



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE QUÍMICA

T E S I S

**COMPARACIÓN DE COMPUESTOS ORGÁNICOS
VOLÁTILES DEL MEZCAL Y DE BEBIDAS ALCOHÓLICAS
POR CROMATOGRFÍA DE GASES ACOPLADO A
ESPECTROMETRÍA DE MASAS**

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

QUIMICA FARMACÉUTICO BIOLÓGICA

P R E S E N T A

CLAUDIA QUIÑONES RAMOS

A S E S O R D E L T E M A

DRA. ARACELI PEÑA ÁLVAREZ



Ciudad universitaria, Cd. Mx.,

Septiembre 2016



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: **Profesor: Humberto Ramón Gómez Ruiz**

VOCAL: **Profesor: Araceli Patricia Peña Álvarez**

SECRETARIO: **Profesor: Martín Daniel Trejo Valdéz**

1er SUPLENTE: **Profesor: Silvia Citlalli Gama González**

2° SUPLENTE: **Profesor: Adrián de Santiago Zárate**

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

Laboratorio 101, Departamento de Química Analítica de la División de Estudios de Posgrado, edificio B de la Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México.

ASESOR DEL TEMA

Araceli Patricia Peña Álvarez

SUPERVISOR TÉCNICO

Rocío del Carmen Juárez Ciprés

SUSTENTANTE

Claudia Quiñones Ramos

Agradecimientos

A los programas PAPIIT no.IN2161142 y no.IN218116

ÍNDICE

Resumen	5
1 Introducción	7
2 Objetivos	10
2.1 Objetivo general	10
2.2 Objetivos particulares	10
3 Justificación	11
3.1 Hipótesis.....	11
4 Antecedentes	12
4.1 Bebidas alcohólicas	12
4.2 Clasificación de las bebidas alcohólicas.....	12
4.3 Bebidas alcohólicas destiladas.....	13
4.4 Bebidas alcohólicas no destiladas.....	17
4.5 Congenéricos.....	17
4.5.1 Alcoholes.....	18
4.5.2 Alcoholes superiores	19
4.5.3 Terpenos	21
4.5.4 PAH's	22
4.5.5 Ésteres	22
4.5.6 Aldehídos y cetonas	23
4.6 Fermentación alcohólica	24
4.7 Mezcal	25
4.7.1 Denominación de origen	26
4.7.2 Elaboración del mezcal.....	26
4.8 Legislación	28
5 Fundamentos analíticos	29
5.1 Cromatografía de gases.....	29
5.2 Instrumentación	30
5.2.1 Gas portador.....	30
5.2.2 Control de flujo	31
5.2.3 Sistema de inyección de muestra	31

5.2.4	Columnas	32
5.2.5	Sistema de detección	33
5.3	Espectrometría de masas	35
5.3.1	Ionización por impacto electrónico (IE)	36
5.3.2	Analizador cuadrupolar	36
5.3.3	Detectores	36
5.4	Cromatografía de gases acoplado a espectrometría de masas (CG-EM)	37
5.5	Preparación de muestra	37
5.5.1	Microextracción en fase sólida.....	38
6	Desarrollo experimental	45
6.1	Materiales y reactivos	45
6.2	Metodología	46
6.2.1	..Determinación de compuestos orgánicos volátiles por MEFS-CG-EM	46
6.2.2	Determinación de metanol y alcoholes superiores.....	47
7	Resultados y discusión.....	50
7.1	Determinación de compuestos orgánicos volátiles por MEFS-CG-EM	50
7.2	Análisis quimiométrico de compuestos orgánicos volátiles de las diferentes bebidas alcohólicas.	83
7.3	Determinación de metanol y alcoholes superiores por cromatografía de gases con detector de ionización de llama	90
7.4	Análisis quimiométrico de alcoholes superiores en bebidas alcohólicas destiladas	95
8	Conclusiones	101
9	Anexo I	103
10	Anexo II.....	109
11	Bibliografía.....	133

RESUMEN

Los compuestos orgánicos volátiles determinan las propiedades organolépticas de las bebidas alcohólicas. Se encuentran en concentraciones relativamente altas, principalmente alcoholes superiores, ácidos y algunos ésteres de fermentación. También se encuentran otros compuestos volátiles minoritarios como ácidos carboxílicos, ésteres, aldehídos, cetonas, furanos, hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH's, por sus siglas en inglés), y terpenos que aportan aroma a las bebidas alcohólicas. Los compuestos orgánicos volátiles tienen diferente origen: pueden estar presentes en la materia prima y variar entre especies, regiones geográficas o pueden generarse durante la fermentación en función de las levaduras y bacterias, características del mosto y condiciones del proceso, o durante la maduración del producto. [1]

En el presente trabajo se obtuvo el perfil de compuestos orgánicos volátiles del mezcal y otras bebidas alcohólicas mediante microextracción en fase sólida modo head-space seguida de cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (MEFS-CG-EM), a partir del perfil obtenido de alcoholes, cetonas, aldehídos, ácidos carboxílicos, terpenos, hidrocarburos aromáticos policíclicos, hidrocarburos simples, compuestos aromáticos y compuestos heterocíclicos se realizó el análisis de componentes principales (PCA, por sus siglas en inglés) y se observó que a partir del perfil obtenido, cada tipo de bebida se distingue una de otra. Se logran diferenciar las bebidas alcohólicas producidas a partir de caña de las producidas a partir de agave; los mezcales se diferencian de las raicillas, los mezcales que provienen de agave tipo silvestre se distinguen de los mezcales que provienen de agaves cultivados.

Se cuantificó el contenido de metanol y alcoholes superiores del mezcal, raicilla, tequila, ron y coñac mediante curvas de calibración. Los mezcales M1 y M14 se encuentran fuera de los límites establecidos para metanol (30 a 300mg/100mL de alcohol anhidro), los mezcales M1, M3, M13 y M14 no cumplen con lo especificado para alcoholes superiores (100mg a 400mg/100mL de alcohol anhidro) por la norma

NOM-070-SCFI-1994. Los tequilas cumplieron las especificaciones para metanol (30 a 300 mg/100mL de alcohol anhidro) y alcoholes superiores (20 a 500 mg/100mL de alcohol anhidro) establecidos por la NOM-006-SCFI-2012 a excepción del tequila T5 que no cumple con las especificaciones para metanol. Las raicillas, rones y coñacs cumplieron con las especificaciones establecidas para metanol (máximo 300mg/mL de alcohol anhidro) y alcoholes superiores (máximo 500mg/mL de alcohol anhidro) por la NOM-142-SSA1/SCFI-2014.

1 INTRODUCCIÓN

Muchos productos están sujetos a una regulación sanitaria mediante normas, entre ellos se encuentran las bebidas alcohólicas que tienen un interés especial por el riesgo que representa consumirlas en exceso debido a que presentan toxicidad, por ello se requieren métodos analíticos que aseguren que los compuestos orgánicos volátiles en concentraciones relativamente altas (volátiles mayoritarios), como metanol y alcoholes superiores, se encuentran dentro de los límites establecidos por las normas oficiales. Además del metanol y alcoholes superiores, las bebidas alcohólicas contienen compuestos orgánicos volátiles en concentraciones bajas (volátiles minoritarios), como aldehídos, cetonas, ácidos, furanos, terpenos, etc. que contribuyen al aroma de las bebidas alcohólicas, estos compuestos se conocen como congenéricos. [2] En México existen normas que establecen los límites permitidos de metanol y alcoholes superiores en bebidas alcohólicas como la NOM-142-SSA1/SFI-2014 [Especificaciones sanitarias]. Etiquetado sanitario y comercial; en el caso específico del tequila está regido por la NOM-006-SCFI-2012; para mezcal: NOM-070-SSA-1994; para bacanora: NOM-168-SCFI-2004; y para charanda: NOM-144-SCFI-2000.

Dentro de las bebidas alcohólicas se encuentra el mezcal que es una bebida alcohólica destilada con una herencia biológica y cultural milenaria, producida a partir de la fermentación de especies de agaváceas o magueyes, endémicos de México. El mezcal se expresa en distintas formas, sabores, herencias culturales, tecnológicas y biológicas, ofreciendo un patrimonio muy diverso de expresiones sensoriales producidas por el hombre. [1] El mezcal se produce de manera industrial y artesanal en donde el mezcal industrial es un producto con pocos congenéricos y se adicionan comúnmente saborizantes y se suelen usar otras fuentes de azúcar distintas al agave (abocado). El mezcal artesanal es producto de alta complejidad de congenéricos, además de un sabor a humo, o leña, o ligeramente quemado, este

sabor ahumado proviene de la cocción de leña y piedras del horno. En la mayor parte de los mezcales artesanales los largos tiempos de fermentación (de hasta 10 días) y el hecho de que no utilicen en la mayoría de los casos levaduras añadidas, hace que una gran cantidad de bacterias participe activamente en la formación de compuestos que intervienen en la experiencia sensorial del producto. [1]

En México se producen otras bebidas alcohólicas que provienen del agave como tequila, raicilla, licor de agave y bacanora; las bebidas charanda y licor de caña se elaboran a partir de caña. En territorio nacional no se producen whisky, vodka y coñac y hay otros que, además de importarse, se fabrican y exportan como vino, aguardiente y ron. Todas estas bebidas mencionadas son destiladas a excepción del vino, por lo que después de la fermentación son sometidas a un proceso de destilación en donde se recuperan las sustancias más volátiles entre ellas el etanol, por ello, una bebida alcohólica destilada tiene mayor concentración de alcohol que una fermentada.

El análisis químico de las bebidas alcohólicas no solo es importante para la satisfacción de requerimientos regulatorios sino también para la determinación de autenticidad e identidad. Para ello se requiere el desarrollo de nuevos métodos de análisis, que sean sensibles, eficientes, más rápidos, más selectivos, menos costosos y que usen menor cantidad de disolventes o que lo eliminen. Las técnicas de extracción convencionales como la extracción líquido-líquido son laboriosas, suelen ser multi-etapas, difíciles de automatizar, y, además, consumen mucho tiempo y gran cantidad de disolventes. En este sentido se han desarrollado técnicas de preparación de muestra que incorporan tres tendencias básicas: automatización, miniaturización y simplificación, entre ellos la extracción en fase sólida (SPE, por sus siglas en inglés), la microextracción en fase sólida (SPME, por sus siglas en inglés) y extracción por sorción con barra magnética (SBSE, por sus siglas en inglés) que buscan reducir las desventajas de los métodos convencionales de preparación de muestra. [3] La microextracción en fase sólida (*Solid phase microextraction*, SPME) fue desarrollada en 1989 por Belardi y Pawliszyn. Es una

técnica para la extracción y concentración de compuestos orgánicos volátiles en bebidas ampliamente utilizada en combinación con la cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas. [4] La microextracción en fase sólida (MEFS), ha sido aplicada en el análisis de compuestos volátiles de diferentes muestras de alimentos como aceites vegetales [5], bebidas alcohólicas [6, 7, 8], vinagres [9], pescado [10], etc.

El propósito de este trabajo es identificar los compuestos orgánicos volátiles presentes en bebidas alcohólicas destiladas como mezcal, tequila, bacanora, charanda, raicilla, whisky, coñac y aguardiente y en bebidas alcohólicas no destiladas como el vino; mediante (CG-EM) como técnica de separación e identificación y microextracción en fase sólida (MEFS) en modo “espacio de cabeza” como método de preparación de muestra y de concentración, para obtener un perfil de los principales compuestos orgánicos volátiles de cada bebida. Así mismo cuantificar metanol y alcoholes superiores en las diferentes bebidas alcohólicas estudiadas y determinar si cumplen con los límites establecidos por las normas oficiales.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GENERAL

Obtener el perfil de compuestos orgánicos volátiles presentes en el mezcal y en otras bebidas alcohólicas mediante microextracción en fase sólida seguida de cromatografía de gases acoplado a espectrometría de masas; y con base en este perfil clasificarlas.

2.2 OBJETIVOS PARTICULARES

1. Emplear una técnica de extracción y preconcentración de muestra sencilla, rápida y libre de disolventes como la microextracción en fase sólida (MEFS) para la determinación del perfil de compuestos orgánicos volátiles del mezcal y diferentes bebidas alcohólicas, para su posterior análisis por CG-EM.
2. Determinar las diferencias entre bebidas alcohólicas mediante la comparación del perfil aromático obtenido por microextracción en fase sólida (MEFS) modo “espacio de cabeza” seguido de CG-EM.
3. Optimizar una metodología para identificar y cuantificar el metanol y alcoholes superiores presentes en el mezcal por cromatografía de gases con detector de ionización de llama.
4. Establecer si las muestras de mezcal, tequila, raicilla, ron y coñac cumplen con los límites permitidos para metanol y alcoholes superiores con base a la NOM-070-SSA-1994 para mezcal, NOM-006-SCFI-2012 para tequila y la NOM-142-SSA1/SCF1-2014 para raicilla, ron y coñac.

