + 0,03$ en un rango de validez de 0,990 a 0,292.

7. El coeficiente de reparto es de: 0,471, 0,703 y 0,699, para un valor de fracción másica del etanol en la composición inicial de: 0,099, 0,198 y 0,292, indicando así que el etanol en una solución ternaria tiene mayor afinidad de mezclarse con el agua que con el aceite esencial de mandarina.

RECOMENDACIONES

1. Realizar el estudio con diferentes aceites esenciales, que cumplan las condiciones de miscibilidad, para determinar la capacidad extractora del agente extractor de los diferentes aceites esenciales, con fines de investigación y de enseñanza con el fin de conocer diferentes extractores para diferentes aceites esenciales.
2. Efectuar la curva de solubilidad del equilibrio ternario con otro tipo de solventes, para evaluar con cual solvente se determina el mayor punto de pliegue, para así determinar que punto de pliegue es mayor en la fracción molar del aceite esencial para obtener su mayor extracción.
3. Adquirir el equipo necesario, es decir un cromatógrafo de gases con detector de Ionización, por parte de la Facultad de Ingeniería, con el fin de enseñar a los estudiantes más experimentos con esta herramienta, de estudios tecnológicos y didácticos.
4. Utilizar otros componentes como agente extractor como: hexano, metanol, entre otros, con el fin de utilizar un método alternativo ya conocido y comparar resultados.
5. Utilizar centrifugación al momento de la obtención de la fase acuosa y orgánica de los puntos ubicados en la región de inmiscibilidad.

BIBLIOGRAFÍA

1. ALDANA, Pablo Andres. *Guía audiovisual de experimentos de fisicoquímica Evaluación de la cinética de reacción del sistema azul de metileno – ácido ascórbico mediante una técnica espectrofotométrica implementada en la práctica del curso de Laboratorio de Fisicoquímica de la Escuela de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos de Guatemala*. Trabajo de graduación de Ing. Química. Facultad de Ingeniería. Universidad de San Carlos de Guatemala, 2014. 116 p.
2. ATKINS, Peter. *Química física*. 6a ed. España: Ediciones Omega. S.A., 1999. 205 p.
3. CHRISTIAN, Gary. *Química analítica*. 6a ed. México: McGraw-Hill, 2009. 201 p.
4. DOMÍNGUEZ, Marco. *Diseño de un espectrofotómetro de dos mediciones simultáneas para recubrimientos inhomogéneos*. Trabajo de graduación de Ing. Química. Facultad de Ingeniería. Universidad de San Carlos de Guatemala, 2016. 187 p.
5. LEVINE, Ira. *Fisicoquímica*. 6ª ed. Estados Unidos: McGraw-Hill, 2014. 435 p.

6. MILTON, J. Susan. *Probabilidad y estadística con aplicaciones para ingeniería a ciencias computacionales*. 4a ed. México: McGraw-Hill, 2004. 804 p.
7. PAJARITO, Marco. *Evaluación de un método experimental de generación de datos para el estudio del sistema ternario isopropanol-hexano-agua en equilibrio líquido de inmiscibilidad a tres temperaturas y a 640 mm de Hg*. Trabajo de graduación de Ing. Química. Facultad de Ingeniería. Universidad de San Carlos de Guatemala, 2013. 160 p.
8. PRADO C., Ramiro A. *Evaluación del efecto de la concentración de cloruro de sodio en el sistema cuaternario agua-glicerol-1-butanol-cloruro de sodio sobre la distribución de equilibrio del glicerol para determinar la factibilidad de un proceso alternativo de recuperación de glicerina en una planta de saponificación*. Trabajo de graduación de Ing. Química. Facultad de Ingeniería. Universidad de San Carlos de Guatemala, 2013. 204 p.
9. SERRANO, Wendy. *Estudio experimental para la obtención de datos a nivel de laboratorio del sistema ternario isopropanol-biodiesel-agua en equilibrio líquido-líquido a temperatura ambiente y 640 mm Hg*. Trabajo de graduación de Ing. Química. Facultad de Ingeniería. Universidad de San Carlos de Guatemala, 2011. 140 p.

APÉNDICES

Apéndice 1. Reactivos a utilizar

Aceite esencial de mandarina a la derecha, en medio el alcohol absoluto y a la izquierda el agua desmineralizada



Fuente: elaboración propia.

Apéndice 2. Equipo para pesar. La balanza utilizada pesando algún componente



Fuente: elaboración propia.

Apéndice 3. **Soluciones binarias de aceite esencial de mandarina y agua**

De izquierda a derecha, de 0,1 a 0,9, en composición másica en función del aceite esencial de mandarina



Fuente: elaboración propia.

Apéndice 4. **Equipo para formar la curva de solubilidad**



Fuente: elaboración propia.

Apéndice 5. **Proceso de agregación del etanol en la solución binaria para obtener la curva de solubilidad del equilibrio ternario**



Fuente: elaboración propia.

Apéndice 6. **Equipo y cristalería para la obtención de los puntos iniciales en el eje inferior del domo**



Fuente: elaboración propia.

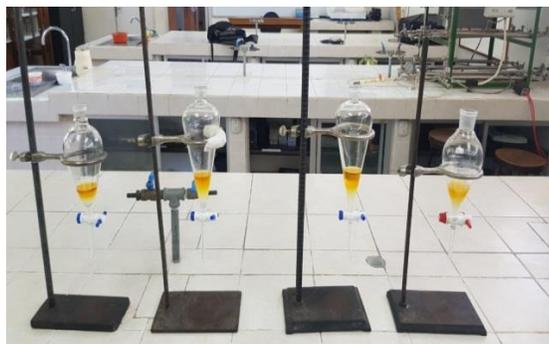
Apéndice 7. **Equipo de separación de líquidos por decantación**



Fuente: elaboración propia.

Apéndice 8. **Soluciones ternarias iniciales ubicadas en la región debajo de la curva de solubilidad**

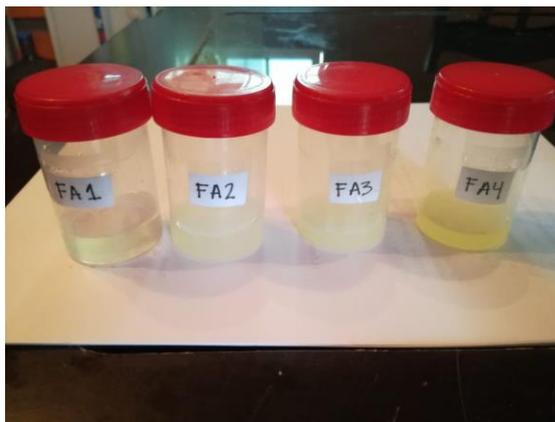
La primera imagen es únicamente con aceite esencial de mandarina, la segunda es el aceite esencial de mandarina con alcohol y la tercera ya es la solución ternaria: aceite esencial de mandarina, alcohol y agua desmineralizada



Fuente: elaboración propia.

Apéndice 9. Obtención de fases orgánicas y fases acuosas

En la primera fila de imágenes se observa las fases obtenidas, es decir la fase orgánica y fase acuosa de los cuatro puntos seleccionados y en la segunda fila de imágenes se muestra las soluciones de fase acuosas y empacada para el análisis de cromatografía de gases



Fuente: elaboración propia.

Apéndice 10. Muestra de cálculo

- Determinación de la masa de cualquier componente

$$m_i = m_T - m_L \quad \text{Ecuación No.1}$$

Donde:

- m_i : masa del componente (A: Aceite esencial de mandarina, B: Agua) (g).
- m_T : masa de total (g).
- m_L : masa tarada (g).

Ejemplo:

Determinar la masa del aceite esencial de mandarina y del agua si las masas totales son 0,649g y 4,615g respectivamente. La masa tarada para cada componente es 0,0035g y 0,001g respectivamente.

$$m_A = 0,649 - 0,0035 = 0,646g$$

$$m_B = 4,615 - 0,001 = 4,614g$$

- Determinación de la masa total de una solución binaria

$$m_{T,\pi} = m_A + m_B \quad \text{Ecuación No.2}$$

Continuación del apéndice 10.

Donde:

- $m_{T,\pi}$: masa total de una solución binaria (g)
- m_A : masa de aceite esencial de mandarina (g)
- m_B : masa de agua (g)

Ejemplo:

Determinar la masa total de la solución binaria si la masa de aceite esencial de mandarina es de 0,646g y la masa de agua es de 4,614g.

$$m_{T,\pi} = 0,646 + 4,614 = 5,260g$$

- Fracción másica del i-enésimo compuesto de la solución binaria

$$X_{i,II} = \frac{m_i}{m_{T,\pi}} \quad \text{Ecuación No.3}$$

Donde:

- $X_{i,II}$: fracción másica del i-enésimo compuesto en solución binaria
- m_i : masa del componente i (g)
- $m_{T,\pi}$: masa total de la solución binaria (g)

Ejemplo: determinar la fracción másica del aceite esencial de mandarina de la solución binaria si la masa de aceite es 0,646g y la masa total de la solución binaria es 5,260g.

Continuación del apéndice 10.

$$X_{A,II} = \frac{0,646 \text{ g}}{5,260 \text{ g}} = 0,123$$

- Determinación de la fracción másica del complemento

$$\sum_{i=1}^n X_i = 1 \quad \text{Ecuación No.4}$$

Para una solución binaria:

$$X_{A,\pi} + X_{B,\pi} = 1 \quad \text{Ecuación No.5}$$

Donde:

- $X_{A,\pi}$: fracción másica del aceite esencial de mandarina en solución binaria.
- $X_{B,\pi}$: fracción másica del agua en solución binaria.

Ejemplo:

Determinar la fracción másica del agua si la fracción másica del aceite esencial de mandarina es 0,123

$$X_{B,\pi} = 1 - 0,123 = 0,877$$

- Cantidad en masa de etanol a la solución ternaria al hacer la curva de solubilidad

Continuación del apéndice 10.

$$m_{T,III} = m_c + m_{T,II}$$

Ecuación No.6

Donde:

- $m_{T,III}$: masa total de la solución ternaria (g)
- m_c : masa de etanol (g)
- $m_{T,II}$: masa total de la solución binaria (g)

Ejemplo:

Determinar la masa de etanol en la solución ternaria si la masa total de la solución ternaria es 15,654g y la masa total de la solución binaria es 5,260g.

$$m_c = 15,654 - 5,260 = 10,394g$$

- Fracción másica del i-enésimo compuesto de la solución ternaria

$$X_{i,III} = \frac{m_i}{m_{T,III}}$$

Ecuación No.7

Donde:

- $X_{i,III}$: fracción másica del i-enésimo compuesto de la solución ternaria
- m_i : masa del componente (g)
- $m_{T,III}$: masa total de la solución ternaria (g)

Continuación del apéndice 10.

Ejemplo:

Determinar la fracción másica del aceite esencial del mandarina en la solución ternaria si su masa es de 0,646g y la masa total de la solución ternaria 15,654g.

$$X_{A,III} = \frac{0,646 \text{ g}}{15,654 \text{ g}} = 0,041$$

- Lectura del diagrama ternario

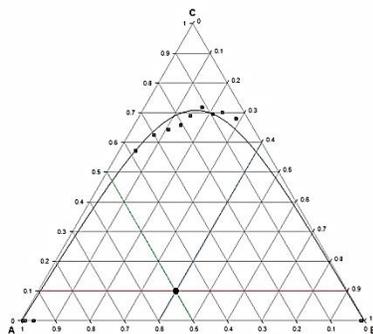
Ejemplo:

Ubicar el punto de la mezcla ternaria que contiene 50 % de aceite esencial de mandarina, 40 % de agua y 10 % de etanol.

$$X_{A,III} = 0,5$$

$$X_{B,III} = 0,4$$

$$X_{C,III} = 0,1$$



Continuación del apéndice 10.

- Determinación de la cantidad del i-énimo compuesto ternario a partir de un punto en la región debajo de la curva de solubilidad

$$m_{i,LE} = m_{T,III,LE} * X_i \quad \text{Ecuación No.8}$$

Donde:

- $m_{T,III,LE}$: masa total de la solución ternaria en la línea de enlace (g)
- X_i : fracción másica del compuesto i en solución ternaria
- $m_{i,LE}$: masa del compuesto i en la línea de enlace (g)

Ejemplo:

Determinar la cantidad en masa del aceite de mandarina, agua y etanol en la línea de enlace si la masa total de la solución ternaria en la línea de enlace es 25,724 g y la fracción másica de aceite esencial, agua y etanol es 0,499, 0,402 y 0,099, respectivamente.

$$m_{A,LE} = 25,724g * 0,499 = 12,83g$$

$$m_{B,LE} = 25,724g * 0,402 = 10,36g$$

$$m_{C,LE} = 25,724g * 0,099 = 2,535g$$

- Determinación de la masa de la fase orgánica y fase acuosa

$$m_{f,ac} + m_{f,or} = m_{T,III,LE} \quad \text{Ecuación No.9}$$

$$m_{f,or} = m_{T,III,LE} - m_{f,ac} \quad \text{Ecuación No.10}$$

Continuación del apéndice 10.

Donde:

- $m_{f,ac}$: masa de la fase acuosa (g)
- $m_{f,or}$: masa de la fase orgánica (g)
- $m_{T,III,LE}$: masa total de la solución ternaria en la línea de enlace (g)

Ejemplo:

Determinar la cantidad de masa de la fase orgánica si la masa total de la línea de enlace es 25,724g y la masa de la fase acuosa es 11,153g.

$$m_{f,or} = 25,724g - 11,153g = 14,571g$$

- Determinación del volumen de la solución

$$V_{f,ac} = LHR$$

Ecuación No.11

Donde:

- $V_{f,ac}$: volumen de la fase acuosa (mL)
- LHR: lectura de la probeta (mL)

Ejemplo:

Determinar el volumen de la fase acuosa si la probeta tiene una lectura de 11,800 mL.

Continuación del apéndice 10.

$$V_{f,ac} = 11,800 \text{ mL}$$

$$V_{f,or} = LHR$$

Ecuación No.12

Donde:

- $V_{f,or}$: volumen de la fase orgánica (ml)
- LHR: lectura de la probeta (15,500ml)

Ejemplo:

Determinar el volumen de la fase acuosa si la probeta tiene una lectura de 15,500 mL.

$$V_{f,or} = 15,500 \text{ mL}$$

- Determinación de la cantidad en masa de etanol en la fase acuosa

$$m_{c,f,ac} = \frac{\%(P/V)_{c,f,ac}}{100 \text{ ml}} * V_{f,ac}$$

Ecuación No.13

Donde:

- $m_{c,f,ac}$: masa de etanol en la fase acuosa (g).
- $\%(P/V)_{c,f,ac}$: porcentaje P/v del etanol en la fase acuosa (g), gramos en 100 mL de solución.
- $V_{f,ac}$: volumen de la fase acuosa (ml).

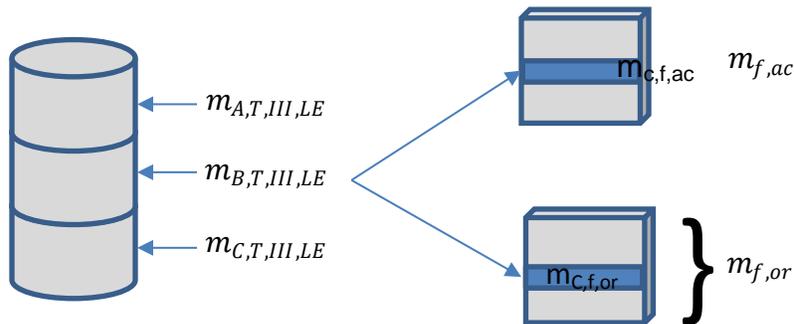
Continuación del apéndice 10.

Ejemplo:

Determinar la cantidad de masa de etanol en la fase acuosa si el porcentaje P/V es 13,27g y el volumen de la fase acuosa es 11,800ml.

$$m_{c,f,ac} = \frac{13,27 \text{ g}}{100 \text{ ml}} * 11,800 \text{ ml} = 1,566 \text{ g}$$

Figura A1. **Determinación de la cantidad de etanol en ambas fases y la fracción másica de etanol en la fase orgánica**



Por balance de masa:

$$m_{C,T,III,LE} = m_{C,f,ac} + m_{C,f,or} \quad \text{Ecuación No.14}$$

$$m_{C,f,or} = m_{C,T,III,LE} - m_{C,f,ac} \quad \text{Ecuación No.15}$$

Donde:

- $m_{C,T,III,LE}$: masa total de etanol en la solución ternaria en línea de enlace (g)

Continuación del apéndice 10.

- $m_{C,f,ac}$: masa de etanol en la fase acuosa (g)
- $m_{C,f,or}$: masa de etanol en la fase orgánica (g)

Ejemplo:

Determinar la cantidad en masa de etanol en la fase orgánica si la masa total de etanol en la solución ternaria en la línea de enlace es 2,535g y la masa de etanol en la fase acuosa es 1,566g.

$$m_{C,f,or} = 2,535g - 1,566g = 0,969g$$

- Fracción másica de etanol en la fase orgánica

$$X_{C,f,or} = \frac{m_{C,f,or}}{m_{f,or}}$$

Ecuación No.16

Donde:

- $X_{C,f,or}$: fracción másica de etanol en fase orgánica
- $m_{C,f,or}$: masa de etanol en la fase orgánica (g)
- $m_{f,or}$: masa de la fase orgánica (g)

Ejemplo:

Determinar la fracción másica de etanol en la fase orgánica si la masa de etanol en la fase orgánica es 0,969 g y la masa total de la fase orgánica es 14,571 g.

Continuación del apéndice 10.

$$X_{C,f,or} = \frac{0,969g}{14,571g} = 0,067$$

- Concentración molar de etanol en fase orgánica

$$M_{C,f,or} = \frac{m_{C,f,or}}{PM_C * V_{f,or}} \quad \text{Ecuación No.17}$$

Donde:

- $M_{C,f,or}$: concentración molar de etanol en fase orgánica (mol/L)
- $m_{C,f,or}$: masa de etanol en fase orgánica (g)
- PM_C : peso molecular de etanol (46,07g/mol)
- $V_{f,or}$: volumen de la fase orgánica (L)

Ejemplo:

Determinar la concentración molar de etanol en la fase orgánica si su masa en dicha fase es 0,969g y el volumen de la fase orgánica es 0,0155L.

$$M_{C,f,or} = \frac{0,969g}{46,07 \frac{g}{mol} * 0,0155L} = 1,357 \frac{mol}{L}$$

Concentración molar de etanol fase acuosa

$$M_{C,f,ac} = \frac{m_{C,f,ac}}{PM_C * V_{f,ac}} \quad \text{Ecuación No.18}$$

Continuación del apéndice 10.

Donde:

- $M_{C,f,ac}$: concentración molar de etanol en fase acuosa (mol/L)
- $m_{C,f,ac}$: masa de etanol en fase acuosa (g)
- PM_C : peso molecular de etanol (46,07g/mol)
- $V_{f,ac}$: volumen de la fase acuosa (L)

Ejemplo:

Determinar la concentración molar de etanol en la fase acuosa si su masa en dicha fase es 1,566g y el volumen de la fase acuosa es 0,0118L.

$$M_{C,f,ac} = \frac{1,566g}{46,07 \frac{g}{mol} * 0,0118L} = 2,880 \frac{mol}{L}$$

- Determinación de la cantidad en masa de agua en fase acuosa

$$m_{B,f,ac} = m_{f,ac} - m_{C,f,ac}$$

Ecuación No.19

Donde:

- $m_{B,f,ac}$: masa de agua en la fase acuosa (g)
- $m_{f,ac}$: masa de la fase acuosa (g)
- $m_{C,f,ac}$: masa de etanol en la fase acuosa (g)

Continuación del apéndice 10.

Ejemplo:

Determinar la masa de agua en la fase acuosa si la masa de la fase acuosa es 11,153g y la masa de etanol en la fase acuosa es 1,566g.

$$m_{B,f,ac} = 11,153g - 1,566g = 9,587g$$

- Determinación de la fracción másica de agua en la fase acuosa

$$X_{B,f,ac} = \frac{m_{B,f,ac}}{m_{f,ac}}$$

Ecuación No. 20

Donde:

- $X_{B,f,ac}$: fracción másica de agua en la fase acuosa
- $m_{B,f,ac}$: masa de agua en la fase acuosa (g)
- $m_{f,ac}$: masa de la fase acuosa (g)

Ejemplo:

Determinar la fracción másica del agua en la fase acuosa si la masa de agua en dicha fase es 9,587g y la masa de la fase acuosa es 11,153g.

$$X_{B,f,ac} = \frac{9,587g}{11,153g} = 0,860$$

- Determinación de la masa de aceite esencial de mandarina en la fase orgánica

Continuación del apéndice 10.

$$m_{A,f,or} = m_{f,or} - m_{C,f,or}$$

Ecuación No.21

Donde:

- $m_{A,f,or}$: masa de aceite esencial de mandarina en la fase orgánica (g).
- $m_{f,ac}$: masa de la fase orgánica (g)
- $m_{C,f,ac}$: masa de etanol en la fase acuosa (g)

Ejemplo:

Determinar la masa de aceite esencial de mandarina en la fase orgánica si la masa de la fase orgánica es 14,571g y la masa de etanol en la fase orgánica es 0,969g.

$$m_{A,f,ac} = 14,571g - 0,969g = 13,602g$$

- Determinación de la fracción másica de aceite esencial en fase orgánica

$$X_{A,f,or} = \frac{m_{A,f,or}}{m_{f,or}}$$

Ecuación No.22

Donde:

- $X_{A,f,or}$: fracción másica de aceite esencial de mandarina en la fase orgánica.

Continuación del apéndice 10.

- $M_{A,f,or}$: masa de aceite esencial de mandarina en la fase orgánica (g).
- $m_{f,or}$: masa de la fase orgánica (g).

Ejemplo:

Determinar la fracción másica de aceite esencial de mandarina en la fase orgánica si la masa de aceite esencial de mandarina en dicha fase es 13,602g y la masa de la fase orgánica es 14,751g.

$$X_{B,f,ac} = \frac{13,602g}{14,571g} = 0,933$$

- Líneas de enlace

Ejemplo:

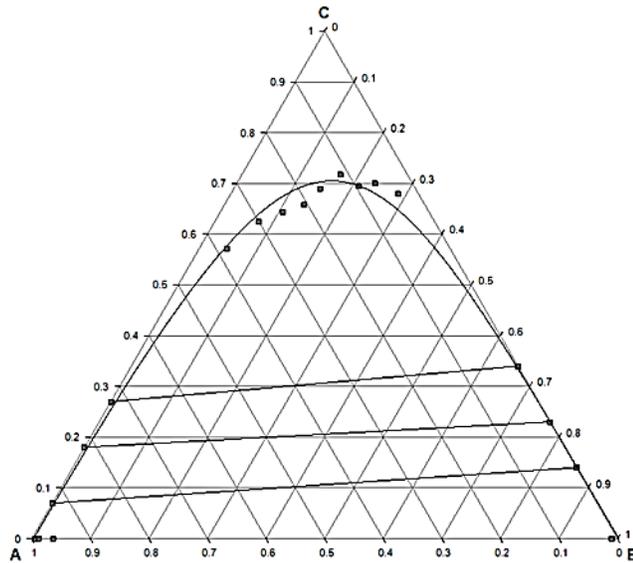
Trazar las líneas de enlace dentro del domo con los siguientes puntos:

Tabla A1. Líneas de enlace

	Fase acuosa			Fase orgánica		
	X_A	X_B	X_C	X_A	X_B	X_C
	0,00	0,86	0,14	0,93	0,00	0,07
	0,00	0,77	0,23	0,82	0,00	0,18
	0,00	0,66	0,34	0,73	0,00	0,27

Nota: el cuarto punto no se ha tomó debido a que genera una desviación significativa para el cálculo.

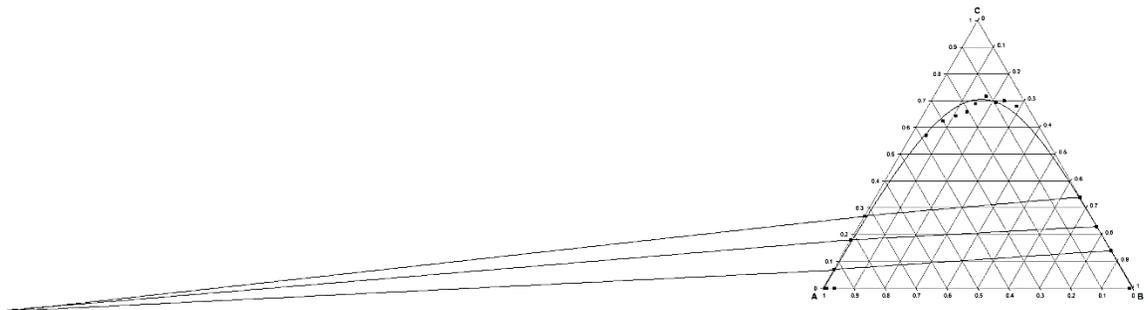
Continuación del apéndice 10.