3 JUSTIFICACIÓN

Las bebidas alcohólicas se componen mayoritariamente de etanol y agua, sin embargo, los compuestos volátiles son los que definen sus propiedades organolépticas por lo cual es importante estudiar los compuestos orgánicos volátiles mayoritarios y minoritarios presentes para realizar una caracterización química de los mismos.

3.1 HIPÓTESIS

Si se obtienen los perfiles de compuestos orgánicos volátiles mayoritarios y minoritarios por medio de MEFS-CG-EM entonces se podrán caracterizar los diferentes tipos de bebidas alcohólicas.

4 ANTECEDENTES

4.1 BEBIDAS ALCOHOLICAS

Es el producto obtenido por fermentación principalmente alcohólica de la materia prima vegetal que sirve como base, sometida o no a destilación, rectificación, re destilación, infusión, maceración o cocción en presencia de productos naturales, susceptible de ser añejada, madurada o envejecida según sea el caso, y puede ser adicionada de ingredientes y aditivos. Su contenido alcohólico es de 2,0 a 55,0 % Alc. Vol. [11]

4.2 CLASIFICACIÓN DE LAS BEBIDAS ALCOHÓLICAS

Las bebidas alcohólicas por su proceso de elaboración y sus respectivas especificaciones, únicamente se clasifican en (Tabla 1):

- Bebidas Alcohólicas Fermentadas
- Bebidas Alcohólicas Destiladas
- Licores o Cremas
- Cócteles
- Bebidas Alcohólicas Preparadas [12]

Tabla 1. Clasificación de bebidas alcohólicas de acuerdo a su proceso de elaboración y del sustrato del que proceden [13]

Sustrato	Fermentadas	Destiladas
Uva	Vino, champaña	Brandy, coñac
Manzana	Sidra, sidra espumosa	--
Cebada	Cerveza	Whisky
Arroz	Sake	--
Papa, centeno	--	Vodka
Jugo de caña y melazas	--	Ron, aguardiente, cachaça, charanda
Agaves (Maguey)	Pulque	Tequila, mezcal, raicilla, bacanora,

4.3 BEBIDAS ALCOHÓLICAS DESTILADAS

Producto obtenido por destilación de líquidos fermentados que se hayan elaborado a partir de materias primas vegetales en las que la totalidad o una parte de sus azúcares fermentables, hayan sufrido como principal fermentación, la alcohólica, siempre y cuando el destilado no haya sido rectificado totalmente, por lo que el producto deberá contener las sustancias secundarias formadas durante la fermentación y que son características de cada bebida, con excepción del vodka (ya que es sometido a rectificación total), susceptibles de ser abocadas y en su caso añejadas o maduradas, pueden estar adicionadas de ingredientes y aditivos. Con contenido alcohólico de 32,0 hasta 55,0% Alc. Vol. [11]. La NOM-142-SSA1/SCFI-2014 establece las especificaciones para las bebidas alcohólicas destiladas (Tabla 2).

Tabla 2. Especificaciones para bebidas alcohólicas destiladas [11]

Especificaciones	Límite máximo mg/100 mL de alcohol anhidro
Metanol	300.0
Aldehídos	40.0
Furfural	5.0
Alcoholes superiores	500.0

Bebidas alcohólicas destiladas:

- **Mezcal.** Bebida alcohólica regional obtenida por destilación y rectificación de mostos preparados directa y originalmente con los azúcares extraídos de las cabezas maduras de agaves, previamente hidrolizadas o cocidas, y sometidas a fermentación alcohólica con levaduras, cultivadas o no, siendo susceptible de ser enriquecido. Es incoloro o ligeramente amarillento cuando es reposado o añejado en recipientes de madera de roble blanco o encino, o cuando se aboque sin reposarlo o añejarlo. [12]

- **Tequila.** Bebida alcohólica con denominación de origen (D.O) obtenida por destilación de mostos, preparados directa y originalmente del material extraído, en las instalaciones de la fábrica de un Productor Autorizado, derivados de las cabezas de agave de la especie *tequilana weber* variedad azul, previa o posteriormente hidrolizadas o cocidas, y sometidos a fermentación alcohólica con levaduras, cultivadas o no, siendo susceptibles los mostos de ser enriquecidos y mezclados conjuntamente en la formulación con otros azúcares hasta en una proporción no mayor a 49% de azúcares reductores totales expresados en unidades masa. [12]
- **Ron.** Es la bebida alcohólica destilada, obtenida de la destilación de mostos fermentados preparados únicamente con azúcares provenientes de la caña de azúcar. Los destilados podrán ser rectificadas y deben ser sometidos a un proceso. [12]
- **Whisky.** Aguardiente obtenido por la destilación de un mosto fermentado de cereales como (cebada, centeno, maíz) y posterior envejecimiento en barricas de roble. [12]
- **Coñac.** Es la bebida alcohólica destilada de mostos 100% de uva; con D.O, regulada por las disposiciones aplicables por el país de origen (República Francesa). [12]
- **Aguardiente.** Bebida alcohólica destilada que se denomina con las palabras “Aguardiente de ____”, seguida del nombre de la materia prima vegetal que aporte por lo menos el 51% de los azúcares fermentables. Su contenido alcohólico es de 32 a 55 % Alc. Vol. [12]

- **Raicilla.** Bebida alcohólica regional de Jalisco y Nayarit, 100% de maguey que se obtiene por la destilación de jugos fermentados con levaduras espontaneas o cultivadas, extraídos de cabezas maduras de los magueyes previamente cocidos, su contenido alcohólico es de 35 a 55% Alc.Vol. En la elaboración de Raicilla se permiten los magueyes: *Agave maximiliana*, *Agave inaequidens*, *Agave valenciana*, *Agave angustifolia*, *Agave rhodacantha*, entre otros, con la única excepción del *Agave tequilana weber* azul. [12]
- **Bacanora.** Bebida alcohólica regional del estado de Sonora con D.O, obtenida por destilación y rectificación de mostos, preparados directa y originalmente con los azúcares extraídos de la molienda de las cabezas maduras de *Agave angustifolia Haw*, hidrolizada por cocimiento, y sometidas a fermentación alcohólica con levaduras. Es un líquido que, de acuerdo a su tipo, es incoloro o amarillento cuando es madurado en recipientes de madera roble o encino, o cuando se aboque sin madurarlo, su contenido alcohólico es de 38 a 55% Alc. Vol. [12]
- **Cachaça.** Es la denominación típica y exclusiva del aguardiente de caña producida en Brasil, conforme su legislación, la cual contiene una graduación alcohólica de 38 a 48% en volumen a 20°C, obtenida por la destilación del mosto fermentado del jugo de caña de azúcar con características organolépticas peculiares. [12]
- **Charanda.** Bebida alcohólica con denominación de origen obtenida por destilación, en forma continua o discontinua, en la primera destilación (destrozamiento) de mostos fermentados del jugo de la caña de azúcar y que, en combinación con cepas de levaduras cultivadas o no, seleccionadas del mismo jugo, llevan a cabo una fermentación alcohólica de la que, por transformaciones bioquímicas y su posterior destilación, se obtiene esta bebida. La rectificación de este producto se lleva a cabo en alambiques discontinuos que originan los

congenéricos que distinguen al producto. El Charanda es un líquido incoloro o ambarino cuando es madurado en recipientes de madera de roble o encino o cuando se aboca sin madurarlo y debe ser embotellado en la planta de envasado que sea controlada por el propio fabricante, misma que debe estar ubicada dentro de la D.O. Su contenido alcohólico es de 35 a 55% Alc. Vol. Debe cumplir con lo establecido en la NOM-144-SCFI-2000. [12]

- **Licor.** Producto elaborado a base de bebidas alcohólicas destiladas, espíritu neutro, alcohol de calidad o alcohol común o mezcla de ellos; con un contenido no menor de 1.0%(m/v) de azúcares o azúcares reductores totales y agua; aromatizados y saborizados con procedimientos específicos y que pueden adicionarse de ingredientes, así como aditivos y coadyuvantes permitidos. Su contenido alcohólico es de 13.5 hasta 55.0% Alc. Vol. [12]
- **Vodka.** Es la bebida alcohólica destilada obtenida por fermentación alcohólica de mostos provenientes de productos vegetales (papa) y cereales sometidos posteriormente a destilación y rectificación, la cual puede ser total, pudiendo ser tratada con carbón activado u otros adsorbentes permitidos. Puede ser adicionado de edulcorantes, colorantes, aromatizantes y/o aromatizantes permitidos. Con objeto de proporcionar o intensificar su color, aroma y/o sabor, su contenido alcohólico es de 35 a 55% Alc. Vol. [12]

4.4 BEBIDAS ALCOHÓLICAS NO DESTILADAS

Producto resultante de la fermentación principalmente alcohólica de materias primas de origen vegetal, pueden adicionarse de ingredientes y aditivos. Ejemplos de bebidas alcohólicas fermentadas (tabla 4). Con contenido alcohólico de 2,0 hasta 20,0% Alc. Vol. [11]

Bebidas alcohólicas no destiladas:

- **Vino tinto.** Es el vino resultante de la vinificación de los mostos de uvas (*Vitis vinifera*) tintas, con maceración de sus orujos o de la vinificación de uvas cuyo jugo es tinto. [12]
- **Cerveza.** Bebida alcohólica fermentada elaborada con malta, lúpulo y agua potable, o con infusiones de cualquier semilla farinácea procedente de gramíneas o leguminosas, raíces o materia prima vegetal feculenta y/o carbohidratos de origen vegetal susceptibles de ser hidrolizados o, en su caso, azúcares que son adjuntos de la malta. [12]

La diferencia fundamental de las bebidas destiladas respecto a las no destiladas estriba en que después de la fermentación, el líquido es destilado para concentrar el alcohol y algunos congenéricos producidos. La NOM-142-SSA1/SCFI-2014 establece las especificaciones del metanol para las bebidas alcohólicas no destiladas que es de 300 mg/100mL de alcohol anhidro.

4.5 CONGENÉRICOS

El alcohol influye en forma relevante sobre el sabor y el aroma de las bebidas que lo contienen, sin embargo, existen en ellas otros compuestos orgánicos, en cantidades mucho menores, que son también responsables de esos atributos y contribuyen en gran parte a caracterizar las diferentes bebidas etílicas, se denominan congenéricos, y pueden ser alcoholes, aldehídos, cetonas, ácidos orgánicos, ésteres y sustancias con azufre.

Algunos congenéricos provienen del sustrato o de la materia prima inicial y otros son producidos por los microorganismos fermentadores. [14]

Los factores que intervienen en el tipo de congenéricos existentes en una bebida alcohólica son:

- Los microorganismos de fermentación empleados
- La temperatura de fermentación
- La concentración del oxígeno en el medio
- La naturaleza y la concentración del nitrógeno, de los azúcares fermentables, de los aminoácidos y de las vitaminas presentes [14]

Los principales compuestos orgánicos volátiles que se encuentran en las bebidas alcohólicas son:

4.5.1 Alcoholes

En todas las bebidas procedentes de la fermentación alcohólica, el componente mayoritario es el etanol o alcohol etílico.

Etanol. Es obtenido por fermentación, principalmente alcohólica de los mostos o jugos de las materias primas de origen vegetal que contienen azúcares o de aquellas que contienen almidones sacarificables (caña de azúcar, mieles incristalizables, jarabe de glucosa, jarabes de fructosa, cereales, frutas, tubérculos, entre otras) y que dichos mostos o jugos fermentados son sometidos a destilación y rectificación. Su fórmula es $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$. [12]

Es el producto más relevante de la fermentación de los hidratos de carbono (hexosas), aunque también se produce en pequeñas cantidades, por descomposición del ácido L-málico inducida por la levadura *Saccharomyces spp.*

Se le da atención especial, además de ser el componente más abundante en las bebidas alcohólicas después del agua, por sus propiedades fisiológicas, por su intervención

química y fisicoquímica en el medio respecto a los restantes componentes, por su acción frente al desarrollo de microorganismos y por su importancia económica. [15]

Metanol. Es un alcohol que se encuentra presente en todas las bebidas alcohólicas en mayor o menor proporción incluso en trazas. Proviene de la hidrólisis de las pectinas (pectinas solubles y propectinas), de las materias primas vegetales que se fermentan.