- Punto de pliegue

Ejemplo:

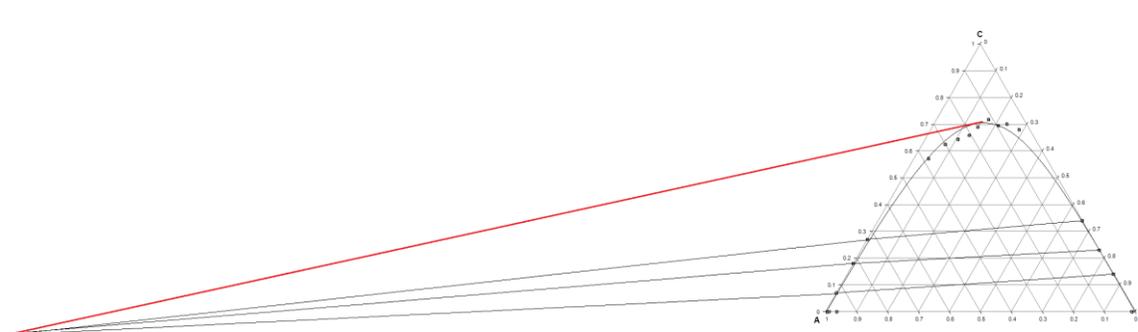
Encontrar y determinar mediante las líneas de enlace el punto de pliegue del sistema en equilibrio ternario Aceite de mandarin.



Continuación del apéndice 10.

a – Agua – Etanol.

Al trazar una línea desde el punto de unión de las líneas de enlace hasta el máximo del domo, se obtiene:



$$X_{A,III} = 0,14$$

$$X_{B,III} = 0,15$$

$$X_{C,III} = 0,71$$

- Determinación del coeficiente de reparto de línea de enlace

$$k = \frac{M_{C,f,or}}{M_{C,f,ac}}$$

Ecuación No.23

Donde:

- k: coeficiente de reparto
- $M_{C,f,or}$: concentración molar de etanol en la fase orgánica (mol/L)
- $M_{C,f,ac}$: concentración molar de etanol en la fase acuosa (mol/L)

Continuación del apéndice 10.

Ejemplo:

Determinar el coeficiente de reparto de la línea de enlace si la concentración molar de etanol en la fase orgánica y fase acuosa son 1,358 y 2,880 mol/L respectivamente.

$$k = \frac{1,358 \text{ mol/L}}{2,880 \text{ mol/L}} = 0,471$$

- Media

$$\bar{x} = \frac{\sum_{I}^N X_I}{N}$$

Ecuación No. 24

Donde:

- \bar{x} = media.
- $\sum_{I}^N X_I$ = sumatoria de valores.
- N = número de datos

Ejemplo:

Determinar la media de la primera corrida de la masa del aceite esencial de mandarina si los datos son: 0,646 g, 0,460 g y 0,545 g.

$$x = \frac{0,646 + 0,460 + 0,545}{3} = 0,550 \text{ g}$$

Continuación del apéndice 10.

- Desviación estándar

$$s = \sqrt{\frac{\sum(x_i - \bar{x})^2}{N}}$$

Ecuación No. 25

Donde:

- s = desviación estándar
- \bar{x} = valor promedio.
- x_i = valor de la muestra.
- N = número de datos.

Ejemplo:

Determinar la desviación estándar de la primera corrida de la masa del aceite esencial de mandarina si los datos son: 0,646 g, 0,460 g y 0,545 g. Cuya media es 0,550 g.

$$s = \sqrt{\frac{(0,646 - 0,550)^2 + (0,460 - 0,550)^2 + (0,545 - 0,550)^2}{3}} = 0,760 \text{ g}$$

- Varianza

$$s^2 = \frac{\sum(x_i - \bar{x})^2}{N}$$

Ecuación No. 26

Continuación del apéndice 10.

Donde:

- S^2 = varianza
- \bar{x} = valor promedio.
- x_i = valor de la muestra.
- N = número de datos.

Ejemplo:

Determinar la varianza de la primera corrida de la masa del aceite esencial de mandarina si la desviación estándar es 0,760 g

$$s^2 = (0,760 \text{ g})^2 = 0,006 \text{ g}$$

- Tabla Anova

A continuación, se muestran las ecuaciones a utilizar para usarse en este análisis.

Tabla A2. **Tabla anova**

Fuentes	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Cuadrados medios	F (prueba)	Fcrítica
Tratamientos	SST	k-1	MST	MST/MSE	F(α , k-1, n-1)
Error	SSE	n-k	MSE		
Total	SStotal	n-1			

Fuente: elaboración propia.

Continuación del apéndice 10.

Diferencia entre tratamientos:

$$SST = \sum_{i=1}^k \frac{x_i}{n_1} - CM \quad \text{Ecuación No. 27}$$

Corrección de media:

$$CM = \frac{1}{n} (\sum_i \sum_j x_{ij})^2 \quad \text{Ecuación No. 28}$$

Varianza total:

$$SStotal = \left(\sum_{i=1}^k \frac{x_i}{n_1} \right) - CM \quad \text{Ecuación No. 29}$$

Diferencia dentro de cada tratamiento:

$$SSE = SStotal - SST \quad \text{Ecuación No. 30}$$

Corrección de la media de tratamientos:

$$MST = \frac{SST}{k-1} \quad \text{Ecuación No. 31}$$

Corrección de la media de errores:

$$MSE = \frac{SSE}{n-k} \quad \text{Ecuación No. 32}$$

Continuación del apéndice 10.

Estos datos fueron obtenidos mediante una hoja electrónica con la opción de análisis de datos en la sección de análisis de varianza de un solo factor. A continuación, se muestra el análisis para la cantidad de masa de etanol respecto a la cantidad de masa en solución binaria.

Tabla A3. Información para el análisis estadístico de la cantidad de masa agregada de etanol respecto a la solución binaria

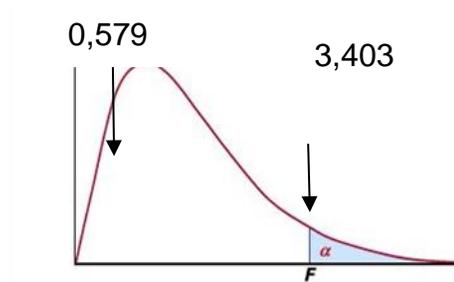
Grupos	Cuenta	Suma	Promedio	Varianza
Masa etanol primera corrida (g)	9	90,144	10,016	7,763
Masa etanol segunda corrida (g)	9	94,004	10,445	2,049
Masa etanol tercera corrida (g)	9	99,940	11,104	4,213

Tabla A4. Anova de la cantidad de masa agregada de etanol respecto a la solución binaria

Origen de las variaciones	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Promedio de los cuadrados	F	Valor crítico para F
Entre grupos	5,411	2	2,705	0,579	3,403
Dentro de los grupos	112,198	24	4,675		
Total	117,609	26			

Continuación del apéndice 10.

Figura A2. **Región crítica de la cantidad de masa agregada de etanol respecto a la solución binaria**



- Relación lineal

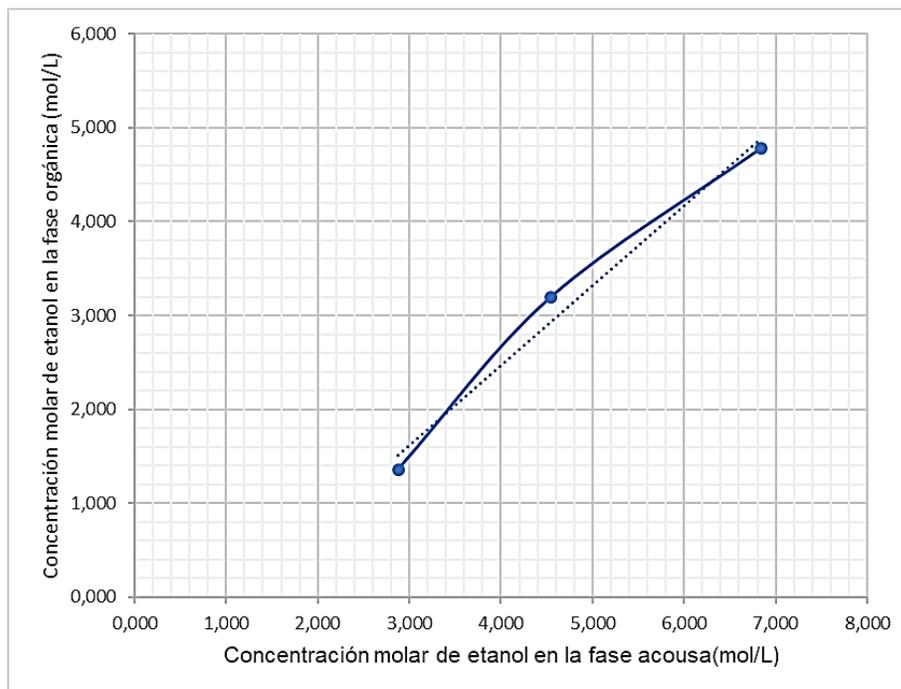
Este análisis se realiza al momento de graficar una variable en función de otra variable, en la sección de línea de tendencia de una hoja electrónica se coloca que tenga una regresión línea, así mismo se encuentra R^2 , si a este valor se le obtiene la raíz se encuentra el valor numérico igual al coeficiente de correlación. A continuación, se presenta determinar el valor del coeficiente de correlación entre la concentración molar de etanol en la fase acuosa respecto a la concentración molar de etanol en la fase orgánica.

Continuación del apéndice 10.

Tabla A5. **Información de los valores de la concentración molar de etanol en la fase acuosa respecto a la concentración molar de etanol en la fase orgánica**

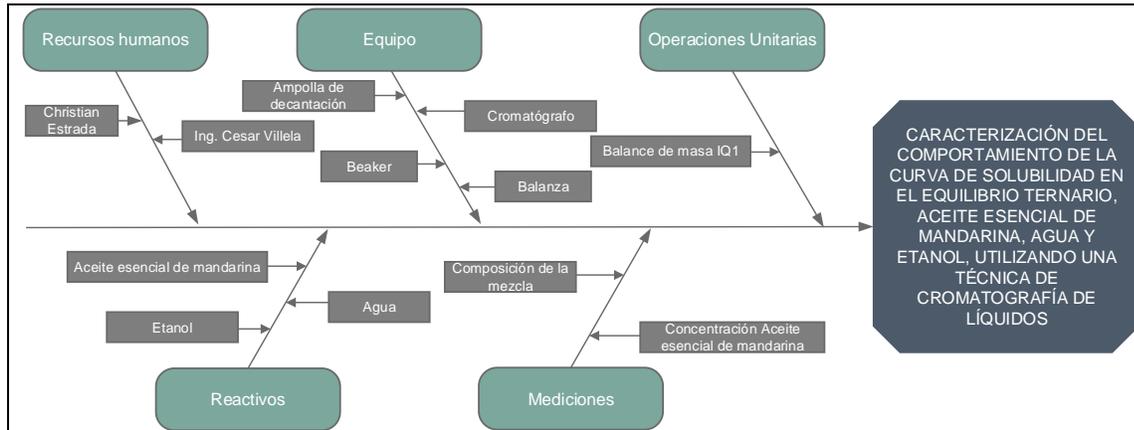
Punto para líneas de enlace	Concentración molar de etanol en la fase acuosa (mol/L)	Concentración molar de etanol en la fase orgánica (mol/L)	R
1	2,880	1,358	0,991
2	4,540	3,190	
3	6,841	4,785	

Figura A3. **Relación lineal de los valores de la concentración molar de etanol en la fase acuosa respecto a la concentración molar de etanol en la fase orgánica**



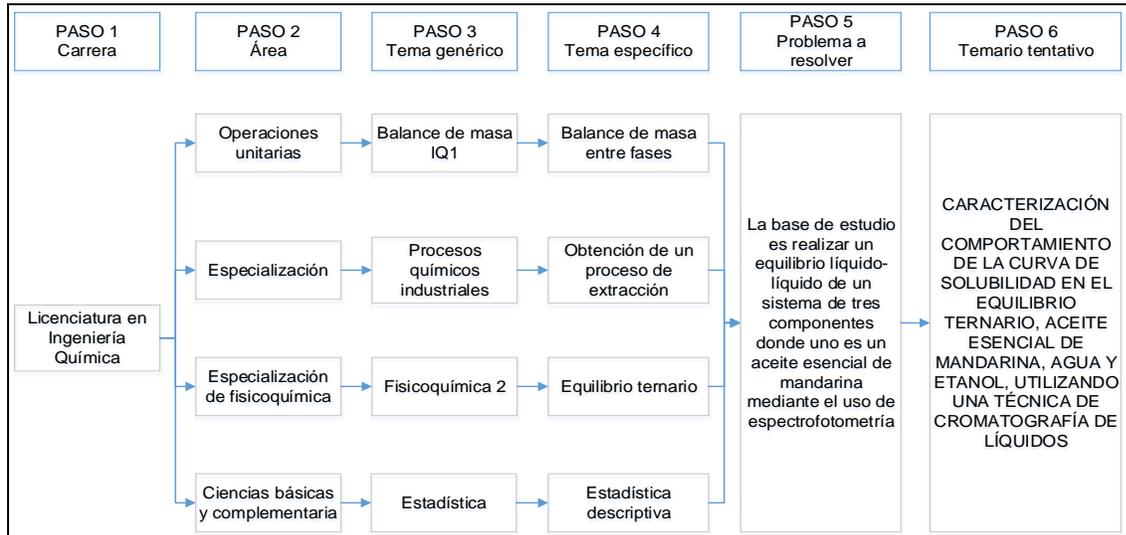
Fuente: elaboración propia.

Apéndice 11. Diagrama de Ishikawa



Fuente: elaboración propia.

Apéndice 12. Requisitos académicos



Fuente: elaboración propia.

Apéndice 13. **Manual**

A continuación, se presenta el procedimiento de la obtención de la curva de solubilidad del equilibrio ternario, obtención de las muestras para las líneas de enlace y obtención de los puntos de inicio en el eje inferior binario.

- Curva de solubilidad colocar con números
 - Limpiar el lugar de trabajo.
 - Tarar el beaker vacío.
 - Preparar 9 soluciones de aceite esencial de mandarina-agua a diferentes concentraciones másicas en función del aceite esencial de mandarina, de 0,1 a 0,9.
 - Agregar etanol con una bureta gota a gota hasta que los tres componentes sean miscibles entre sí (se vea una sola fase no amorfa), por medio de inspección visual.
 - Pesar la mezcla de la solución ternaria y anotar el dato.
 - Medir el volumen de la mezcla de la solución ternaria y anotar el dato.
 - Repetir 2 veces los pasos anteriores para cada mezcla binaria hasta obtener un total de 3 corridas.
 - Repetir el mismo procedimiento de los pasos 3 al paso 7 para cada mezcla binaria de aceite esencial de mandarina-agua, para obtener un total de 9 repeticiones.
 - Colocar los residuos en un beaker debidamente rotulado.
 - Lavar el equipo utilizado y se limpió el área de trabajo.

Continuación del apéndice 13.

- Muestras para líneas de enlace
 - Limpiar el lugar de trabajo.
 - Tarar el beaker vacío.
 - Preparar la solución ternaria del punto a analizar y colocar la muestra en una ampolla de decantación.
 - Dejar reposar durante 4 horas para que se separen las fases.
 - Tarar dos probetas (por separado), siendo uno para la fase acuosa y el otro para la fase orgánica, además de identificar cada una.
 - Decantar cada fase en cada probeta debidamente identificada.
 - Pesar cada probeta y anotar cada dato.
 - Medir el volumen de cada probeta y anotar cada dato.
 - Verter el líquido de cada probeta en un tubo de ensayo e identificar.
 - Realizar el mismo procedimiento desde el paso 3 hasta el paso 9, anterior para los 3 puntos restantes, para hacer un total de 4 muestras.
 - Limpiar el equipo utilizado y el área de trabajo.

- Eje inferior binario
 - Limpiar el lugar de trabajo
 - Tarar el beaker vacío.
 - Colocar 5 gramos de aceite esencial de mandarina en el beaker, pesar y anotar el dato.

Continuación del apéndice 13.

- Colocar agua desmineralizada en una bureta.
- Agregar gota a gota del agua desmineralizada en el beaker hasta observar inmiscibilidad en la solución binaria.
- Pesar la solución binaria y anotar el dato.
- Realizar 2 veces el mismo procedimiento del paso 2 al paso 6, para obtener un total de 3 repeticiones.
- Colocar 5 gramos agua en el *beaker*, pesar y anotar el dato.
- Colocar aceite esencial de mandarina en una bureta.
- Agregar gota a gota del aceite esencial de mandarina en el *beaker*
- hasta observar inmiscibilidad en la solución binaria.
- Pesar la solución binaria y anotar el dato.
- Repetir el mismo procedimiento del paso 8 al paso 10, para obtener un total de 3 repeticiones.

- Limpiar el equipo utilizado y el área de trabajo.

- Reportar
 - Curva de solubilidad.
 - Relación masa-masa con la densidad
 - Líneas de enlace.
 - Punto de pliegue.
 - Coeficiente de distribución en función de la fracción másica del etanol.

Fuente: elaboración propia.

ANEXOS

Anexo 1. Informe de las concentraciones de etanol en las fases acuosas

UVG | UNIVERSIDAD
DEL VALLE
DE GUATEMALA

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA
18 Ave. 11-95, Zona 15, V.H. III
Apartado Postal No. 82, 01901
Guatemala, Guatemala, C.A.

MOX. 23690791 al 95
Tel. 23690136 al 49
Extensión 21432

12 de septiembre de 2019

Christian Estrada
Presente

Estimado Christian

Atendiendo a su solicitud del análisis de 4 muestras, adjunto encontrarán los resultados del porcentaje (p/v) de metanol y etanol en cada muestra identificada del FA 1 a FA 4.

El análisis se realizó en un cromatógrafo de gases con detector de ionización de llama Agilent 6890N

Muestra	% metanol sin dilución	% etanol sin dilución	Concentración metanol % (p/v)	Concentración etanol % (p/v)
FA1	0.0093	9.951	0.012	13.268
FA2	0.02006	15.686	0.027	20.915
FA3	0.01160	11.346	0.053	31.518
FA4	0.0123	12.547	0.034	57.032

Los cromatogramas del perfil de la muestra se trabajaron en un cromatógrafo de gases con detector de Masas Agilent 6850/5975C VLMSD

Quedo a la orden por cualquier duda con los resultados o ampliación de la información.

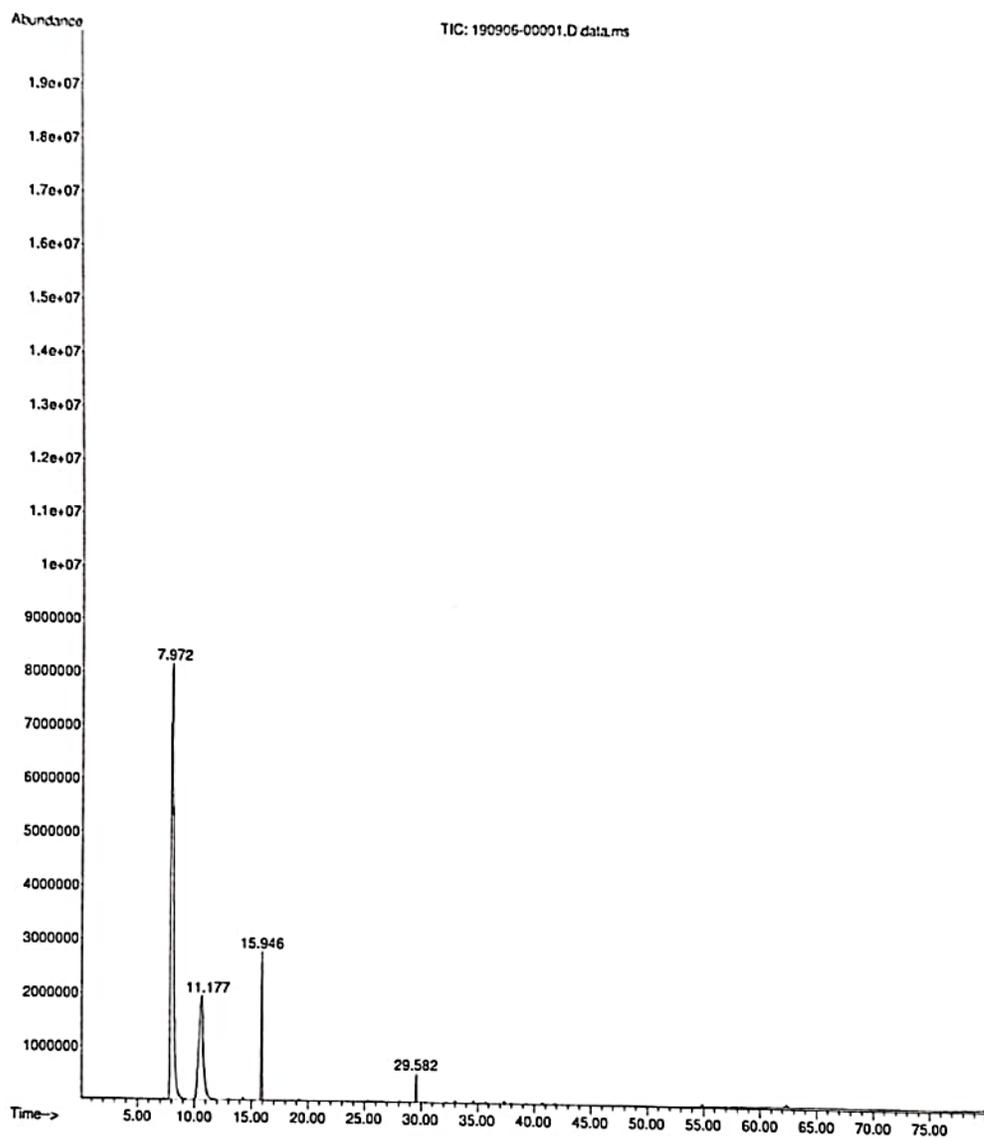
Reciba nuestros atentos saludos.

Licda. Ana Luisa Mendizábal de Montenegro
Laboratorio de Instrumentación Química Avanzada
Centro de Ingeniería Bioquímica
Instituto de Investigaciones
Universidad del Valle de Guatemala

Fuente: Laboratorio de Instrumentación Química Avanzada, Universidad del Valle de Guatemala.

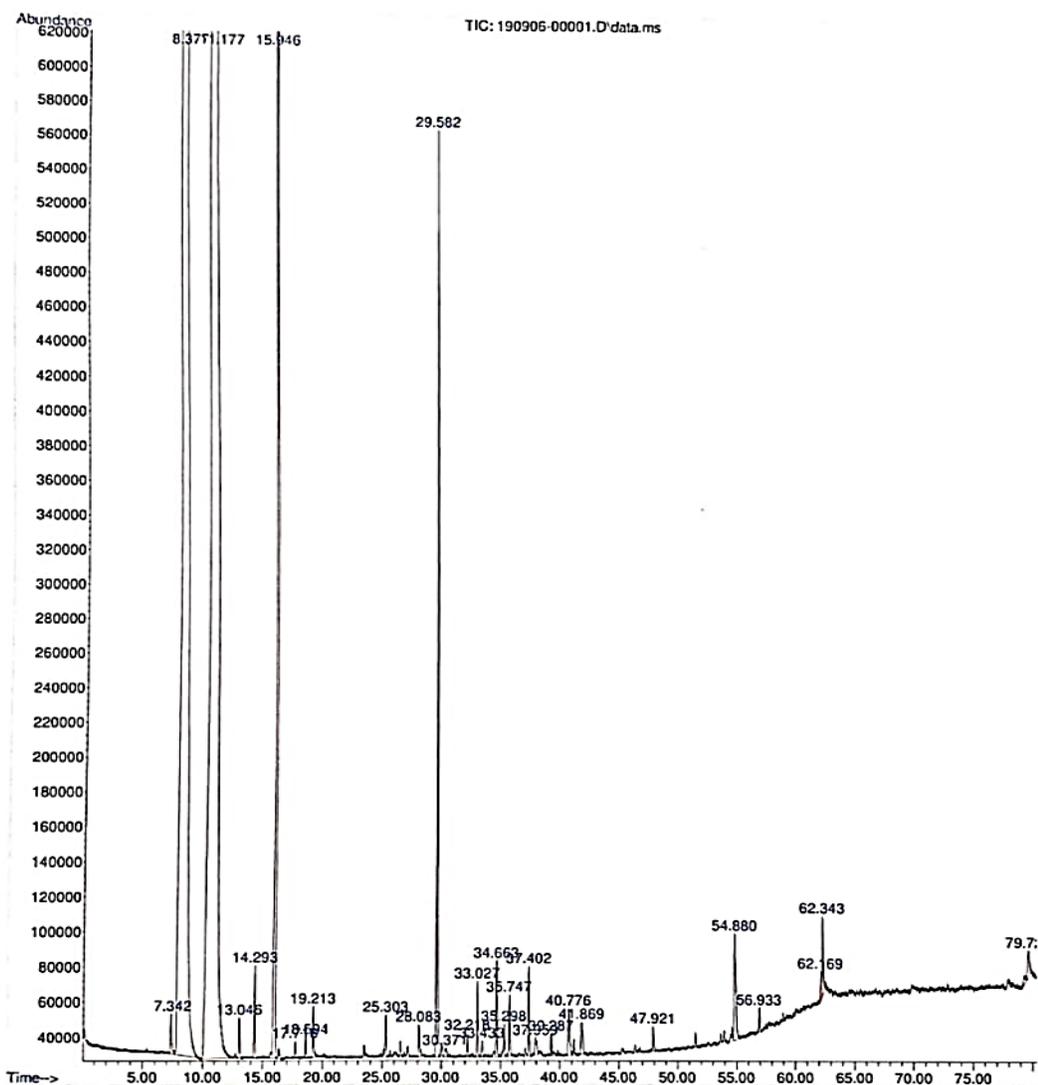
Anexo 2. Cromatogramas de la fase acuosa del primer punto en la región debajo de la curva de solubilidad del equilibrio ternario

File : C:\Amadchen\1\DATA\SERVICIO\190906-00001.D
Operator : Aden
Acquired : 6 Sep 2019 12:38 using AcqMethod ACEITES ESENCIALES MCS DB-WAX SCAN 2.M
Instrument : GC-MSD
Sample Name: FA1
Misc Info : Muestra
Vial Number: 1



Continuacion del anexo 2.