La pectina que es una cadena de núcleos galacturónicos (ácido péctico), se esterifica con el alcohol metílico, por esta razón, la fermentación se acompaña de la hidrólisis de este éster, donde se libera el metanol y el ácido péctico se insolubiliza. Por lo tanto, el contenido de metanol está en función del contenido de pectinas de la materia prima vegetal que se fermenta. [11]

El metanol también se conoce como alcohol de madera que acompaña en diferentes procesos de fabricación a las bebidas alcohólicas como parte normal del proceso de fermentación. La toxicidad por ingesta de metanol se debe a que es metabolizado por oxidación a formaldehído y en una segunda oxidación hasta ácido fórmico y afecta a las células retinianas, cardíacas, hepáticas y encefálicas; su excreción es más lenta que la del etanol, presenta un efecto mucho más nocivo para el ser humano y contribuye a desarrollar distintas afecciones tales como: trastornos neurológicos, cirrosis hepática, enfermedades cardiovasculares, ceguera, alteraciones genéticas, hemorragias gastrointestinales, cáncer en cualquier parte del tracto digestivo o incluso la muerte por la alta y excesiva ingestión de bebidas alcohólicas adulteradas. [13]

4.5.2 Alcoholes superiores

Alcoholes de peso molecular superior al alcohol etílico, con más de dos átomos de carbono se denominan alcoholes superiores o aceites de "fusel" (Tabla 3). Tienen interés organoléptico en las bebidas alcohólicas (Tabla 4), e influencia toxicológica; por esto último, se restringe su presencia. Por otro lado, si una bebida alcohólica no tiene alcoholes superiores, puede ser un indicativo de que se encuentra adulterada. La formación de estos alcoholes se efectúa durante la fermentación alcohólica por desaminación de aminoácidos por parte de las levaduras para obtener nitrógeno

amoniaco para su consumo (Tabla 3), a excepción del hexanol, alcohol bencílico y feniletanol que se derivan de materias primas. [15] Por lo que más del 99% de un extracto de bebida alcohólica esta típicamente compuesta de alcoholes superiores (alcoholes fusel), ácidos grasos y algunos ésteres de fermentación; y el 1% restante del extracto está compuesto de miles de compuestos que están presentes en concentraciones cerca de 10^6 - 10^8 veces más bajo que los alcoholes superiores.

Tabla 3. Principales alcoholes superiores y sus precursores [16]


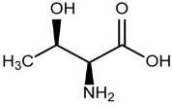
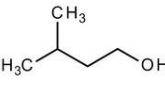
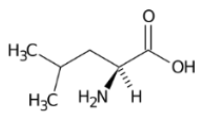
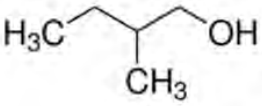
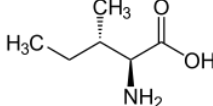
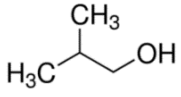
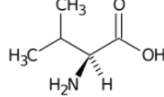
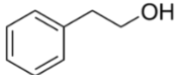
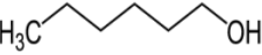
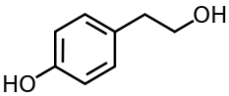
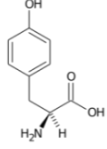
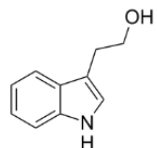
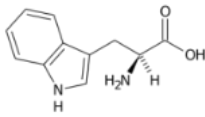
Alcohol superior	Estructura	Aminoácido precursor	Estructura
Propanol		Treonina	
3-metil-1-butanol, (alcohol isoamílico)		Leucina	
2-metil-1-butanol (alcohol amílico)		Isoleucina	
2-metil-1-propanol (Isobutanol)		Valina	
Feniletanol		----	----
Hexanol		----	----
Tirosol		Tirosina	
Triptofol		Triptófano	

Tabla 4. Alcoholes superiores presentes en bebidas alcohólicas: características sensoriales [2]

Nombre del compuesto	Características sensoriales
1-propanol	Olor alcohólico/frutal
2-metil-1-propanol (isobutanol)	Etéreo/frutal
Alcohol isoamílico	Frutal
1-hexanol	Olor frutal/graso
Feniletanol	Floral/madera
1-octanol	Coco graso, verde

4.5.3 Terpenos

Los terpenos derivan, de unidades de isopreno (C₅) unidas en cadena. Los terpenos son una clase de sustancia química que se encuentran en los aceites esenciales, resinas y otras sustancias aromáticas de muchas plantas, como los pinos y muchos cítricos. [17]

Los monoterpenos tienen 10 átomos de carbono (C₁₀), los sesquiterpenos (15) y los diterpenos (20). Pueden ser alifáticos, cíclicos o aromáticos. [17]

Según los grupos funcionales que tengan pueden ser:

- Alcoholes (mentol, bisabolol) y fenoles (timol, carvacrol)
- Aldehídos (geranial, citral) y cetonas (alcanfor, thuyona)
- Ésteres (acetato de bornilo, acetato de linalilo, salicilato de metilo, compuesto antiinflamatorio parecido a la aspirina).
- Éteres (1,8 – cineol) y peróxidos (ascaridol)
- Hidrocarburos (limoneno, α y β pineno) [17]

Los terpenos son sustancias complejas que tienen aromas florales. (Tabla 5)

Tabla 5. Terpenos presentes en bebidas alcohólicas: características sensoriales [2]

Nombre del compuesto	Características sensoriales
Linalol	Floral /olor a rosa
Geraniol	Floral/rosa
Nerol	Floral/rosa
Citronelol	Citronela
α-terpineol	Lilas
Óxido de linalol	Humedad/ a pino
Óxido de rosa	Humedad/ a pino

4.5.4 PAH's

Los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH's, por sus siglas en inglés) son compuestos orgánicos formados al menos por dos anillos fusionados de benceno, los cuales difieren en el número y posición del anillo. Se forman durante la incineración incompleta del carbón, el petróleo, el gas, la madera, la basura y otras sustancias orgánicas, como el tabaco y la carne asada al carbón. [18]

4.5.5 Ésteres

Los ésteres resultan de la combinación de alcoholes orgánicos R^1-OH con ácidos orgánicos R^2-COOH [por ejemplo $R^1-O-C(=O)-R^2$] con eliminación de una molécula de agua. Los monoésteres R^1 y R^2 , normalmente son radicales alquilo o algunas veces radicales arilo, también pueden estar presentes ésteres procedentes de diácidos. [2]

Son producidos durante la fermentación como subproductos del metabolismo de lípidos de la levadura o por reacciones lentas entre los alcoholes y ácidos grasos durante el añejamiento de la bebida alcohólica.

Se reconoce que los ésteres etílicos alifáticos más pequeños, hasta el heptanoato de etilo ($C_2 + C_7 = C_9$), muestran notas frutales de diferentes tipos (en su mayor parte fruta de árboles tropicales, plátano, piña, pero también de manzana, pera, etc.); mientras que sus homólogos superiores tienden hacia notas jabonosas, aceitosas y cera de velas. (Tabla 6) [18]

El succinato de dietilo es un éster que después del envejecimiento aumenta en cantidad. [2]

Tabla 6. Ésteres presentes en bebidas alcohólicas: características sensoriales. [2]

Nombre del compuesto	Características sensoriales
n-butanoato de etilo	Etéreo/ frutal (piña/plátano)
Octanoato de etilo	A jabón/ vela
Nonanoato de etilo	Ligeramente frutal/ aceitoso/ a nuez
Decanoato de etilo	Frutal/aceitoso/floral
Dodecanoato de etilo	Frutal/aceitoso/floral
Tetradecanoato de etilo	Frutal/aceitoso/floral
Succinato de dietilo	Olor agradable/tenue

4.5.6 Aldehídos y cetonas

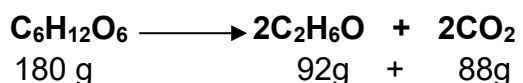
Los aldehídos y cetonas contienen el grupo funcional carbonilo $-C=O$. Los aldehídos son compuestos carbonílicos que se encuentran en la mayoría de las bebidas alcohólicas (Tabla 7), se forman como productos de oxidación secundaria en los procesos de añejamiento de las mismas y durante los procesos de fermentación y destilación de los mostos para obtener bebidas alcohólicas, mediante una reacción en que cada molécula de aldehído se adiciona a una molécula de alcohol para formar un hemiacetal, que es un compuesto inestable, el cual se combina con una segunda molécula de alcohol y produce un acetal, la reacción es reversible y el acetal formado puede ser hidrolizado a aldehído y alcohol en soluciones alcohólicas diluidas. Ambas reacciones son catalizadas por ácidos, debido a esto, aunque estén presentes ambas sustancias es más frecuente la formación de aldehídos que de acetales. [11] Muchas de las cetonas son producidas durante la fermentación y otras derivan de materias primas como las cetonas norisoprenoides: β -damascenona y α -ionona. (Tabla 7)

Tabla 7. Aldehídos y cetonas presentes en bebidas alcohólicas: características sensoriales. [2]

Nombre del compuesto	Características sensoriales
Aldehídos	
Octanal	Graso, naranja
Nonanal	Olor metálico, como a jabón
Decanal	Jabonoso, como cítrico
Dodecanal	Jabonoso
Benzaldehído	Olor a almendras amargas
Cetonas	
2-hexanona	Queso azul
2-heptanona	Olor frutal
2-nonanona	Olor floral/verde
α y β iononas	Violetas, madera de cedro

4.6 FERMENTACIÓN ALCOHÓLICA

Es la transformación de los azúcares de origen vegetal (hidratos de carbono) en alcohol etílico y bióxido de carbono principalmente; ésta es causada por acciones enzimáticas. Las enzimas que son producidas por microorganismos que actúan sobre los azúcares presentes, según la reacción de Gay - Lussac.



La ecuación anterior es general, ya que se debe considerar que, además del alcohol etílico, se forman productos secundarios como alcoholes superiores, compuestos nitrogenados, aldehídos, metanol, ésteres, glicerina, entre otros. Existen diversos géneros de microorganismos los cuales tienen diferentes efectos sobre los azúcares que van a fermentar. [12]

4.7 MEZCAL

Clasificación del mezcal con base en la NOM-070-SCFI-1994, Bebidas alcohólicas-Mezcal-Especificaciones.

De acuerdo al porcentaje de los carbohidratos provenientes del agave que se utilicen en la elaboración del mezcal, éste se clasifica en los tipos siguientes:

Tipo I. Mezcal 100% agave

Es aquel producto que se obtiene de la destilación y rectificación de mostos preparados directa y originalmente con los azúcares de las cabezas maduras de los agaves, previamente hidrolizadas o cocidas y sometidas a fermentación alcohólica con levaduras, cultivadas o no. Este tipo de mezcal puede ser joven, reposado o añejo y susceptible de ser abocado. [19]

Tipo II: Mezcal

Es aquel producto que se obtiene de la destilación y rectificación de mostos en cuya formulación se han adicionado hasta un 20% de otros carbohidratos. Este tipo de mezcal es joven, reposado o añejo y susceptible de ser abocado. [19]

Especies de agaves permitidos para la elaboración del mezcal:

- *Agave angustifolia Haw* (maguey espadín)
- *Agave esperrima Jacobi, Amarilidáceas* (maguey de cerro, bruto o cenizo)
- *Agave weberi cela Amarilidáceas* (maguey de mezcal)
- *Agave potatorum Zucc, Amarilidáceas* (maguey de mezcal)
- *Agave salmiana Otto Ex Salm SSP Crassispina* (Trel) Gentry (maguey verde o mezcalero)
- Otras especies de agave, siempre y cuando no sea utilizadas como materia prima para otras bebidas con denominación de origen dentro del mismo Estado.

4.7.1 Denominación de origen

Algunas bebidas alcohólicas tienen denominación de origen, esto significa que ninguna bebida puede ostentar ese nombre particular si no fue producida dentro de la región específica de esa denominación, con la materia prima del lugar y bajo determinadas normas de proceso y calidad establecidas por las autoridades del país correspondiente y aceptadas en acuerdos internacionales por otros países. Algunas bebidas con denominación de origen son: mezcal, tequila, bacanora, coñac, etc.

Estados con denominación de origen del mezcal: Durango, Guerrero, Guanajuato, Michoacán, Oaxaca, San Luis Potosí, Tamaulipas, Zacatecas [19]

4.7.2 Elaboración del mezcal

La elaboración del mezcal consta de 4 pasos principales (Figura 1)

- **Cocción:** consiste en someter las piñas o cabezas de agave (maguey) a un proceso de exposición lenta al calor, dentro de un sistema cerrado para su ablandamiento y cocción, provocando un proceso de hidrólisis de los fructanos del agave (polisacáridos) y que estos se conviertan en glucosa y fructuosa.
- **Molienda:** Es el proceso mediante el cual el agave cocido es triturado para la obtención del jugo de agave o simplemente desfibrar las piñas de agave para acelerar la extracción de los azúcares durante la fermentación.
- **Fermentación:** Los jugos obtenidos de la molienda, son diluidos y puestos en reposo para inducir la fermentación, a través de la cual, los azúcares son transformados en alcohol, en la mayoría de los casos, los productores que realizan el proceso mediante técnicas artesanales mezclan junto con el jugo, el bagazo triturado.

- **Destilación:** En el proceso de elaboración de mezcal, la destilación es un método empleado para separar y concentrar los componentes químicos y sensoriales producidos en las etapas de proceso previas, desde el cocimiento hasta la fermentación, aprovechando para ello las distintas propiedades fisicoquímicas y termodinámicas de los mismos. Entre dichas propiedades se puede mencionar el punto de ebullición, la volatilidad, la presión vapor, la solubilidad y la polaridad, entre otras. La segunda destilación o rectificación, conocida también como "refinada" entre los productores, tiene como objetivo alcanzar un grado alcohólico superior al 40% alcoholen volumen en el destilado. [19]

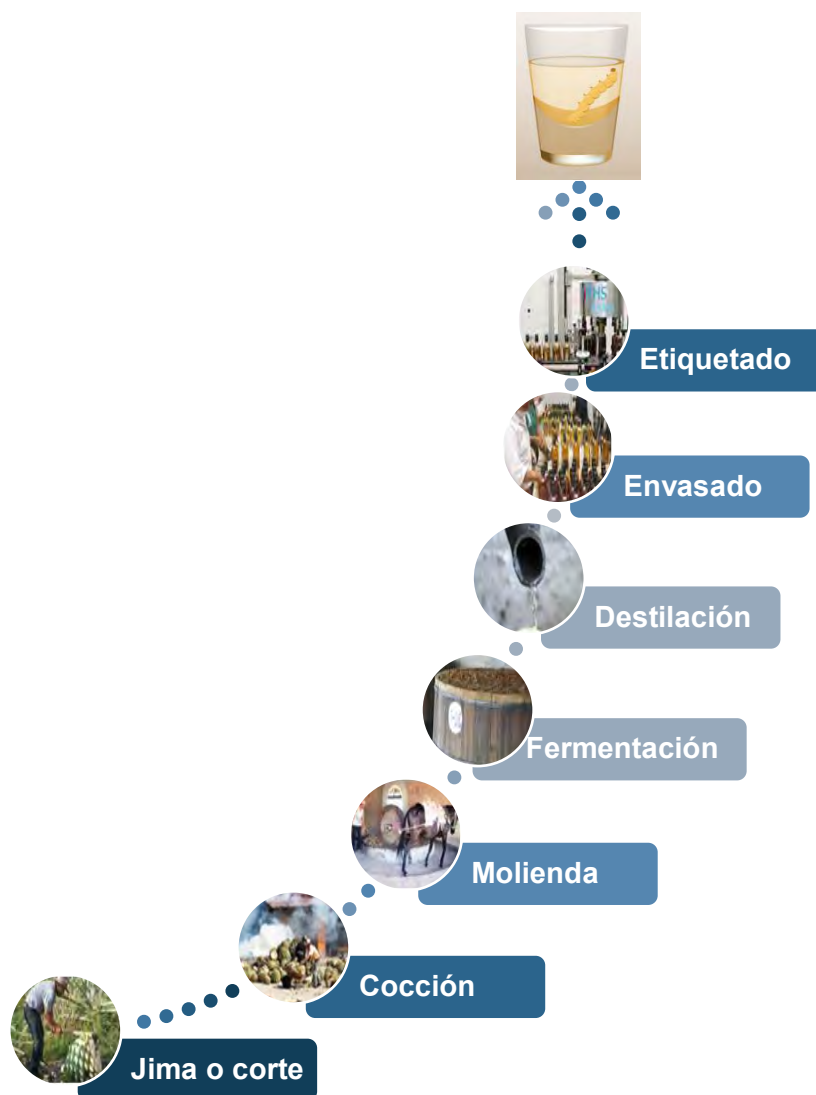


Figura 1. Proceso de elaboración del mezcal

4.8 LEGISLACIÓN

El estado tiene bajo su resguardo bienes que debe cuidar como: bosques, playas, agua, vías de comunicación y sobre todo a los ciudadanos. Para proteger a estos últimos se crearon las normas oficiales mexicanas (NOM) las cuales están definidas como regulaciones técnicas que contienen la información, requisitos, especificaciones, procedimientos y metodología que deben cumplir los bienes, servicios o instrumentos de medición que se comercializan en el país. Es decir, las NOM son herramientas que permiten a las distintas dependencias gubernamentales establecer parámetros evaluables para evitar riesgos a la población, a los animales y al medio ambiente.

Ya que las NOM tienen como principal objetivo prevenir riesgos a la salud, vida, patrimonio, medio ambiente y seguridad laboral son de observancia obligatoria. Cualquier producto o servicio que no cumpla con las especificaciones establecidas en la o las NOM con las que esté relacionado, no puede comercializarse en México.

La NOM-142-SSA1/SCFI-2014, Bebidas alcohólicas. Especificaciones sanitarias. Etiquetado sanitario y comercial. Estipula los límites permitidos para las bebidas alcohólicas destiladas y no destiladas. De acuerdo con la Norma Oficial Mexicana NOM-070-SCFI-1994, Bebidas alcohólicas-mezcal-especificaciones establece que el contenido de alcoholes superiores se debe de encontrar en un intervalo de 100 a 400 mg/100 mL y para metanol de 30 a 300mg/100mL referidos a alcohol anhidro. [19] La NOM-006-SCFI-2012 Bebidas alcohólicas-Tequila-Especificaciones estipula que el contenido de alcoholes superiores debe estar en un intervalo de 20 a 500 mg/100 mL y para metanol de 30 a 300mg/100mL referidos a alcohol anhidro.

Con base en esto se analizarán las muestras y se verificara si cumplen con las especificaciones de acuerdo a la normatividad correspondiente.

5 FUNDAMENTOS ANALÍTICOS

5.1 CROMATOGRAFÍA DE GASES

La cromatografía de gases es un método físico de separación basado en la distribución del analito entre dos fases. Se hace pasar el analito (gas o líquido volátil) en forma gaseosa a través de la columna (fase estacionaria), arrastrado por una fase móvil gaseosa, llamada gas portador. La fase móvil normalmente es He, N₂ o H₂, la fase estacionaria: normalmente es un líquido no volátil, pero también puede ser un sólido. [20] En la tabla 8 se presentan las principales ventajas y desventajas de la cromatografía de gases.

Tabla 8. Ventajas y desventajas de la cromatografía de gases

Ventajas	Desventajas
<ul style="list-style-type: none"> ● Alta resolución ● Alta velocidad 	<ul style="list-style-type: none"> ● La muestra debe ser volátil ● Las muestras “sucias” requieren limpieza
<ul style="list-style-type: none"> ● Alta sensibilidad ● Alta precisión 	

5.2 INSTRUMENTACIÓN

Los componentes básicos de un instrumento para la cromatografía de gases se muestran a continuación (Figura 2):

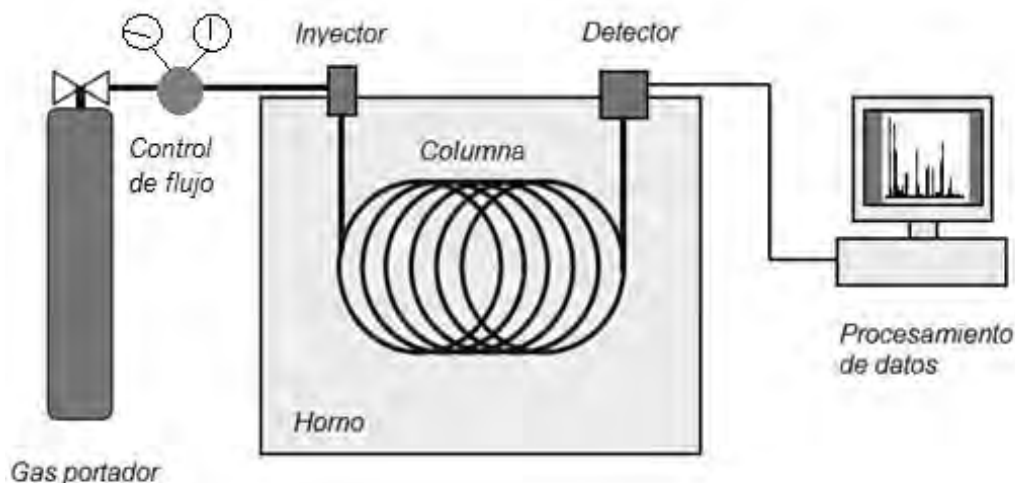


Figura 2. Componentes de un cromatógrafo de gases. [21]

5.2.1 Gas portador

La fase móvil se denomina gas portador, ya que es un gas inerte cuya finalidad es transportar las moléculas de la muestra a través de la columna.

El propósito primario del gas portador es transportar los componentes volátiles de la muestra a través de la columna. El gas deberá ser inerte y no reaccionar ni con la muestra ni con la fase estacionaria. Hidrogeno, helio y nitrógeno de alta pureza son utilizados como gas portador. El propósito secundario es el de obtener una matriz adecuada para que el detector mida el componente de la muestra. [21]

5.2.2 Control de flujo

La medición y el control del caudal del gas portador son esenciales tanto para la eficiencia de la columna como para el análisis cualitativo. La eficiencia de la columna depende de la velocidad lineal apropiada del gas. [22]

5.2.3 Sistema de inyección de muestra

El propósito del inyector es el de introducir la muestra en la columna. [20] La eficacia de la columna requiere que la muestra sea de un tamaño adecuado y que sea introducida como un tapón de vapor, la inyección lenta de las muestras demasiado grandes provoca un ensanchamiento de las bandas y una pobre resolución. Los diferentes tipos de inyectores y sus características son: [16, 17, 13]:

- **Inyección con división de flujo (Split injection):** Si los analitos que interesan constituyen $>0.1\%$ de la muestra. El inyector caliente vaporiza la muestra, mezclado con gas portador. Usa válvula de purga para dividir (Split) la muestra. Pone una fracción de la muestra en la columna (relación de Split).
- **Inyección sin división de flujo (Splitless injection):** Es apropiada para análisis de traza de analitos que constituyen menos de 0.01% de la muestra. Se inyecta la muestra caliente y sin purga, con ello se logra ingresar una mayor cantidad de muestra a la columna y se elimina el disolvente.
- **En columna en frío (On-column injection):** Se usa para muestras que se descomponen por encima de su punto de ebullición. La disolución se inyecta directamente en la columna, sin pasar por un inyector caliente.

5.2.4 Columnas

En la columna efectúa la separación. Los dos tipos de columnas que se usan en cromatografía de gases son las empacadas y las capilares. Una columna empacada se llena con partículas que contienen la fase estacionaria. La columna capilar es un tubo hueco, abierto y estrecho con la fase estacionaria cubriendo las paredes interiores.

Las columnas empacadas se construyen con tubo de acero inoxidable, níquel o vidrio. Los diámetros interiores van de 1.6 a 9.5mm. Con frecuencia la longitud es de 3m. Estas columnas, contienen un soporte sólido de partículas finas recubiertas de una fase estacionaria líquida no volátil, o el sólido mismo es la fase estacionaria (Figura 3).

Las columnas capilares están hechas de sílice fundida (SiO_2 , un vidrio de muy alta pureza) y recubiertas de poliimida (un plástico capaz de resistir 350°C) como soporte y como protección de la humedad atmosférica. Los diámetros interiores típicos son de 0.1 a 0.53mm, y las longitudes típicas, de 15 a 100m. Tienen una trayectoria para el flujo abierta y sin restricción por en medio de la columna. Se dividen en columna tubular abierta de pared recubierta (WCOT, de wall-coated open tubular): la fase estacionaria líquida recubre el interior de la columna, columnas tubulares abiertas recubiertas de soporte (SCOT, de support-coated open tubular): la fase estacionaria líquida recubre a un soporte sólido, que se encuentra unido a la pared interior de la columna y columnas tubulares abiertas con capa porosa (PLOT, de porous-layer tubular): la pared interior está cubierta de una fase estacionaria sólida (Figura 3) [23]

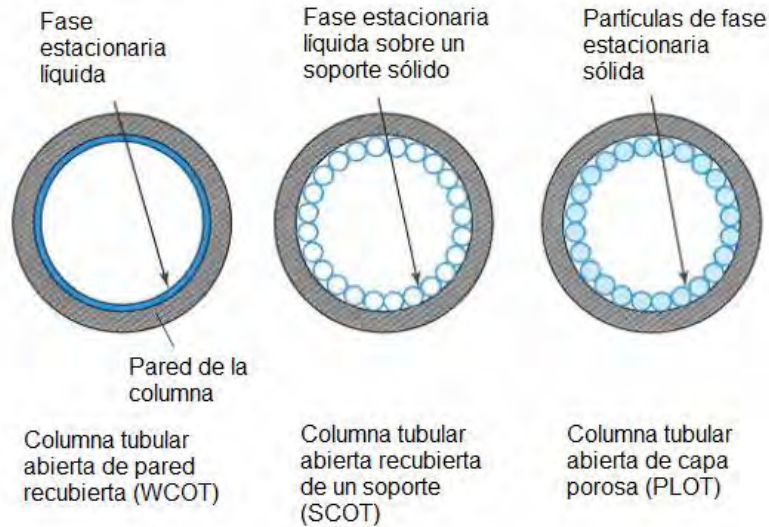


Figura 3. Sección transversal de columnas de pared recubierta de fase estacionaria líquida, sólida y capa porosa. [20]

5.2.5 Sistema de detección

El detector es el sistema encargado de poner de manifiesto la presencia de solutos o componentes de la muestra que abandonan el sistema. Las principales características de un detector; son alta sensibilidad, bajo ruido, respuesta, recorrido lineal, simplicidad, costo, disponibilidad y durabilidad [20]

Detectores empleados en cromatografía de gases: [13, 16, 17]

- **Conductividad Térmica (DCT).** Es universal, responde a todas las sustancias; He como gas acarreador. Mide la capacidad de una sustancia para transmitir calor de una región caliente a una fría. El eluato que sale de la columna pasa por un filamento caliente de wolframio-renio. Cuando sale de la columna un analito disminuye la conductividad de la corriente del gas, el filamento se calienta, aumenta su resistencia eléctrica y varía el voltaje a lo largo del mismo.