File : C:\msdchem\1\DATA\SERVICIO\190906-00001.D
Operator : AdeM
Acquired : 6 Sep 2019 12:38 using AcqMethod ACEITES ESENCIALES MCS DB-WAX SCAN 2.M
Instrument : GC-MSD
Sample Name : FA1
Misc Info : Muestra
Vial Number : 1



Fuente: Laboratorio de Instrumentación Química Avanzada, Universidad del Valle de Guatemala.

Anexo 3. **Componente químico más probable en cada pico del cromatograma del primer punto en la región debajo de la curva de solubilidad del equilibrio ternario**

Data Path : C:\msdchem\1\DATA\SERVICIO\
 Data File : 190906-0001.D
 Title :
 Acq On : 6 Sep 2019 12:38
 Operator : AdeM
 Sample : FAL
 Insc : Muestra
 LS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\NIST05a.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - autointA.e

RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
7.342	0.09	C:\Database\NIST05a.L			
		Hydrazine	33	000302-01-2	9
		Hydrazine	32	000302-01-2	4
		Ethylene oxide	74	000075-21-8	4
8.379	63.14	C:\Database\NIST05a.L			
		Ethyl alcohol	93	000064-17-5	91
		Ethyl alcohol	95	000064-17-5	86
		Ethyl alcohol	94	000064-17-5	80
11.177	26.24	C:\Database\NIST05a.L			
		Ammonia	6	007664-41-7	3
		Water	7	007732-18-5	1
13.046	0.06	C:\Database\NIST05a.L			
		Bicyclo[3.1.0]hexane, 4-methylene-	15379	003387-41-5	91
		1-(1-methylethyl)-			
		Bicyclo[3.1.0]hex-2-ene, 4-methyl-	15374	028634-89-1	91
		1-(1-methylethyl)-			
		.beta.-Phellandrene	15198	000555-10-2	90
14.293	0.14	C:\Database\NIST05a.L			
		.beta.-Myrcene	15177	000123-35-3	91
		.beta.-Myrcene	15180	000123-35-3	87
		.beta.-Phellandrene	15198	000555-10-2	68
15.944	7.22	C:\Database\NIST05a.L			
		D-Limonene	15164	005989-27-5	95
		D-Limonene	15162	005989-27-5	93
		D-Limonene	15165	005989-27-5	93
17.718	0.03	C:\Database\NIST05a.L			
		Tricyclo[2.2.1.0(2,6)]heptane, 1,7	15352	000508-32-7	90
		,7-trimethyl-			
		1,4-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-	15353	000099-85-4	87
		methylethyl)-			
		3-Carene	15158	013466-78-9	83
18.596	0.04	C:\Database\NIST05a.L			
		Benzene, 1-methyl-3-(1-methylethyl	14426	000535-77-3	90
)-			
		Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl	14429	000527-84-4	90
)-			
		Benzene, 1-methyl-3-(1-methylethyl	14421	000535-77-3	90
)-			
19.214	0.08	C:\Database\NIST05a.L			
		1-Pentene, 2-methyl-	1462	000763-29-1	38
		1-Pentene, 3-methyl-	1453	000760-20-3	38
		Cyclopentane, methyl-	1465	000096-37-7	30
25.305	0.07	C:\Database\NIST05a.L			
		Acetic acid, 2-[(diethoxymethyl)et	165989	173462-45-8	50
		hylphosphinatomethyl](ethoxycarbo			
		nyl)amino-, ethyl ester			
		Pentane, 1,1-diethoxy-	30018	003658-79-5	47
		Hexane, 1,1-diethoxy-	38817	003658-93-3	45

ITES ESE...WAX SCAN 2.M Mon Sep 09 08:35:32 2019

Page: 1

Continuacion del anexo 3.

ata Path : C:\msdchem\1\DATA\SERVICIO\
 ata File : 190906-00001.D
 itle :
 eq On : 6 Sep 2019 12:38
 perator : AdeM
 ample : FAL
 isc : Muestra
 LS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

earch Libraries: C:\Database\NIST05a.L Minimum Quality: 0

nknown Spectrum: Apex
 ntegration Events: ChemStation Integrator - autointA.e

RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
28.084	0.07	C:\Database\NIST05a.L Decanal	27021	000112-31-2	60
		2,4,6-Trimethyl-1-nonene	35013	055771-40-9	43
		2-Octenal, (E)-	10977	002548-87-0	35
29.581	1.20	C:\Database\NIST05a.L 1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-	25636	000078-70-6	80
		1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-, (Z)-	15283	003338-55-4	50
		1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-, 2-aminobenzoate	107591	007149-26-0	49
30.372	0.03	C:\Database\NIST05a.L Ammonia	6	007664-41-7	2
		Water	7	007732-18-5	1
32.219	0.04	C:\Database\NIST05a.L 3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-	25750	000562-74-3	90
		3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-, (R)-	25781	020126-76-5	72
		3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-	25751	000562-74-3	64
33.028	0.12	C:\Database\NIST05a.L 1,3-Cyclopentadiene, 1,2-dimethyl-	2575	004784-86-5	50
		3-Methylenecyclohexene	2549	001888-90-0	45
		1,3,5-Hexatriene, 2-methyl-	2561	019264-50-7	43
33.433	0.03	C:\Database\NIST05a.L Propionic acid, 3-[(diethoxymethyl)ethylphosphinatomethyl](ethoxycarbonyl)amino-, ethyl ester	170354	1000273-13-9	38
		Heptane, 1,1-diethoxy-	48536	000688-82-4	36
		1-Propoxy-3,3-diethyltriazene 2-oxide	39864	112753-64-7	36
34.661	0.14	C:\Database\NIST05a.L 4,7-Methano-1H-indene, 2,4,5,6,7,7a-hexahydro-	14450	087238-76-4	42
		1,5-Methano-1H-indene, 2,3,3a,4,5,7a-hexahydro-	14455	056018-84-9	41
		Cycloheptane, 1,3,5-tris(methylene)-	14422	068284-24-2	38
35.298	0.06	C:\Database\NIST05a.L Pentane, 3-methylene-	1469	000760-21-4	43
		2-Pentene, 3-methyl-, (Z)-	1490	000922-62-3	43
		2-Butene, 2,3-dimethyl-	1478	000563-79-1	43
35.749	0.09	C:\Database\NIST05a.L p-menth-1-en-8-ol	25545	1000157-89-9	80
		3-Cyclohexene-1-methanol, .alpha., .alpha.4-trimethyl-	25796	000098-55-5	52
		3-Cyclohexene-1-methanol, .alpha., .alpha.4-trimethyl-	25798	000098-55-5	50

ITES ESE...WAX SCAN 2.M Mon Sep 09 08:35:32 2019

Continuacion del anexo 3.

ata Path : C:\msdchem\1\DATA\SERVICIO\N
 ata File : 190906-00001.D
 itle :
 eq On : 6 Sep 2019 12:38
 perator : AdeN
 ample : FAI
 isc : Muestra
 US Vial : 1 Sample Multiplier: 1

earch Libraries: C:\Database\NIST05a.L Minimum Quality: 0

nknown Spectrum: Apex
 ntegration Events: ChemStation Integrator - autointA.e

RT	Area	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
37.400	0.13	C:\Database\NIST05a.L 2-Cyclohexen-1-ene, 2-methyl-5-(1-methylethenyl)-, (S)-	22929	002244-16-8	97
		2-Cyclohexen-1-ene, 2-methyl-5-(1-methylethenyl)-	22900	000099-49-0	95
		2-Cyclohexen-1-ene, 2-methyl-5-(1-methylethenyl)-, (S)-	22931	002244-16-8	93
37.959	0.05	C:\Database\NIST05a.L 2-Butenal, 3-methyl- Cyclopropanecarboximidine 1-Silacyclo-3-pentene	1388 1328 1346	000107-86-8 054070-74-5 007049-25-4	38 27 9
39.287	0.03	C:\Database\NIST05a.L Cyclobutane, 1,2-dicyclopropyl- 5-Hexenal, 4-methylene- Cyclopropanecethanol, 2-methylene-	15238 5658 3207	061141-62-6 017844-21-2 120477-28-3	38 38 35
40.775	0.12	C:\Database\NIST05a.L 2-Cyclohexen-1-ol, 2-methyl-5-(1-methylethenyl)-, cis- trans-3(10)-Carene-2-ol 2(1H)-Pyridinone, 1-methyl-	24319 24068 5435	001197-06-4 1000151-66-5 000694-85-9	96 55 41
41.866	0.09	C:\Database\NIST05a.L 2-Butenal, 3-methyl- 2-Butene, 2,3-dimethyl- 3-Chloropropionic acid, 4-methylp nyl ester	1388 1478 51678	000107-86-8 000563-79-1 1000282-32-7	14 14 12
47.921	0.04	C:\Database\NIST05a.L Octanoic Acid Octanoic Acid Hexanoic acid	20065 20066 7851	000124-07-2 000124-07-2 000142-62-1	59 50 50
54.880	0.30	C:\Database\NIST05a.L 1,2-Cyclohexanediol, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)- 2,7-Octadiene-1,6-diol, 2,6-dimethyl-, (Z)- 2-Methyl-1,5-hexadiene-3-ol	36250 36226 6383	001946-00-5 103619-06-3 017123-60-3	53 38 27
56.932	0.04	C:\Database\NIST05a.L 1,4,7,10,13,16-Hexaoxacyclooctadecane Ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)- 15-Crown-5	100942 31188 70736	017455-13-9 000112-34-5 033100-27-5	22 16 14
62.167	0.04	C:\Database\NIST05a.L 12-Crown-4 1,4,7,10,13,16-Hexaoxacyclooctadecane 12-Crown-4	40671 100941 40672	000294-93-9 017455-13-9 000294-93-9	72 59 59
62.344	0.16	C:\Database\NIST05a.L n-Hexadecanoic acid	96234	000057-10-3	86