- **Ionización de Flama (FID).** Todas las sustancias orgánicas. Es selectivo. Bueno para hidrocarburos. El eluato se quema en una mezcla de H₂ y aire. Los átomos de carbono (excepto los de carbonilos y carboxilos) producen radicales CH, que producen iones CHO⁺. Los cationes que se producen en la llama conducen la corriente eléctrica desde la punta del quemador que actúa de ánodo y un colector catódico. Esta corriente eléctrica es la señal del detector.
- **Fotométrico de Flama (FPD).** Para compuestos con átomos de azufre (393 nm) y de fósforo (526 nm). Es específico. Mide la emisión óptica procedente del fósforo y azufre. Cuando el eluato pasa por una llama de H₂-aire, análoga a la de un detector de ionización de llama, los átomos excitados emiten luz característica.
- **Nitrógeno-Fósforo.** Selectivo para compuestos que contienen N, P. Es selectivo. Gas portador: H₂. Cuando estos elementos se ponen en contacto con una bola de vidrio, que contienen Rb₂SO₄ y que está en la punta de un mechero, producen iones que crean una corriente que se puede medir.
- **Captura de Electrones.** Moléculas que tienen halógenos, carbonilos conjugados, nitrilos, nitrocompuestos y compuestos órgano metálicos, no responde a hidrocarburos alcoholes y cetonas. Es selectivo. Gas portador: N₂ o Ar con un 5% de metano. El gas que entra en el detector se ioniza por electrones de gran energía (“rayos beta”) emitidos por una lámina que contiene Ni⁶³ radiactivo. Los electrones así formados son atraídos por un ánodo, produciendo una pequeña corriente continua. Cuando llegan moléculas de analito de gran electronegatividad captan algunos electrones. El detector responde modificando la frecuencia de los impulsos de voltaje entre el ánodo y el cátodo para mantener constante la corriente.

5.3 ESPECTROMETRÍA DE MASAS

La espectrometría de masas es una técnica instrumental que produce, separa y detecta iones en fase gaseosa; las partes básicas de un espectrómetro de masas se muestran en la Figura 4.

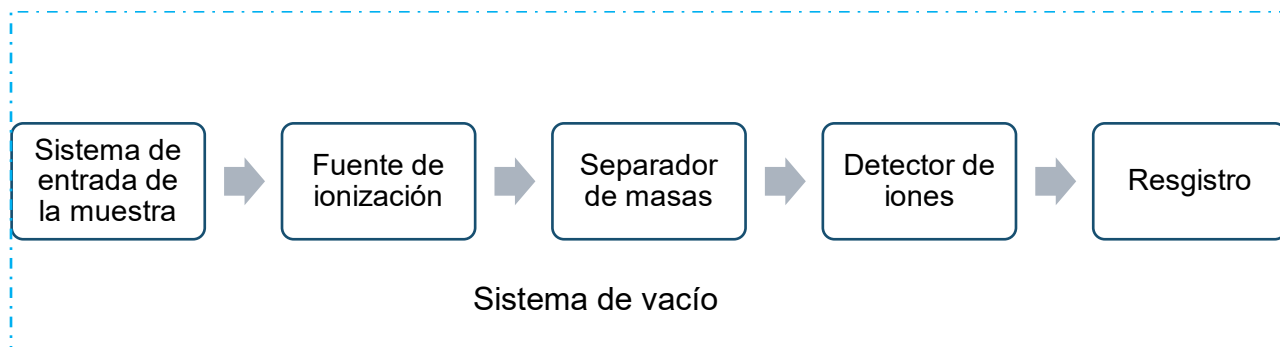


Figura 4. Partes básicas de un espectrómetro de masas. [24]

Una muestra con una presión de vapor moderadamente alta se introduce en un sistema de admisión, que trabaja a un vacío de 10^{-4} a 10^{-7} torr y a alta temperatura, hasta 300°C . La muestra se evapora y fluye hacia la fuente de ionización. Las moléculas del analito se deben ionizar, lo que se logra con varios métodos, aunque lo habitual es bombardearla con electrones de alta energía ($\approx 70\text{eV}$) en una fuente de impacto electrónico.

Los iones se separan en el espectrómetro a través de un acelerador de masas. Se realiza la separación de acuerdo con las relaciones masa carga (m/z) de los iones. [20] [24]

Para obtener iones a partir de la muestra, ésta se introduce en una fuente de ionización. Ésta ionización puede lograrse mediante diferentes procedimientos como ionización por impacto electrónico, ionización química (IQ), ionización por bombardeo de iones, ionización por desorción del campo y ionización por partículas neutras (IPN; bombardeo atómico rápido, FAB).

5.3.1 Ionización por impacto electrónico (IE)

Es el método más antiguo y el que más se utiliza. La muestra se somete a un bombardeo de gran energía (generalmente de 70 eV) y se transforma en un ion positivo:



El ion m^{+} es el ion radical positivo (pérdida de un solo electrón) correspondiente al peso molecular, se le llama ion molecular.

Los electrones provienen de un filamento que está a alta temperatura. El conjunto del sistema alcanza una temperatura considerable pero variable, de manera que garantice la volatilidad de la muestra (por ejemplo: 50 a 250°C), además, la presión es muy pequeña (del orden de 10^{-5} torr). Este método proporciona una fragmentación grande.

El analizador de masas tiene el propósito de separar los iones de acuerdo con su relación masa/ carga (M/Z). Los analizadores de masas más comunes son aquellos con sector magnético y filtro cuadrupolar. [20]

5.3.2 Analizador cuadrupolar

Consta de cuatro varillas metálicas paralelas a las que se aplica un voltaje constante y un voltaje oscilante de radiofrecuencia. El campo eléctrico desvía los iones en trayectorias complejas, a medida que pasan de la cámara de ionización al detector, permitiendo que solo lleguen al detector aquellos que tienen una relación m/z determinada. Los demás iones (iones no resonantes) chocan con las varillas, y se pierden antes de llegar al detector. Variando rápidamente el voltaje aplicado, se pueden seleccionar los iones de diferentes masas que llegan al detector. [20]

5.3.3 Detectores

Los iones procedentes del sistema acelerador llegan al multiplicador el cual generalmente está constituido por un cátodo emisor que al recibir el impacto producido por las partículas cargadas emite electrones. Estos electrones son acelerados hacia un dínodo el cual emite varios electrones más al recibir el impacto de cada electrón. Este proceso se repite varias veces hasta obtenerse una cascada de electrones que llega al

colector lográndose una corriente fuertemente amplificada, por un procedimiento muy similar al que se utiliza en los tubos fotomultiplicadores. La corriente obtenida puede amplificarse de nuevo por procedimientos electrónicos y se lleva a un sistema registrador. [20]

5.4 CROMATOGRAFÍA DE GASES ACOPLADO A ESPECTROMETRÍA DE MASAS (CG-EM)

Aunque la espectrometría de masas es una poderosa herramienta para la identificación de compuestos puros, la complejidad de los espectros de masas dificulta el análisis de mezclas. Por ello para el análisis de muestras complejas se emplean acoplamientos de esta técnica con técnicas potentes de separación, como es la cromatografía.

El acoplamiento Cromatografía de gases- Espectrometría de masas (CG-EM) es un equipo de gran importancia en los laboratorios analíticos debido a su gran sensibilidad (límite de detección de picomoles). En este caso se efectúan los espectros de masas de los compuestos que salen de la columna cromatográfica. Es necesaria una interfase entre ambos instrumentos que tiene como misión fundamental pasar de la alta presión a la que sale el efluente cromatográfico, al vacío necesario en el espectrómetro de masas. [25]

5.5 PREPARACIÓN DE MUESTRA

La preparación de muestra es el proceso de transformación de una muestra en una forma adecuada para ser analizada. [20] la metodología de preparación de muestra a aplicar en cada caso debe ser escogida en función de las características de la matriz, algunas de las técnicas de preparación de muestra más utilizadas son: microextracción en fase sólida (SPME, por sus siglas en inglés), extracción en fase sólida (SPE, por sus siglas en inglés), extracción líquido-líquido (LLE, por sus siglas en inglés), Extracción por sorción con barra magnética agitadora (SBSE, por sus siglas en inglés). [3]

A parte de algunas sustancias, los componentes en las bebidas alcohólicas están presentes a niveles muy bajos ($\mu\text{g/L}$) e incluso trazas (ng/L o menos). Por lo que requieren métodos altamente sensibles para su detección y cuantificación, o necesitan ser concentrados por una técnica extractiva de preparación de muestra antes del análisis. [3]

5.5.1 Microextracción en fase sólida

La microextracción en fase sólida (MEFS), es una técnica de preparación de muestra desarrollada por Belardi y Pawliszyn en 1989. Se basa en la utilización de una fibra de sílice fundida recubierta de una fina película, de 10 a 100 μm , de un líquido no volátil, semejante a las fases estacionarias utilizadas en cromatografía de gases. La fibra está incorporada a la base de una jeringa con una aguja metálica fija. (Figura 5), esta puede emerger de la aguja y se puede introducir dentro de ella, es decir es retráctil. Entre sus ventajas están que no requiere disolventes orgánicos para el proceso de extracción, es simple ya que integra el proceso de extracción e inyección en un mismo dispositivo y no requiere de grandes volúmenes de muestra. [4]

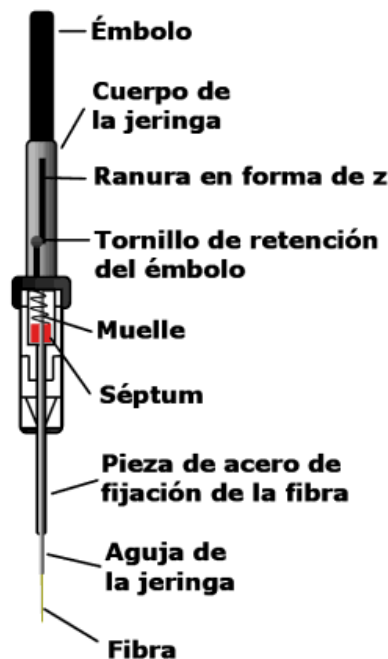


Figura 5. Dispositivo para MEFS [3]

Los analitos presentes en la muestra, por lo general, no se extraen cuantitativamente en la fibra, sino que se establece un equilibrio entre las fases existentes en el vial en donde se lleva a cabo el proceso de extracción. A diferencia de la SPE (extracción en fase sólida), MEFS no precisa de disolventes orgánicos y requiere de manipulación mínima de la muestra. [4]

La microextracción en fase sólida es una técnica de equilibrio en la que se produce la distribución del analito en las tres fases del sistema (recubrimiento de la fibra, fase gaseosa o espacio de cabeza y una matriz homogénea), la masa de un analito extraído por el recubrimiento polimérico está relacionado con el equilibrio global del analito en el sistema de tres fases. Puesto que la masa total de un analito debe permanecer igual durante la extracción como la cantidad inicial, tenemos que:

$$C_0 V_1 = C_f^\infty V_f + C_h^\infty V_h + C_s^\infty V_s$$

En donde, C_0 es la concentración inicial del analito en la matriz, C_f^∞ , C_h^∞ y C_s^∞ son las concentraciones al equilibrio del analito en el recubrimiento de la fibra, el espacio cabeza y en la matriz, respectivamente; V_f , V_h y V_s son los volúmenes del recubrimiento de la fibra, el espacio de cabeza y la matriz respectivamente.

Los coeficientes de reparto entre las tres fases presentes en el vial de extracción vienen dados por K_{fh} , K_{hs} y K_{fs}

Si se define el recubrimiento/ distribución del gas constante como $K_{fh} = \frac{C_f^\infty}{C_h^\infty}$ y el gas/distribución de la muestra en la matriz constante como $K_{hs} = \frac{C_h^\infty}{C_s^\infty}$, la masa del analito absorbida por el recubrimiento de la fibra $n = C_f^\infty V_f$ puede ser expresada como:

$$n = \frac{K_{fh} K_{hs} V_f C_0 V_s}{K_{fh} K_{hs} V_f + K_{hs} V_h + V_s}$$

Cuando se alcanza el equilibrio:

$$K_{fs} = K_{fh}K_{hs}$$

Sustituyendo en la ecuación anterior:

$$n = \frac{K_{fs}V_f C_0 V_s}{K_{fs}V_f + K_{hs}V_h + V_s}$$

Esto es, que en condiciones de equilibrio, la cantidad de analito extraído será independiente de la localización de la fibra en el sistema. Por lo que, la fibra puede colocarse en modo espacio de cabeza o en inmersión, siempre que los volúmenes del recubrimiento de la fibra, el espacio de cabeza y la muestra se mantengan constantes. [4]

Existen distintos tipos de recubrimientos utilizados como fases extractantes en MEFS. (Tabla 9)

Tabla 9. Recubrimientos comerciales utilizados.

Fase estacionaria	Espesor de fase (μm)	Polaridad	Temperatura máxima desorción (°C)
PDMS	100	Apolar	280
	30		280
	7		340
PA (Poliacrilato)	85	Polar	320
PDMS/DVB	65	Semipolar	270
CAR/PDMS	75	Semipolar	340
DVB/CAR/PDMS	50/30	Semipolar	270

El proceso de microextracción en fase sólida se desarrolla en dos etapas básicas (Figura 6):

1. Etapa de extracción: Se expone la fibra a la muestra contenida en un vial sellado para que se produzca la migración de los analitos desde ésta hasta la fibra durante un tiempo dado, mientras se agita y si conviene también calentando.
2. Etapa de desorción de la fibra de MEFS: Una vez tomada la muestra, se repliega la fibra y se introduce la aguja dentro de un inyector de un cromatógrafo de gases. Se retrae la fibra dentro de la guía caliente del inyector, en cuyo interior el analito se desorbe térmicamente de la fibra, y se introduce sin división de flujo (modo splitless) durante un tiempo fijo. [3]



Figura 6. Procedimiento de extracción y desorción [3]

El muestreo puede llevarse a cabo de tres modos diferentes, según las características de los analitos y de la muestra (Figura 7):

- A) Extracción por inmersión: Se introduce la fibra directamente en la muestra líquida, produciéndose la migración directa de los analitos desde la matriz hasta la fibra. Se suele seleccionar cuando las muestras son relativamente sencillas y los analitos poco volátiles.
- B) Extracción en espacio de cabeza: La fibra es expuesta al espacio de cabeza existente sobre la muestra, de modo que los analitos pasan de la muestra al espacio de cabeza, y de ahí, al recubrimiento polimérico. Es adecuado para compuestos volátiles en matrices que sufren tratamientos drásticos (modificaciones de pH, digestiones ácidas o básicas, etc.) siendo además selectivo con respecto a aquellos analitos de elevado peso molecular.
- C) Extracción a través de una membrana: Entre la fibra y la muestra, se sitúa una membrana que evita el deterioro que se puede producir al analizar muestras complejas en la modalidad inmersión. Su mayor limitación radica en la existencia de una barrera física entre la muestra y la fibra, que ralentiza enormemente la cinética del proceso de extracción. [4]

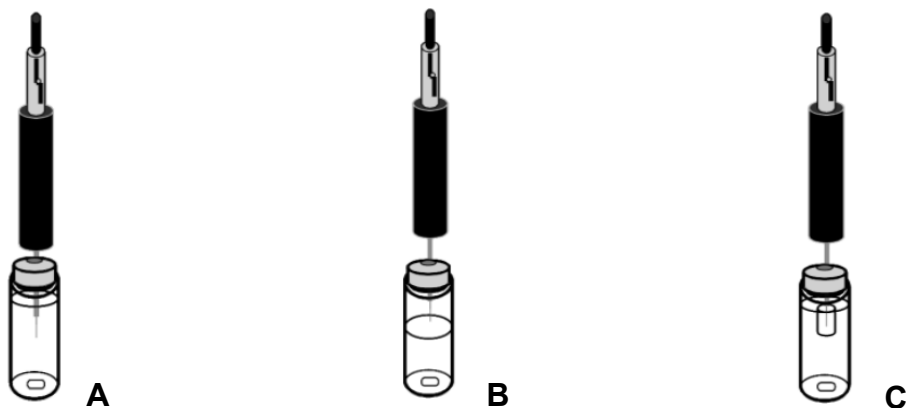


Figura 7. Modos de muestreo MEFS: A) Muestreo por inmersión, B) Muestreo en espacio de cabeza y C) Muestreo con membrana [3]

Una vez alcanzado el equilibrio, la cantidad de analito extraído será independiente del volumen de muestra y directamente proporcional a su concentración inicial en la muestra, el volumen de fase contenida en la fibra y la constante de reparto entre la fibra y la muestra.

Una elevada afinidad de la fibra por los analitos es esencial, ya que la matriz y la fibra están compitiendo por las especies.

Desde el punto de vista cinético, la MEFS se basa en la *segunda Ley de difusión de Fick*, ya que se produce una difusión de los analitos desde el seno de la disolución acuosa a la fase estacionaria que recubre la fibra.

Entre los parámetros que afectan a la eficacia de la MEFS, los más importantes son:

- **Temperatura:** Afecta la cinética de extracción y a la cantidad de analito sobre la fibra en equilibrio. Al aumentar la temperatura se acelera la transferencia de materia desde la matriz a la fibra, haciendo que la cinética sea más rápida, mientras que, en condiciones de equilibrio, al ser la MEFS un proceso exotérmico, disminuye la masa de analito incorporada en la fibra.
- **Tiempo de extracción:** La MEFS es una técnica de equilibrio entre las fases existentes, pero muchas veces es imposible trabajar en esas condiciones. Por ello, desde el punto de vista práctico, se utilizan tiempos menores que el necesario para alcanzar el equilibrio, trabajando entonces en condiciones cinéticas.
- **Efecto salino:** La adición de sales (NaCl, KCl, etc.) provoca un aumento de la fuerza iónica, variando entonces las constantes de distribución entre los analitos, entre la muestra y la fibra y con ello, la eficacia del proceso extractivo.
- **pH de la muestra:** Cuando tenemos compuestos con grupos ácidos o básicos, el pH afecta al grado de disociación de los mismos, y por lo tanto a su solubilidad.

- **Volumen de espacio de cabeza:** Cuando se lleva a cabo el muestreo en la modalidad de espacio de cabeza, el volumen del mismo será muy importante, ya que, si es muy grande, los compuestos volátiles se diluyen en éste, disminuyendo su concentración en la fibra. Además, a menor tamaño del espacio de cabeza, más rápida es la cinética del proceso de extracción.
 - **Agitación de la muestra:** La agitación favorece la difusión de los analitos que se encuentran en la matriz acuosa hasta la fibra, acelerando la cinética de extracción.
- [3]

6 DESARROLLO EXPERIMENTAL

6.1 MATERIALES Y REACTIVOS

- Estándares: metanol 99.8% de pureza (Tecsiquim, México), propanol 99% de pureza, (Merck, Alemania), isobutanol 99.5% de pureza (Aldrich Chemical, USA), alcohol isoamilico 99.8% de pureza (J.T. Baker, USA), hexanol 98% de pureza (Sigma-Aldrich, U.S.A), feniletanol 99.1% de pureza (Chem service, USA)
- Etanol grado HPLC, 99.9% (J.T. BAKER, USA)
- Fibras de sílice fundida de PDMS/DVB (Polidimetilsiloxano/divinilbenceno) con espesor de 65 μm y SPME holder (SUPELCO, USA)
- Agitador magnético de 3 x 13 mm
- Parrilla de agitación (Mirak Thermolyne SP 72725)
- Viales de vidrio de 8mL, tapones horadados con septas.
- Jeringa Hamilton de 10 μL
- Cloruro de sodio (J.T. Baker,)
- Agua desionizada (Sistema de purificación Milli-Q)
- Balanza analítica (Sartorius CP124S)
- Material de vidrio clase A, matraces aforados de 5, 10 y 25mL; pipetas volumétricas de 1,2,3,4,5 y 10mL

6.2 METODOLOGÍA

Las muestras de bebidas alcohólicas fueron analizadas con los procedimientos desarrollados previamente en el laboratorio para el análisis del mezcal. La selección de la fibra y el método utilizado fue el reportado por Reyes D. (2006). [26]

6.2.1 Determinación de compuestos orgánicos volátiles por MEFS-CG-EM

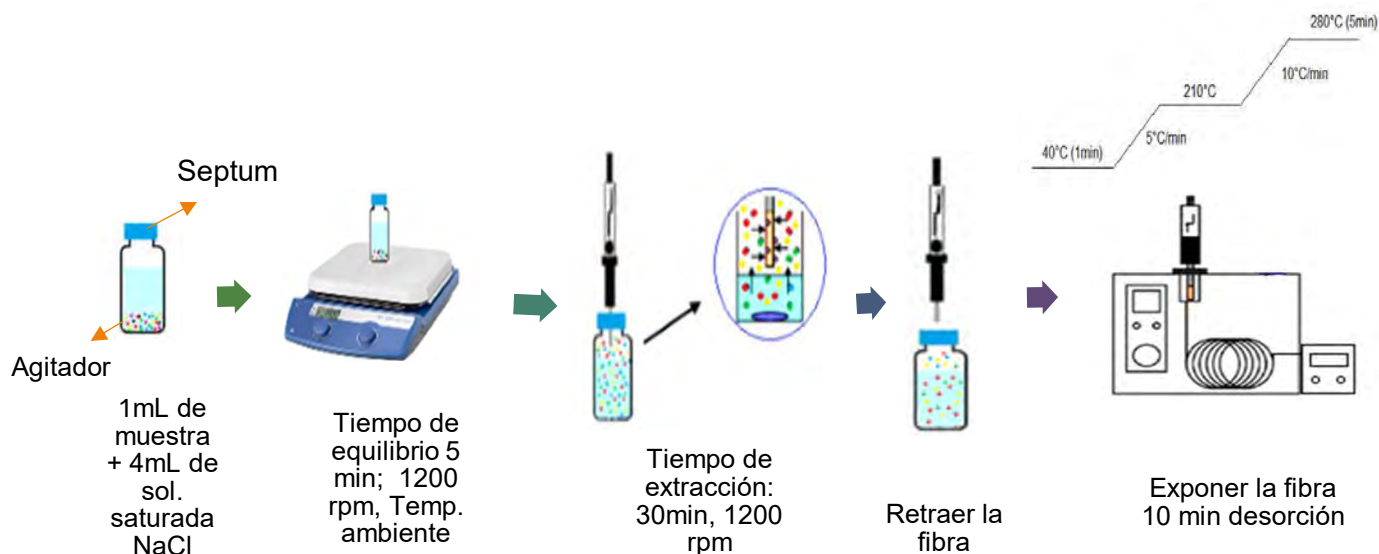
En un vial de 8 mL se coloca 1 mL de muestra, 4 mL de solución saturada de NaCl; y un agitador magnético, el vial se cierra con un tapón horadado y una septa de teflón.

El vial se coloca en la parrilla de agitación durante 5 min. a 1200 rpm (tiempo de equilibrio) a temperatura ambiente. Una vez transcurrido el tiempo de equilibrio se perfora el septum con la aguja de la jeringa que contiene en su interior a la fibra PDMS/DVB, (previamente se acondiciona la fibra durante 30 minutos con una temperatura del inyector de 250°C la primera vez que se utiliza, posteriormente se realizan blancos de fibra). Se expone la fibra en el espacio de cabeza existente sobre la muestra durante 30 min. (tiempo de extracción). Una vez concluido el tiempo de extracción, se retrae la fibra retirándose el holder del vial, inmediatamente después, el holder se introduce en el inyector del cromatógrafo de gases y la fibra se expone, donde los analitos son desorbidos térmicamente 10 min. (Esquema 1).

Cromatografía de gases-espectrometría de masas (CG-EM)

Se utilizó un cromatógrafo de gases Agilent 6890N equipado con un inyector Split/splitless y una columna capilar ZB-5 (30m x 0.25 mm DI x 0.25 μ m). Temperatura del inyector: 250°C en modo splitless (1 min). Programa de temperatura utilizado: 40°C iniciales durante 1 min, incrementándose la temperatura a 5°C/min hasta 210°C aumentando 10°C/min hasta 280°C y manteniéndose constante durante 5 min. El gas acarreador fue He con flujo de 1mL/min. El cromatógrafo está acoplado con un detector selectivo de masas Agilent 5973. Temperatura de la línea de transferencia a 280°C, fuente de ionización 230°C, analizador (cuadrupolar) 150°C y detector 75°C. Los análisis se realizaron por impacto electrónico (70eV). Se utilizó el modo de barrido total del espectro (SCAN) DE 50 A 550 m/z a 1.5 scan s⁻¹. Para la identificación se compararon

los espectros obtenidos con los espectros de la base de datos NIST (Standard Reference Data of National Institute of Standards and Technology, considerando como criterio un match mínimo de 600 (Anexo II).