Continuacion del anexo 3.

```

ata Path : C:\msdchem\1\DATA\SERVICIO\
ata File : 190906-00001.D
itle :
cq On : 6 Sep 2019 12:38
perator : AdcM
ample : FA1
isc : Muestra
LS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

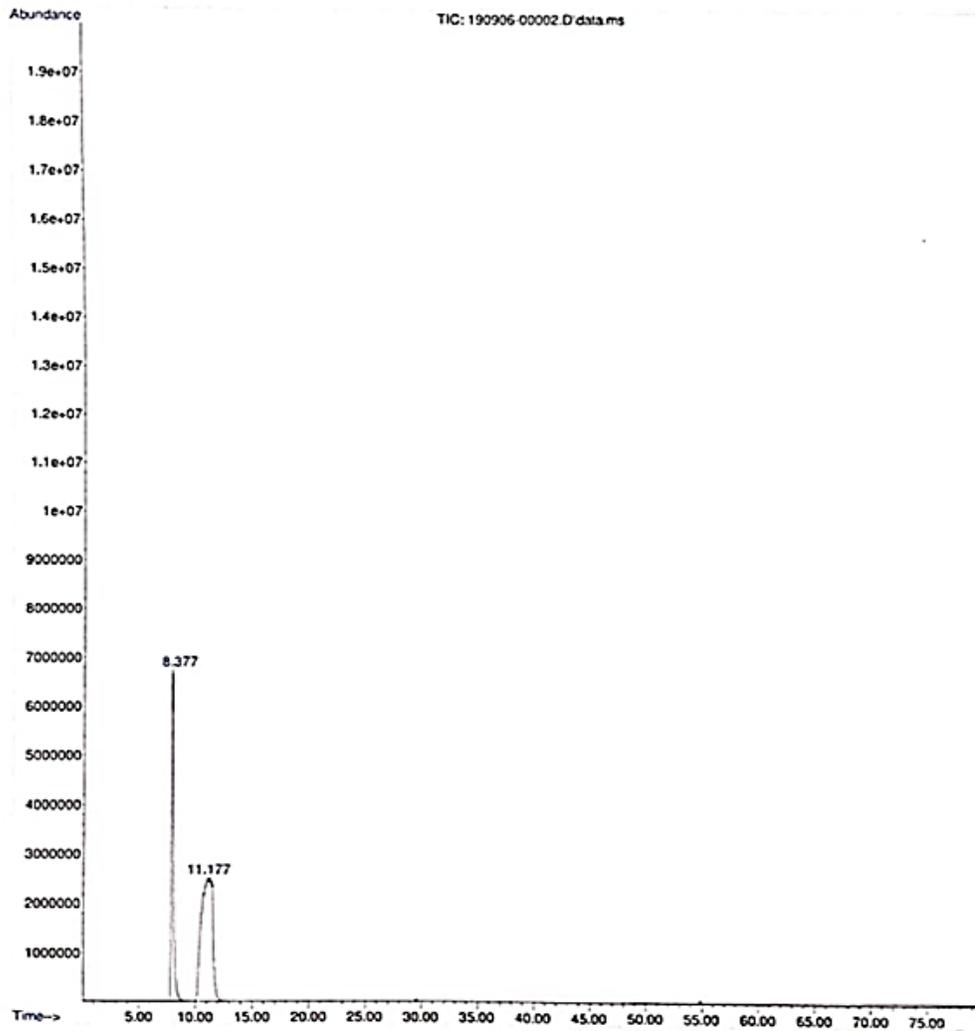
earch Libraries: C:\Database\NIST05a.L Minimum Quality: 0
nknown Spectrum: Apex
ntegration Events: ChemStation Integrator - autointA.e

```

RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
		Butanamide, 3,N-dihydroxy-	8770	090567-52-5	52
		N-Acetylisoxazolidine	7545	115615-36-6	49
79.725	0.12	C:\Database\NIST05a.L			
		1,4,7,10,13,16-Hexaoxacyclooctadec	100941	017455-13-9	64
		ane			
		Ethanol, 2-[2-(2-ethoxyethoxy)etho	42057	000112-50-5	59
		xy]-			
		1,4,7,10,13,16-Hexaoxacyclooctadec	100942	017455-13-9	53
		ane			

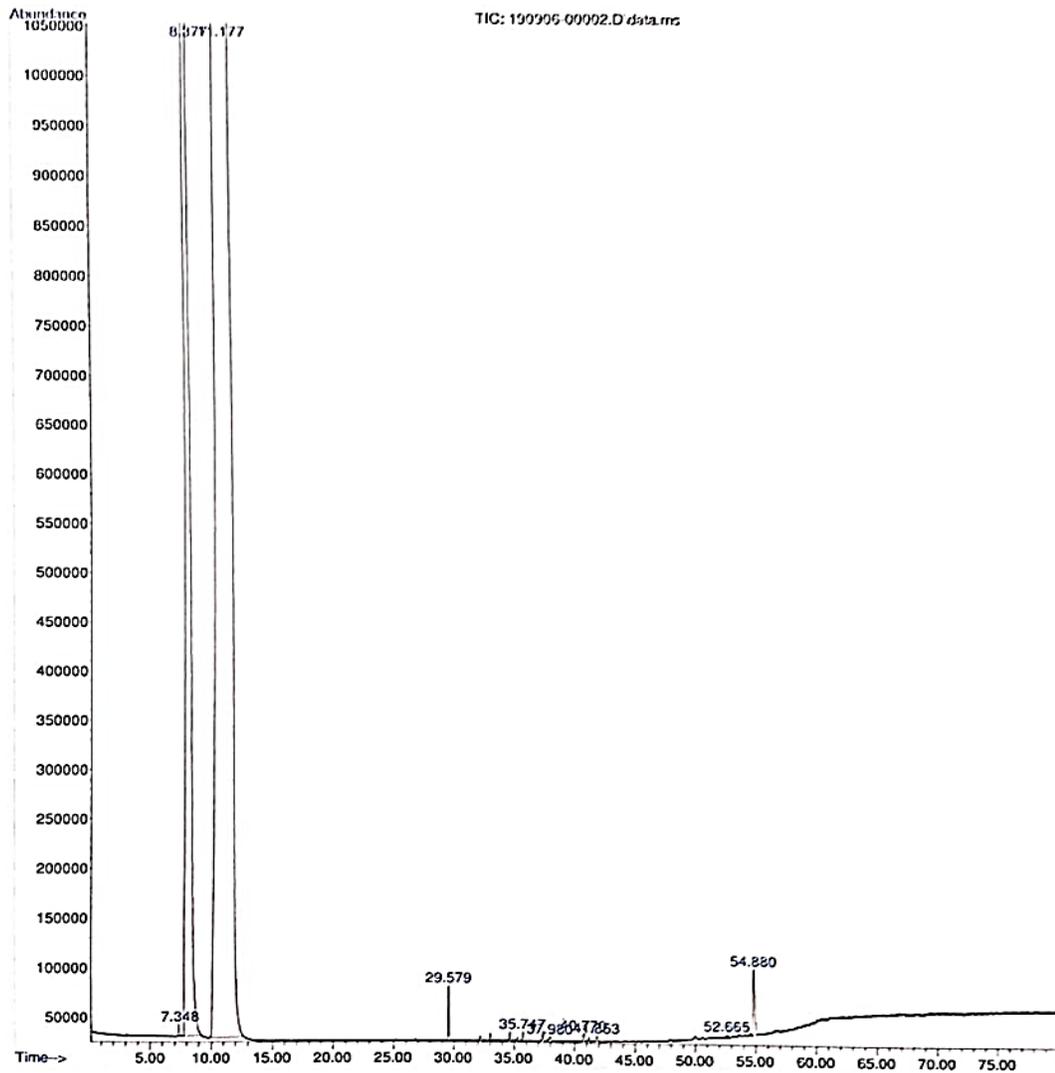
Anexo 4. **Cromatogramas de la fase acuosa del segundo punto en la región debajo de la curva de solubilidad del equilibrio ternario**

File :C:\msdchen\1\DATA\SERVICIO\190906-00002.D
Operator : AdeM
Acquired : 6 Sep 2019 14:05 using AcqMethod ACEITES ESENCIALES MCS DB-WAX SCAN 2.M
Instrument : GC-MSD
Sample Name: FA2
Misc Info : Muestra
Vial Number: 2



Continuacion del anexo 4.

File : C:\msdchem\1\DATA\SERVICIO\190906-00002.D
Operator : Ad-M
Acquired : 6 Sep 2019 14:05 using AcqMethod ACEITES ESENCIALES MCS DB-WAX SCAN 2.M
Instrument : GC-MSD
Sample Name: FA2
Misc Info : Muestra
Vial Number: 2



Fuente: Laboratorio de Instrumentación Química Avanzada, Universidad del Valle de Guatemala.

**Anexo 5. Componente químico más probable en cada pico del
cromatograma del segundo punto en la región debajo de la
curva de solubilidad del equilibrio ternario**

Data Path : C:\msdchem\1\DATA\SERVICIO\
 Data File : 190906-C0002.D
 Title :
 Acq On : 6 Sep 2019 14:05
 Operator : AdeM
 Sample : FA2
 Insc : Muestra
 LS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\NIST05a.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - autointA.e

RT	Area	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
7.347	0.03	C:\Database\NIST05a.L			
		Ethylene oxide	73	000075-21-8	4
		Ethylene oxide	72	000075-21-8	4
		Hydrazine	33	000302-01-2	4
8.379	34.72	C:\Database\NIST05a.L			
		Ethyl alcohol	93	000064-17-5	91
		Ethyl alcohol	95	000064-17-5	90
		Ethyl alcohol	94	000064-17-5	80
11.177	64.79	C:\Database\NIST05a.L			
		Ammonia	6	007664-41-7	2
		Water	7	007732-18-5	1
29.581	0.10	C:\Database\NIST05a.L			
		1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-	25636	000078-70-6	64
		1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-, (Z)-	15283	003338-55-4	49
		1,5-Dimethyl-1-vinyl-4-hexenyl butyrate	74330	000078-36-4	47
35.749	0.02	C:\Database\NIST05a.L			
		Bicyclo[4.1.0]heptan-3-ol, 4,7,7-trimethyl-, (1.alpha.,3.beta.,4.alpha.,6.alpha.)-	25868	054750-09-3	38
		Bicyclo[2.2.1]heptane, 7,7-dimethyl-2-methylene-	15368	000471-84-1	35
		Bicyclo[2.2.1]heptane, 2,2-dimethyl-3-methylene-, (1S)-	15387	005794-04-7	32
37.982	0.02	C:\Database\NIST05a.L			
		2,3,4,5-Tetrahydropyridazine	1329	000694-06-4	9
		3-Amino-s-triazole	1298	000061-82-5	3
		Cyclobutaneethanol, .beta.-methylene-	6429	116203-80-6	2
40.770	0.02	C:\Database\NIST05a.L			
		(1,3-Dimethyl-2-methylene-cyclopentyl)-methanol	18153	1000190-16-2	16
		4-Pyrimidinamine, 6-methyl-	5398	003435-28-7	9
		Pyrazole-4-carboxaldehyde, 1-methyl-	5570	025016-11-9	9
41.853	0.02	C:\Database\NIST05a.L			
		Ammonia	6	007664-41-7	2
		Water	7	007732-18-5	1
52.665	0.02	C:\Database\NIST05a.L			
		Butanal, 3-hydroxy-	1993	000107-89-1	38
		Ethanol, 2-(2-(2-ethoxyethoxy)ethoxy)-	42057	000112-50-5	12
		1-Pentanol, 5-methoxy-	8566	004799-62-6	12
54.880	0.25	C:\Database\NIST05a.L			
		1,2-Cyclohexanediol, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-	36250	001946-00-5	53
		4-t-Pentylcyclohexene	24384	051874-62-5	43

Continuacion del anexo 5.

ata Path : C:\msdchem\1\DATA\SERVICIO\
ata File : 190906-00002.D
itle :
cq On : 6 Sep 2019 14:05
perator : AdeM
ample : FA2
isc : Muestra
LS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

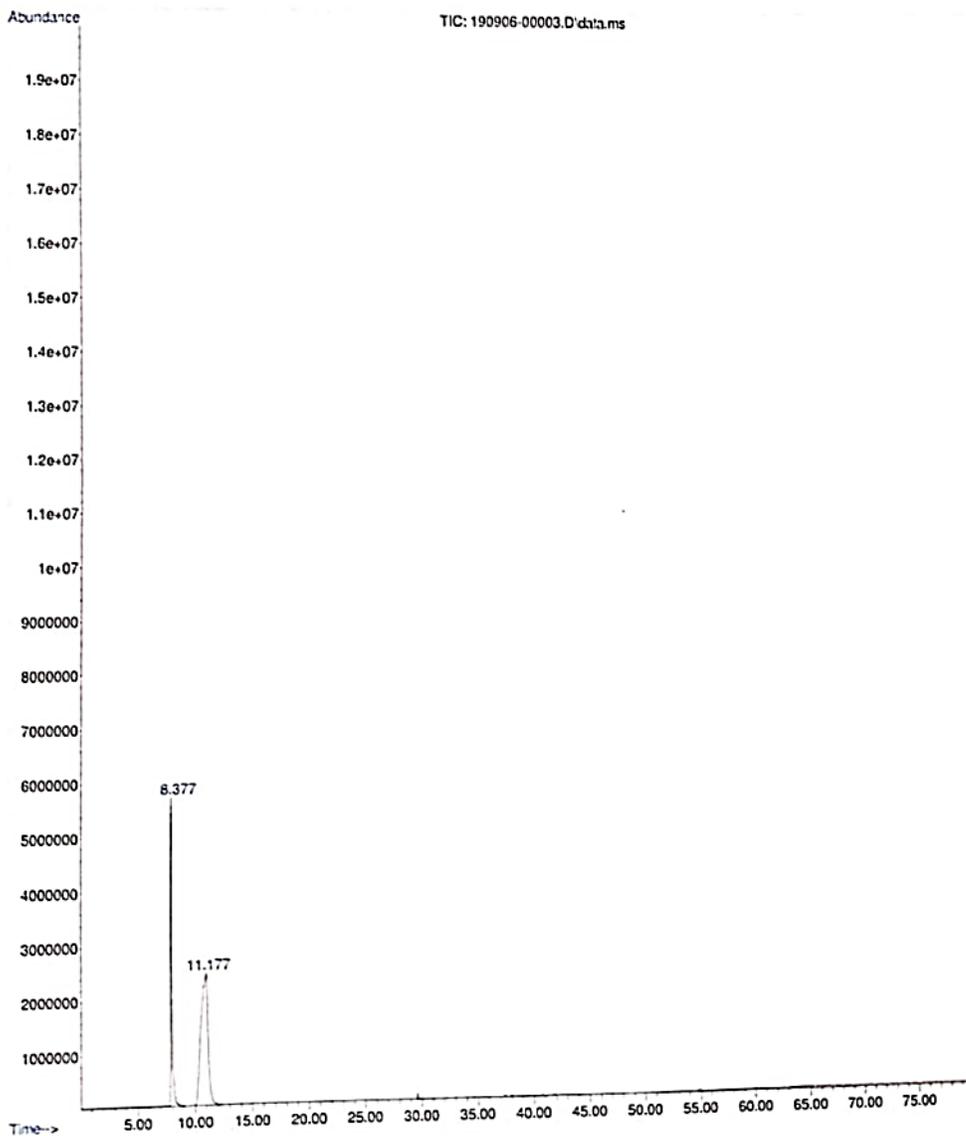
earch Libraries: C:\Database\NIST05a.L Minimum Quality: 0

nknown Spectrum: Apex
ntegration Events: ChemStation Integrator - autointA.e

RT	Area	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
		Butanoic acid, 2-hexenyl ester, (Z)-	36172	056922-77-1	38

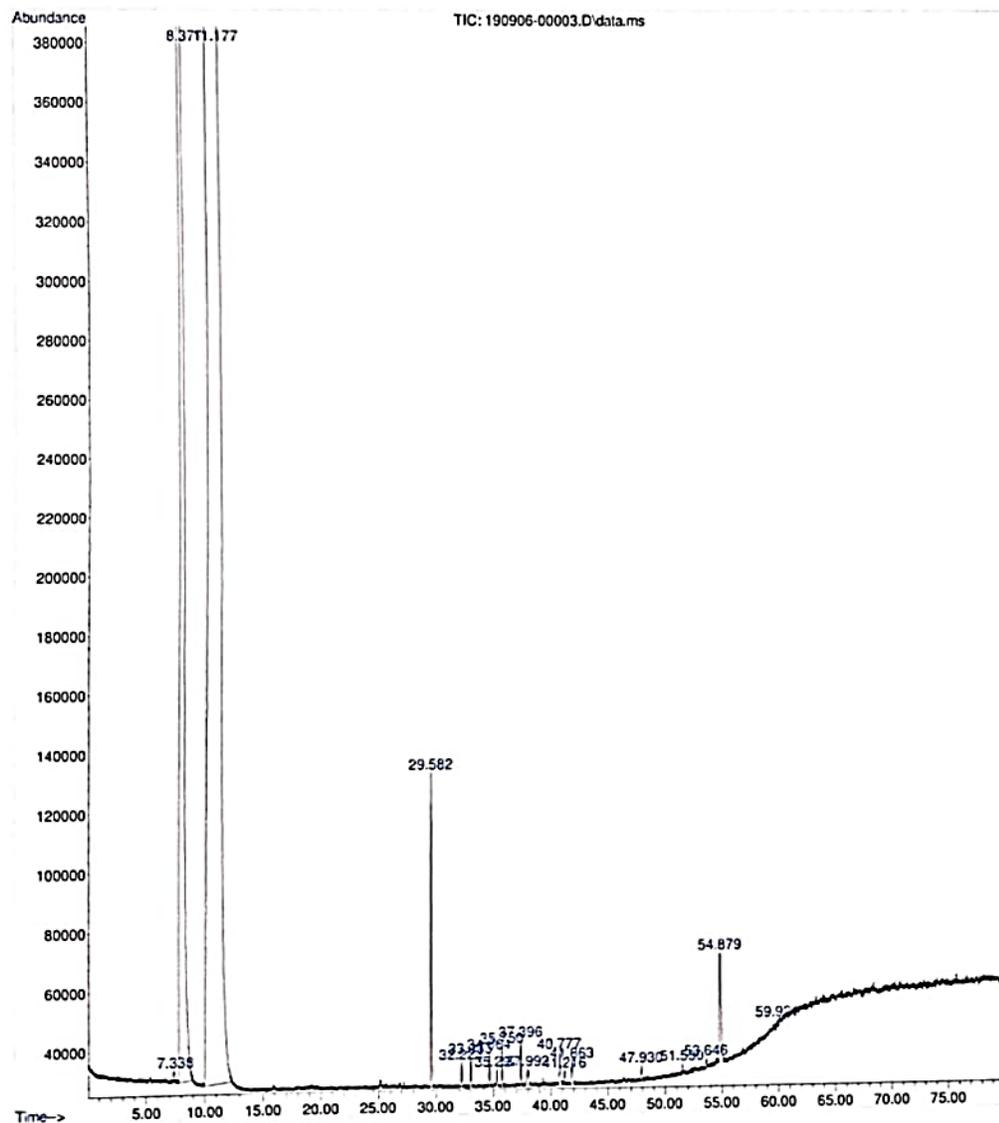
Anexo 6. **Cromatogramas de la fase acuosa del tercer punto en la región debajo de la curva de solubilidad del equilibrio ternario**

File :C:\msdchem\1\DATA\SERVICIO\190906-00003.D
Operator : AdeM
Acquired : 6 Sep 2019 15:32 using AcqMethod ACEITES ESENCIALES MCS DB-WAX SCAN 2.M
Instrument : GC-MSD
Sample Name : FA3
Misc Info : Muestra
Vial Number: 3



Continuacion del anexo 6.

File :C:\msdchem\1\DATA\SERVICIO\190906-00003.D
Operator : Adem
Acquired : 6 Sep 2019 15:32 using AcqMethod ACEITES ESENCIALES MCS DB-WAX SCAN 2.M
Instrument : GC-MSD
Sample Name: FA3
Misc Info : Muestra
Vial Number: 3



Fuente: Laboratorio de Instrumentación Química Avanzada, Universidad del Valle de Guatemala.

Anexo 7. Componente químico más probable en cada pico del cromatograma del tercer punto en la región debajo de la curva de solubilidad del equilibrio ternario

Data Path : C:\msdchem\1\DATA\SERVICIO\
 Data File : 190906-00003.D
 Title :
 Acq On : 6 Sep 2019 15:32
 Operator : AdeM
 Sample : FA3
 Inj Volume : Muestra
 Inj Vial : 3 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: C:\Database\NIST05a.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex minus baseline at 7 minutes
 Integration Events: ChemStation Integrator - autoint.A.e

RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
7.338	0.02	C:\Database\NIST05a.L Hydrazine	33	000302-01-2	2
		Methyl Alcohol	31	000067-56-1	1
		Methyl Alcohol	30	000067-56-1	1
8.379	26.90	C:\Database\NIST05a.L Ethyl alcohol	93	000064-17-5	91
		Ethyl alcohol	94	000064-17-5	90
		Ethyl alcohol	95	000064-17-5	64
11.177	72.01	C:\Database\NIST05a.L Ammonia	6	007664-41-7	2
		Water	7	007732-18-5	1
29.581	0.34	C:\Database\NIST05a.L 1,3,7-Octatriene, 3,7-dimethyl-	15240	000502-99-8	50
		Linalyl isobutyrate	74304	000078-35-3	50
		1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-, (2Z)-	15283	003338-55-4	49
32.223	0.03	C:\Database\NIST05a.L 3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-	25751	000562-74-3	64
		3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-	25750	000562-74-3	64
		3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-, (R)-	25784	020126-76-5	59
33.033	0.04	C:\Database\NIST05a.L Bicyclo[3.1.1]hept-3-en-2-ol, 4,6,6-trimethyl-, [1S-(1.alpha.,2.beta.,5.alpha.)]-	24344	018881-04-4	53
		3-Methylenecyclohexene	2549	001888-90-0	46
		1,3,5-Hexatriene, 2-methyl-	2561	019264-50-7	46
34.666	0.04	C:\Database\NIST05a.L 1(3H)-Isobenzofuranone, 3a,4,5,7a-tetrahydro-4-hydroxy-3a,7a-dimethyl-, (3a.alpha.,4.beta.,7a.alpha.)-(+/-)-	44278	054346-06-4	37
		Tricyclo[4.4.0.0(2,8)]dec-4-ene	14408	1000188-73-7	32
		Limonene oxide, cis-	24056	004680-24-4	23
35.298	0.02	C:\Database\NIST05a.L Furan, 2,3-dihydro-3-methyl-	1418	001708-27-6	72
		2-Pentene, 3-methyl-	1447	000922-61-2	36
		6-Nonynoic acid	26459	056630-31-0	10
35.749	0.05	C:\Database\NIST05a.L Bicyclo[4.1.0]heptan-3-ol, 4,7,7-trimethyl-, (1.alpha.,3.beta.,4.alpha.,6.alpha.)-	25868	054750-09-3	43
		Cyclohexene, 4-methylene-1-(1-methylethyl)-	15324	000099-84-3	43
		Cyclohexane, 1-methylene-4-(1-methylethyl)-	15337	000499-97-8	43

Page: 1

ITES ESE...WAX SCAN 2.M Mon Sep 09 08:28:39 2019

Continuacion del anexo 7.

ata Path : C:\msdchem\1\DATA\SERVICIO\
 ata File : 190906-00003.D
 itle :
 cq On : 6 Sep 2019 15:32
 perator : AdeM
 ample : FA3
 isc : Muestra
 LS Vial : 3 Sample Multiplier: 1

earch Libraries: C:\Database\NIST05a.L Minimum Quality: 0

nkknown Spectrum: Apex minus baseline at 7 minutes
 ntegration Events: ChemStation Integrator - autointA.e

RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
37.395	0.05	C:\Database\NIST05a.L 2-Cyclohexen-1-one, 2-methyl-5-(1-methylethenyl)-, (S)-	22925	002244-16-8	95
		2-Cyclohexen-1-one, 2-methyl-5-(1-methylethenyl)-	22900	000099-49-0	95
		2-Cyclohexen-1-one, 2-methyl-5-(1-methylethenyl)-, (R)-	22926	006485-40-1	93
37.991	0.04	C:\Database\NIST05a.L 2,3,4,5-Tetrahydropyridazine	1329	000694-06-4	50
		Furan, 2,3-dihydro-4-methyl-	1419	034314-83-5	38
		2-Butenal, 3-methyl-	1388	000107-86-8	9
40.779	0.06	C:\Database\NIST05a.L 1(3H)-Isobenzofuranone, 3a,4,5,7a-tetrahydro-4-hydroxy-3a,7a-dimethyl-, (3a.alpha.,4.beta.,7a.alpha.)-(./-.)-	44278	054346-06-4	38
		Pyridine, 4-methyl-, 1-oxide	5438	001003-67-4	30
		Pyridine, 3-methyl-, 1-oxide	5441	001003-73-2	30
41.216	0.02	C:\Database\NIST05a.L 2-Cyclohexen-1-one, 3-methyl-6-(1-methylethenyl)-, (S)-	22924	016750-82-6	83
		2-Cyclohexen-1-one, 3-methyl-6-(1-methylethenyl)-	22895	000529-01-1	83
		2-Cyclohexen-1-one, 3-methyl-	5695	001193-18-6	39
41.862	0.06	C:\Database\NIST05a.L 2-Pentalen-, (E)-	1379	001576-87-0	38
		Furan, 2,3-dihydro-4-methyl-	1419	034314-83-5	35
		2H-Pyran, 3,4-dihydro-	1394	000110-87-2	35
47.930	0.02	C:\Database\NIST05a.L (+)-4-Amino-4,5-dihydro-2(3H)-furanone	3959	016504-58-8	9
		Oxirane, [(1-methylethoxy)methyl]-	7965	004016-14-2	9
		3,4-Dihydroxy-5-methyl-dihydrofuran-2-one	13798	1000193-83-1	9
51.528	0.01	C:\Database\NIST05a.L 3-Hexanol, 5-methyl-	8116	000623-55-2	10
		Ethanol, 2-(2-methoxyethoxy)-	8975	000111-77-3	9
		2-Propanol, 1-(2-ethoxypropoxy)-	31195	010143-32-5	9
53.647	0.01	C:\Database\NIST05a.L Ethanol, 2-(1-methylethoxy)-	4670	000109-59-1	43
		2-Propanol, 1-(1-methylethoxy)-	8590	003944-36-3	38
		2-Propanol, 1-(1-methylethoxy)-	8588	003944-36-3	25
54.880	0.26	C:\Database\NIST05a.L 4-t-Pentylcyclohexene	24384	051874-62-5	49
		5-Cyclodecene, 1,2-epoxy-	24077	1000163-73-0	38
		Ether, 1-hexadecenyl methyl	94907	015519-14-9	35
59.920	0.01	C:\Database\NIST05a.L Ethanol, 2-[2-(2-ethoxyethoxy)etho	42058	000112-50-5	64