Esquema 1. Determinación de compuestos orgánicos volátiles de bebidas alcohólicas por MEFS-CG-EM

6.2.2 Determinación de metanol y alcoholes superiores

6.2.2.1 Identificación de metanol y alcoholes superiores

Se pesaron 100mg de estándares de los alcoholes: metanol, propanol, isobutanol, alcohol isoamílico, hexanol y feniletanol en un matraz volumétrico de 10mL y se aforaron con etanol para obtener una concentración de 10 000ppm. A partir de la disolución anterior se tomó una alícuota de 1 mL y se aforaron con 10mL de etanol al 40%v/v obteniendo una concentración de 1 000ppm. De esta disolución se inyectó 1 μ L al CG-FID. Después se inyectó 1 μ L de cada bebida alcohólica (mezcal, ron, tequila, raicilla y coñac) y se comparó el tiempo de retención de los estándares de metanol y alcoholes

superiores (propanol, isobutanol, alcohol isoamilico, hexanol y feniletanol) con los picos cromatográficos de las muestras. (Esquema 2).

Cuantificación de metanol y alcoholes superiores

La cuantificación de metanol y alcoholes superiores en mezcal, ron, tequila, raicilla y coñac se realizó con curvas de calibración de metanol, propanol, isobutanol, alcohol isoamilico, hexanol y feniletanol en etanol al 40% v/v por triplicado (Anexo I). Se analizó cada bebida alcohólica para definir el intervalo de concentraciones de las curvas de calibración.

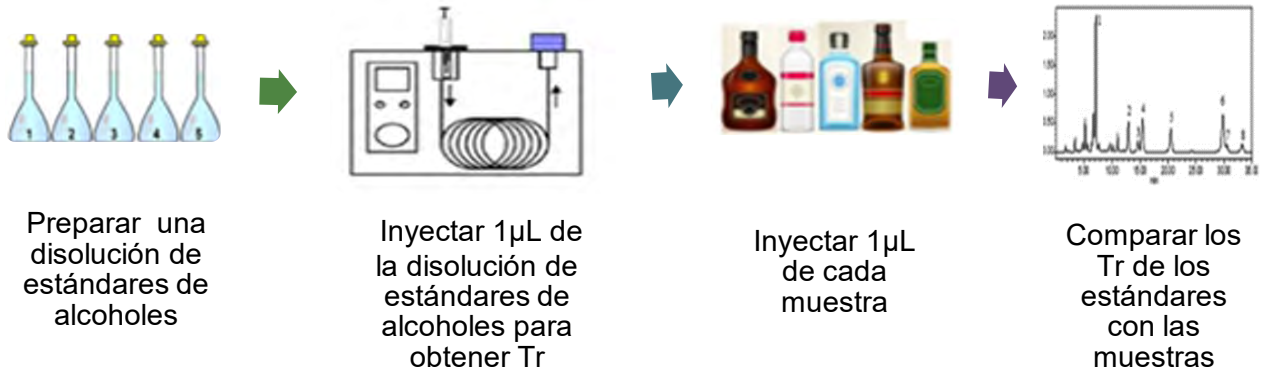
Preparación de curva de calibración

Se pesaron 100 mg de cada uno de los estándares: metanol, propanol, isobutanol alcohol isoamilico, hexanol y feniletanol, y se aforaron a 10mL con etanol, para obtener una concentración de 10mg/mL (10,000ppm). Tomar las alícuotas necesarias de la disolución anterior y llevar a la marca de aforo con etanol al 40%v/v, para obtener disoluciones de 0.6 -7 mg/mL para metanol; 0.1-2 mg/mL para propanol; 0.3 -3 mg/mL para isobutanol; 0.2 -2 mg/mL para alcohol isoamílico; 0.1- 2 mg/mL para hexanol y 0.2- 2 mg/mL para feniletanol.

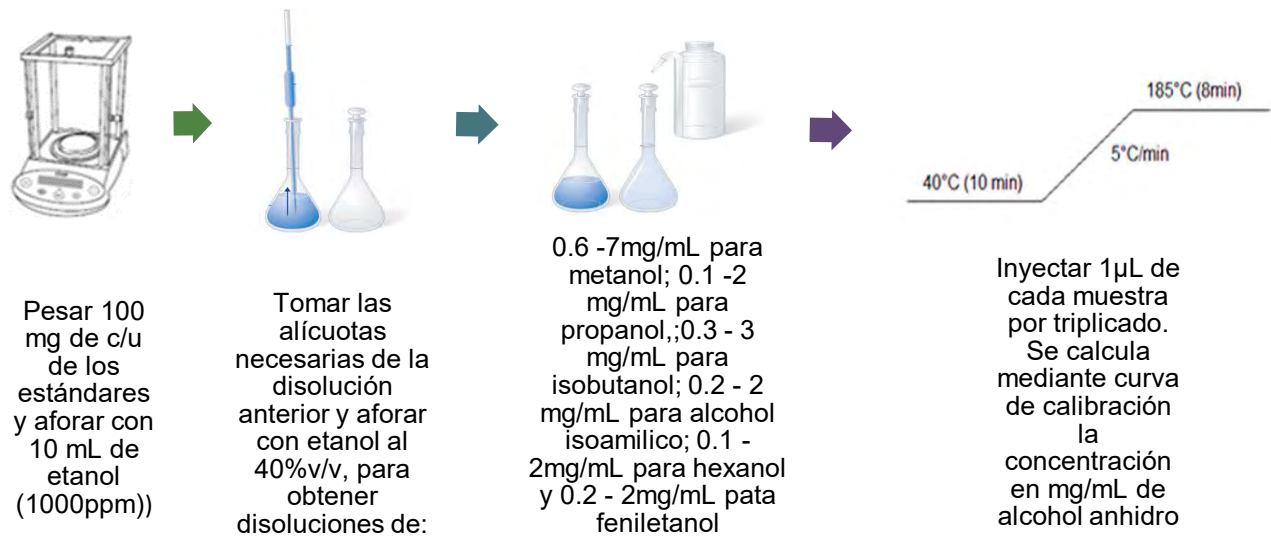
Se inyectó en el cromatógrafo de gases 1 μ L de cada muestra por triplicado. Se calculó la concentración mediante la curva de calibración y se reportó en mg/100mL de alcohol anhidro (Esquema 3).

Condiciones cromatográficas

Se utilizó un cromatógrafo de gases Shimadzu GC-2014 equipado con un inyector split/splitless y una columna capilar CP-WAX57CB (50m x 0.25 mm DI x 0.25 μ m). Temperatura del inyector: 200°C en modo Split con relación 1:30. Programa de Temperatura utilizado: 40°C iniciales durante 10 min, incrementándose la temperatura a 5°C/min hasta 185°C manteniéndose constante durante 8 min. El gas acarreador fue Hidrógeno con una presión de 81.7 kPa y un flujo de 1.36 mL/min. El detector del cromatógrafo es un detector de ionización de llama (FID, por sus siglas en inglés), temperatura del detector: 200°C.



Esquema 2. Cuantificación de metanol y alcoholes superiores por CG-FID



Esquema 3. Procedimiento para la cuantificación del metanol y alcoholes superiores

7 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

7.1 DETERMINACIÓN DE COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES POR HS-MEFS-CG-EM

Se analizaron 61 muestras de 13 tipos diferentes de bebidas alcohólicas: mezcal, tequila, raicilla, bacanora, licor de agave, charanda, ron, aguardiente, licor de caña, vodka, whisky, coñac y vino (Tabla 10).

Tabla 10. Muestras analizadas mediante MEFS-CG-EM

DESTILADAS											NO DESTILADAS	
AGAVE					CAÑA			CEBADA		UVA		
Mezcal	Tequila	Raicilla	Bacanora	LA*	Charanda	Ron	Aguardiente	LC**	Whisky	Vodka	Coñac	VT***
M1	T1	RC1	BC1	LARE1	CH1	RON1	AG1	LCT1	W1	V1	CG1	VT6
M2	T2	RC2			CH2	RON2	AG2		W4	V2	CG2	VT7
M3	T3	RC3			CH3	RON3	AG3		W5	V3	CG3	VT8
M5	T4	RC4				RON4			W6	V4		
M6	T5	RC5				RON5				V5		
M7	T6	RC6				RON6						
M8	T7	RC7				RON7						
M9	T8											
M10												
M11												
M12												
M13												
M14												
M15												
MEZJAM#												

*LA=Licor de Agave, **LC=Licor de Caña, ***VT=Vino tinto, #MEZJAM=Agua de Jamaica + Mezcal

En la figura 8 se muestra un cromatograma del perfil de los compuestos orgánicos volátiles y semivolátiles de mezcal, obtenidos mediante MEFS -CG-EM.

En la tabla 11 se presenta la identificación, probabilidad, match, estructura química y área de cada compuesto obtenido por duplicado del cromatograma de la figura 8.

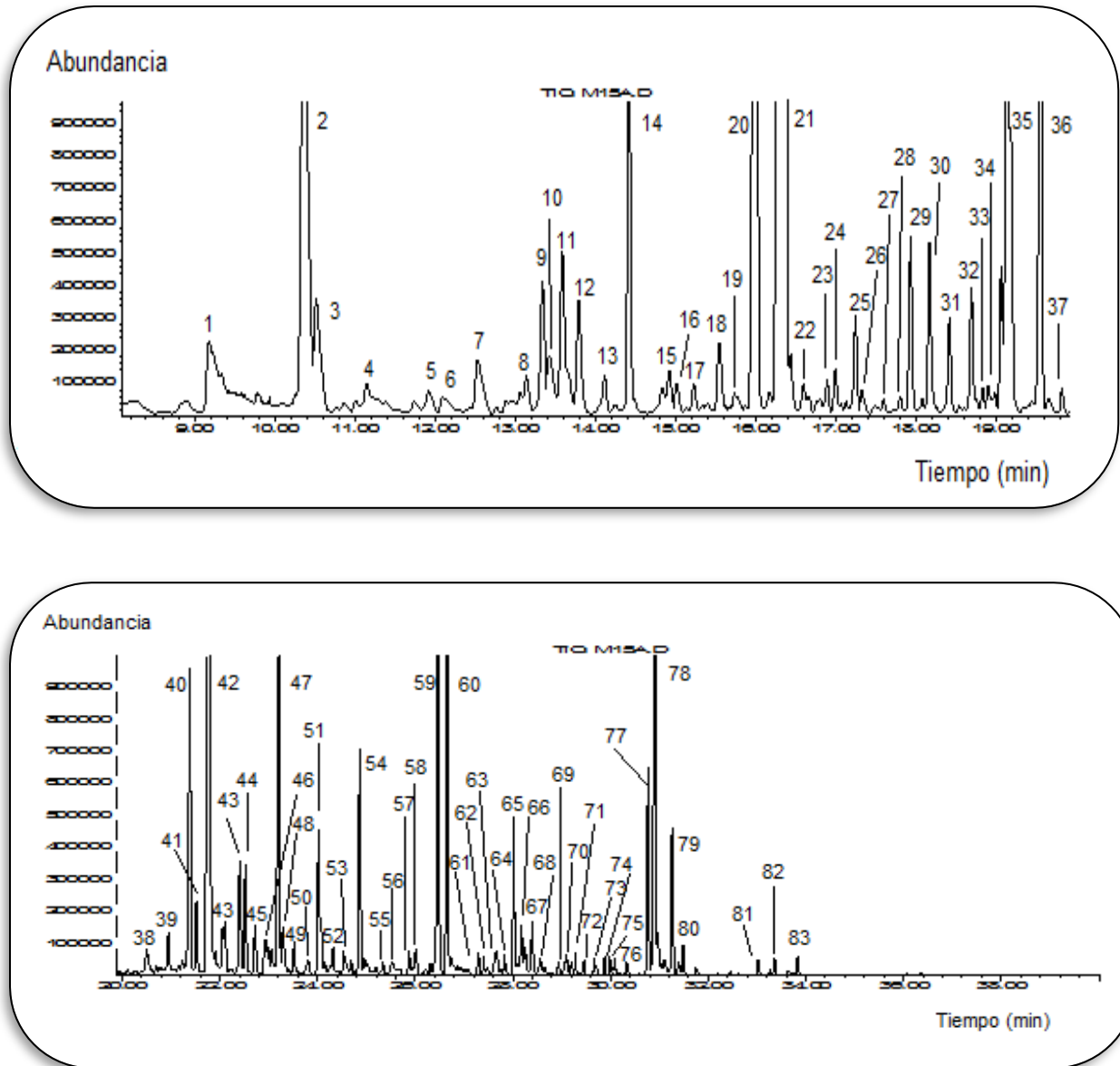































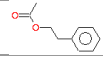
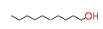

















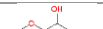





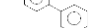


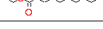

























Figura 8. Cromatograma iónico total de compuestos orgánicos volátiles del mezcal M15

Tabla 11. Identificación de compuestos orgánicos volátiles de una muestra de mezcal. (n=2).