Continuacion del anexo 7.

ata Path : C:\msdchem\1\DATA\SERVICIO\
ata File : 190906-00003.D
itle :
cq On : 6 Sep 2019 15:32
perator : AdeM
ample : FA3
isc : Muestra
LS Vial : 3 Sample Multiplier: 1

earch Libraries: C:\Database\NIST05a.L Minimum Quality: 0

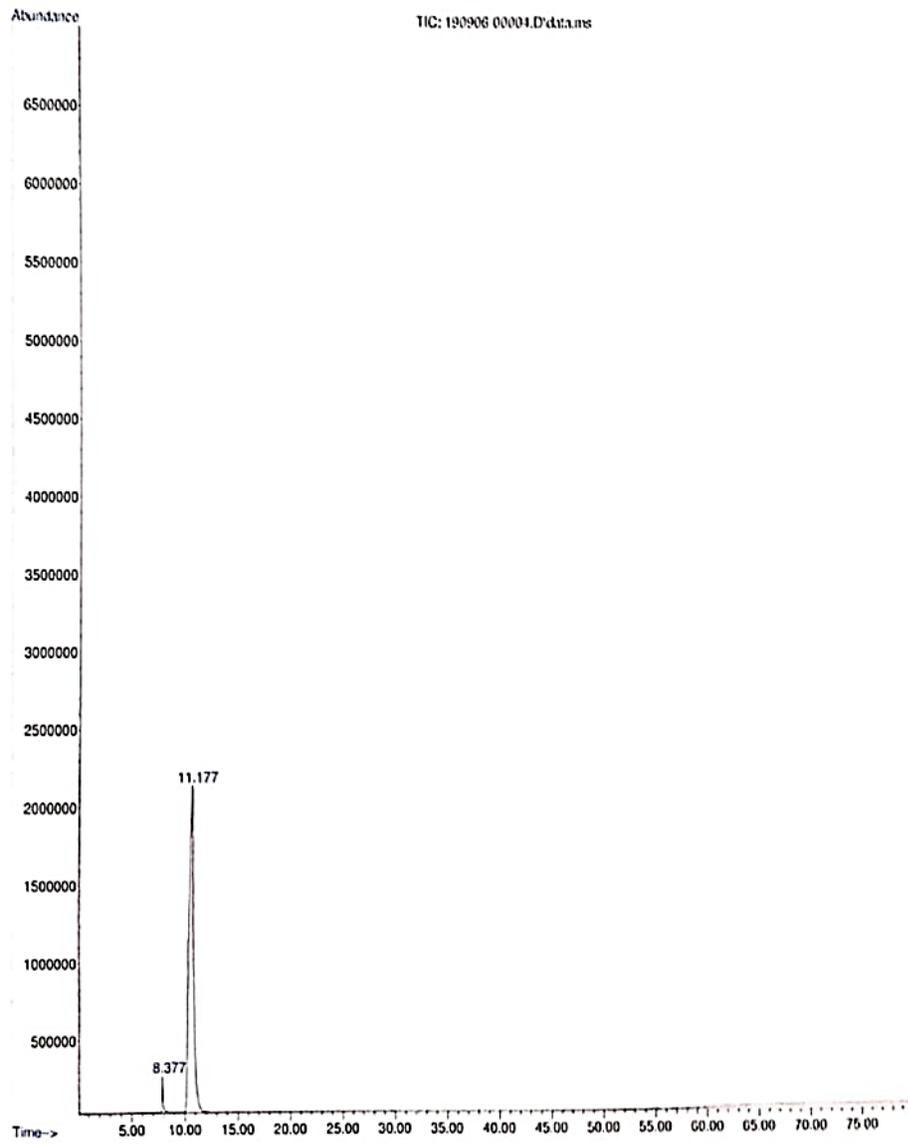
nknown Spectrum: Apex minus baseline at 7 minutes
ntegration Events: ChemStation Integrator - autointA.e

RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
		xy]- Ethanol, 2-[2-(2-ethoxyethoxy)etho	42059	000112-50-5	56
		xy]- Ethanol, 2-[2-(2-methoxyethoxy)eth	32470	000112-35-6	53
		oxy]-			

Fuente: Laboratorio de Instrumentación Química Avanzada, Universidad del Valle de Guatemala.

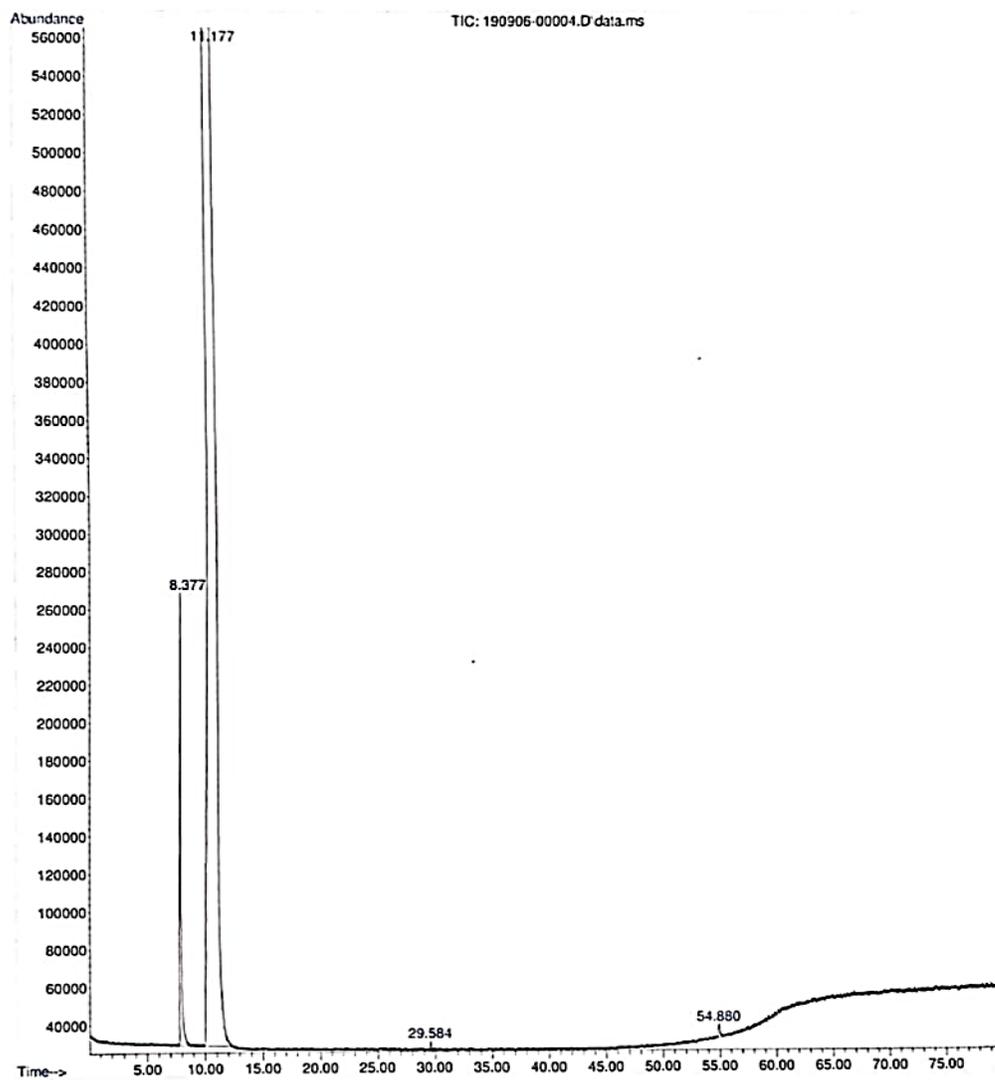
Anexo 8. **Cromatogramas de la fase acuosa del cuarto punto en la región debajo de la curva de solubilidad del equilibrio ternario**

File : C:\msdchem\1\DATA\SERVICIO\190906-00004.D
Operator : AdeM
Acquired : 6 Sep 2019 16:59 using AcqMethod ACEITES ESENCIALES MCS DB-WAX SCAN 2.M
Instrument : GC-MSD
Sample Name: FA4
Misc Info : Muestra
Vial Number: 4



Continuacion del anexo 8.

File :C:\msdchem\1\DATA\SERVICIO\190906-00004.D
Operator : AdeM
Acquired : 6 Sep 2019 16:59 using AcqMethod ACEITES ESENCIALES MCS DB-WAX SCAN 2.M
Instrument : GC-MSD
Sample Name: FA4
Misc Info : Muestra
Vial Number: 4



Fuente: Laboratorio de Instrumentación Química Avanzada, Universidad del Valle de Guatemala.

Anexo 9. **Componente químico más probable en cada pico del cromatograma del cuarto punto en la región debajo de la curva de solubilidad del equilibrio ternario**

```

ata Path : C:\msdchen\1\DATA\SERVICIO\
ata File : 190906-00004.D
itle :
cq On : 6 Sep 2019 16:59
perator : Adem
ample : FA4
isc : Muestra
LS Vial : 4 Sample Multiplier: 1

earch Libraries: C:\Database\NIST05a.L Minimum Quality: 0
nknown Spectrum: Apex minus baseline at 7 minutes
ntegration Events: ChemStation Integrator - autointA.e

```

RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
8.379	2.52	C:\Database\NIST05a.L			
		Formamide	90	000075-12-7	4
		Formamide	89	000075-12-7	3
		Acetic acid, hydroxy-	892	000079-14-1	2
11.177	97.32	C:\Database\NIST05a.L			
		Ammonia	6	007664-41-7	2
		Water	7	007732-18-5	1
29.585	0.05	C:\Database\NIST05a.L			
		3-Penten-2-ol	1701	001569-50-2	37
		3-Penten-2-ol	1692	001569-50-2	9
		Butanoic acid, 2-hexenyl ester, (E)-	36179	053398-83-7	9
54.880	0.11	C:\Database\NIST05a.L			
		Ethanol, 2-(1-methylethoxy)-	4671	000109-59-1	43
		Ethanol, 2-(1-methylethoxy)-	4670	000109-59-1	38
		1,3-Butanediol	2237	000107-88-0	27

Fuente: Laboratorio de Instrumentación Química Avanzada, Universidad del Valle de Guatemala.

Anexo 10. Certificado del aceite esencial de mandarina

CERTIFICADO DE ANÁLISIS

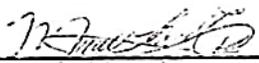
Producto: ACEITE ESENCIAL DE MANDARINA
 Fecha de Análisis: Marzo, 2018
 No. de Muestra: N.A. No. de Lote: 9-8150147
 Fecha de Producción: Diciembre, 2017 Fecha de Expiración: Noviembre, 2019

RESULTADOS DE ANÁLISIS

Temperatura: 24.9°

ENSAYO	METODO*	RESULTADO	ESPECIFICACIONES**
Apariencia y olor	Visual	CUMPLE	Líquido Naranja rojizo a naranja café con olor mandarina agradable.
Gravedad específica	MA-01 Section 1.1	0.847	0.847 a 0.857
Rotación óptica	MA-01 Section 1.2	+94.3°	+83.0° a +96.0°
Índice de refracción	MA-01 Section 1.3	1.4730	1.4730 ²⁰ - 1.4760 ²⁰
Solubilidad en etanol	MA-01 Section 1.4	3.0 vols. Soluble con ligera opalescencia	Soluble en etanol al 95% ; puede presentar ligera opalescencia.
COMPOSICIÓN			
Alfa Pineno		2.3%	De 2% a 3%
Beta Pineno		1.8%	De 1.2% a 2%
D-Limoneno		72%	De 65% a 75%
Gamma Terpineno		19%	De 16% a 22%
Metil Antranilato Metilo		0.55%	De 0.30% a 0.60%

* Tiene concordancia con los métodos internacionales del FCC (Food Chemical Codex)
 ** Las especificaciones mostradas están basadas en el EOG (Essential Oil Quality)


 Laboratorio


 Autor:

Fuente: Laboratorio de Instrumentación Química Avanzada, Universidad del Valle de Guatemala.