No. de pico	Tiempo de retención (min)	Compuesto identificado	Prob.	Match	Estructura	Área	
						1	2
1	9.186	5-metilfurfural	85.1	855		18704906	20126637
2	10.391	Hexanoato de etilo	85.4	935		89066041	88045278
3	10.521	Octanal	86.3	943		21366010	21699638
4	11.157	β -Cimeno	20.9	875		6821135	5376191
5	11.935	o-cresol	29.9	785		4902700	5239355
6	12.101	Butanoato de isopentilo	59.1	758		2353113	2460696
7	12.548	1-octanol	8.20	796		11946856	12285805
8	13.073	6-heptenoato de etilo	60.0	787		2728637	2921879
9	13.152	2-nonanona	53.0	710		5279341	5291757
10	13.361	Heptanoato de etilo	69.0	735		17048999	17575302
11	13.447	Linalol	38.0	828		9645202	9875990
12	13.596	Nonanal	65.5	855		24811567	25102609
13	13.799	Feniletanol	84.8	937		14921107	15016649
14	14.021	β -ciclocitral	48.2	827		17481069	17486346
15	14.129	Octanoato de metilo	61.1	806		5826567	5762644
16	14.800	p-xilenol	28.3	756		4670408	5057934
17	15.029	3-nonenol	43.0	781		4006411	4393059
18	15.099	3-metil-1H-indeno	33.2	722		4359429	4368691
19	15.236	2-nonenal	36.6	901		3144917	3234393
20	15.470	4-etilfenol	26.4	807		488106	509314
21	15.574	Nonanol	34.8	803		8962372	9781540
22	15.779	Succinato de dietilo	41.3	701		4015471	4410166
23	15.879	4-terpineol	24.5	758		821293	904318
24	15.995	Naftaleno	47.3	954		44756950	44048848
25	16.015	p-guayacol	34.7	937		140002728	140577859
26	16.182	Salicilato de metilo	65.7	742		2931302	3055273
27	16.392	Octanoato de etilo	94.1	918		358824890	355007791
28	16.428	Dodecano	28.7	663		5100414	3923112
29	16.599	Decanal	31.1	705		943059	1001526
30	16.902	4,7-dimetilbenzofurano	60.9	828		3462891	3381461
31	17.156	β -citronelol	29.9	795		1407949	1473748

32	17.949	Acetato de feniletilo	45.8	898		15250146	16965744
33	18.427	1-decanol	7.23	723		9057853	9610418
34	18.841	8-nonenoato de etilo	67.4	805		2389829	2454885
35	18.912	3-nonenoato de etilo	55.5	823		3373492	3310488
36	19.137	Nonanoato de etilo	90.8	914		10877370	10547543
37	19.150	2-metilnaftaleno	41.6	926		58133671	58757798
38	19.262	2-undecanol	39.9	826		2956159	3119920
39	19.498	Edulan I	26.9	698		304041	318242
40	19.560	1-metilnaftaleno	43.1	950		44236204	44679845
41	19.830	Decanoato de metilo	75.1	860		2342055	2322984
42	20.257	7-metil-1-naftol	28.7	695		4745455	3313595
43	20.506	3-fenilpropionato de etilo	65.0	758		4488131	4079191
44	20.615	3-alil-6-metoxifenol	57.7	859		3681765	3931742
45	20.704	1,2-dihidro-1,1,6-trimetilnaftaleno	53.4	755		921216	889801
46	21.386	Bifenilo	75.0	956		29123567	30138871
47	21.524	4-decenoato de etilo	39.4	840		6431072	6941147
48	21.800	Decanoato de etilo	88.7	918		188076880	183688351
49	21.904	Tetradecano	25.9	747		1943291	1726990
50	22.514	1,7-dimetilnaftaleno	26.1	960		9754544	9916874
51	22.723	1-isopropenilnaftaleno	50.6	704		1372927	1206624
52	22.933	1,4-dimetilnaftaleno	36.2	867		7352467	4467994
53	23.061	Octanoato de isopentilo	68.5	807		3034291	2897788
54	23.201	Acenaftileno	75.8	954		39925063	42568341
55	24.044	Acenafteno	47.6	935		12639584	13256169
56	24.078	3-metilbifenilo	29.7	913		3892542	3870785
57	24.320	p-metilbifenilo	30.3	909		2604325	2737613
58	24.767	4,6,8-trimetilazuleno	26.5	769		305598	317350
59	24.866	Dibenzofurano	80.9	951		18902198	20406954
60	24.964	1,4,5-trimetilnaftaleno	20.7	803		1603170	1714539
61	25.202	2-isopropilnaftaleno	38.7	714		182917	825550
62	25.450	α -calacoreno	74.5	843		5408527	5346789
63	25.524	1,6,7-trimetilnaftaleno	29.6	689		2414528	2539920
64	25.992	2,3,5-trimetilnaftaleno	35.8	820		456553	479152

65	26.465	Fluoreno	70.5	915		30929371	33409352
66	26.658	Dodecanoato de etilo	82.3	899		33749136	30841514
67	26.765	1-ailnaftaleno	26.6	831		1662316	1818062
68	26.813	1,2,3,4-tetrahidro-2,5,8-trimetil-1-naftaleno	40.9	800		819747	879715
69	26.934	9-metilfluoreno	36.1	841		953091	1019734
70	27.001	1-isopropenilnaftaleno	42.4	757		540540	584541
71	27.297	4-metilbenzofurano	59.8	894		2132947	2295501
72	27.765	Butanoato de fenilo	47.5	802		456381	506413
73	28.510	Cadalin	61.8	930		5895398	5970581
74	29.067	2-metilfluoreno	25.3	908		866961	7651554
75	29.265	Benzoato de 2-etilhexilo	44.5	789		7896049	8204951
76	29.452	4-metilfluoreno	21.1	900		880098	893503
77	29.765	1,4,5,8-trimetilnaftaleno	37.0	858		262361	2651478
78	30.591	Benzoato de bencilo	69.6	607		153746	155182
79	30.904	Fenanteno	25.6	861		49239192	51327880
80	31.101	Tetradecanoato de etilo	68.4	780		2079023	1970632
81	33.239	2-metilefenanteno	20.3	947		1578593	1604328
82	33.648	4,5-metilenfenanteno	57.0	897		413329	469132
83	33.823	3-metilfenanteno	14.2	932		1627431	1737003

Los compuestos orgánicos volátiles que se identificaron en las diferentes bebidas alcohólicas se clasificaron en terpenos, ésteres, ácidos carboxílicos, aldehídos, cetonas, furanos, PAH's, alcoholes, éteres, hidrocarburos simples, compuestos heterocíclicos y compuestos aromáticos como se muestra en las tablas 12-15.

En la literatura se han reportado diferentes métodos para el análisis de compuestos volátiles de bebidas alcohólicas y se han identificado más de 200 compuestos volátiles en vinos y alrededor de 800 en tequila y mezcal, esto va a depender de diferentes variables como la materia prima, la fermentación, la destilación etc.; así como el método de análisis.

En los mezcales se identificaron mayor número de compuestos orgánicos volátiles (Tabla 12-15), probablemente se debe a que se destila por lo que concentra el contenido de compuestos orgánicos volátiles y porque la materia prima usada en el mezcal no son granos que aportan exclusivamente almidones y azúcares para fermentación como los usados para whisky, vodka o ginebra, ni tampoco son frutos como la uva o la manzana. El agave aporta mayor número de compuestos orgánicos volátiles debido a que se aprovecha la piña que es en donde se almacenan los azúcares, así mismo la evolución del agave en condiciones difíciles por millones de años provocó que esta planta desarrollara muchos compuestos químicos para enfrentar el ataque de insectos, bacterias y hongos; así como compuestos grasos que protegen a la planta de la deshidratación y en el proceso de cocimiento además de la generación de azúcares fermentables por hidrólisis de los fructanos (principal reserva de polisacáridos) presentes en el agave, se llevan a cabo una serie de reacciones químicas, como la de caramelización (Se someten los azúcares a temperaturas superiores a su punto de fusión que generan una serie de reacciones complejas en las cuales se da un rompimiento de las moléculas de azúcares, los residuos de éstos azúcares se reagrupan y forman moléculas diferentes que pueden ser de bajo o alto peso molecular como furanos, aldehídos, cetonas y ácidos) que generan muchos de los compuestos volátiles responsables de las características organolépticas del agave. A diferencia del mezcal, el whisky tuvo el menor número de compuestos orgánicos de todas las bebidas alcohólicas analizadas (Tablas 12-14). Esto es porque el whisky proviene de cebada; este es más pobre en compuestos orgánicos volátiles y porque en los procesos involucrados en su producción no conllevan a aumentar la complejidad e introducir más sabor en el proceso. Por ello, esta bebida suele ser añejada en madera para impartir más aroma y sabor.

Dentro de cada tipo de bebida el número de compuestos identificados fue distinto, esto puede ser por diferencias en la materia prima (por ejemplo, el tipo de agave en el mezcal), tipo de cepa de levadura, condiciones de fermentación: tiempo, cantidad de oxígeno, temperatura, etc. y en el caso de las bebidas destiladas si se destiló una o dos veces.

Tabla 12. Compuestos orgánicos volátiles identificados mediante MEFS-CG-EM: mezcal, bacanora y raicilla

Tiempo de retención (min)	Compuesto identificado	BEBIDAS																							
		M1	M2	M3	M5	M6	M7	M8	M9	M10	M11	M12	M13	M14	M15	MEZJAM	BC1	RC1	RC2	RC3	RC4	RC5	RC6	RC7	
ÉSTERES																									
9.354	4-metilpentanoato de etilo			x		x				x	x														
10.391	Hexanoato de etilo	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	X	x	x	
10.767	Acetato de hexilo	x		x	x	x	x		x							x									
11.292	Acetato de terpineol								x									x							
11.932	3-furoato de etilo								x				x		x										
12.107	Butanoato de isopentilo	x				x		x	x	x		x	x		x	x				x	x	X			
12.338	Acetato de metilhexilo					x																			
13.077	3-heptanoato de etilo	x	x					x		x		x		x	x										
13.361	Heptanoato de etilo	x		x	x		x		x	x		x	x	x	x					x	x	X		x	
14.129	Octanoato de metilo	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	X	x	x	
14.455	Ciclohexilmetanoato de etilo																		x						
15.417	Butirato de linalilo		x				x																		
15.779	Succinato de dietilo		x				x	x					x		x										x
15.814	Heptanoato de alilo	x			x		x																		
16.001	7-octenoato de etilo												x												
16.188	Salicilato de metilo	x	x	x			x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x				x
16.387	Octanoato de etilo	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x	X	x	x	
17.059	Nonanoato de metilo							x					x						x		x				

M=mezcal; MEZJAM= mezcal + jamaica; BC= bacanora; RC=raicilla

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	M1	M2	M3	M5	M6	M7	M8	M9	M10	M11	M12	M13	M14	M15	MEZJAM	BC1	RC1	RC2	RC3	RC4	RC5	RC6	RC7
17.730	2-octenoato de etilo	x		x			x			x														
17.818	Hexanoato de isopentilo	x					x				x	x		x								x		
17.953	Acetato de feniletilo	x	x	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x				x	x	x
18.269	4-metiloctanoato de hexilo					x																		
18.846	8-nonenoato de etilo	x		x	x	x	x				x	x		x	x							x		x
18.915	3-nonenoato de etilo						x				x				x									
19.142	Nonanoato de etilo	x	x	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x	x	x		x		x		x	x	x
19.768	Geranato de metilo	x																						
19.833	Decanoato de metilo	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x		x		x		x	x	
20.282	3-ciclohexilpropanoato de etilo																	x						
20.463	Octanoato de 2-butilo											x												
20.511	3-fenilpropanoato de etilo	x	x					x	x	x	x		x	x	x	x			x	x	x	x		x
21.015	Acetato de terc-butilhexanol																	x						
21.271	Acetato de geraniol																x						x	
21.528	4-decenoato de etilo		x	x		x	x	x	x	x	x	x		x	x	x		x					x	
21.779	Decanoato de etilo	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
22.475	Undecanoato de metilo															x		x						
23.061	Octanoato de isopentilo						x				x	x			x							x		
23.610	3-fenil-2-propenoato de etilo		x	x				x	x	x			x	x		x								

M=mezcal; MEZJAM= mezcal + jamaica; BC= bacanora; RC=raicilla

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	M1	M2	M3	M5	M6	M7	M8	M9	M10	M11	M12	M13	M14	M15	MEZJAM	BC1	RC1	RC2	RC3	RC4	RC5	RC6	RC7
24.985	Tridecanoato de etilo															x								
26.654	Dodecanoato de etilo	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x
27.767	Butanoato de fenilo	x	x			x		x				x	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x	
27.829	Decanoato de isopentilo						x	x			x			x				x				x		
29.265	Benzoato de 2-etilhexilo	x																		x	x			
30.590	Benzoato de bencilo	x	x	x			x		x	x	x	x		x	x	x			x	x	x	x		x
31.098	Tetradecanoato de etilo	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x	x	x	
32.199	Nonanoato de 2-feniletilo											x					x	x					x	x
33.032	Hexadienoato de etilo																			x	x			
33.171	Pentadecanoato de etilo				x						x			x								x		
34.721	9-hexadecanoato de etilo					x											x							
35.151	Hexadecanoato de etilo	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x				x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
COMPUESTOS AROMÁTICOS																								
13.152	3,4-dimetilestireno	x		x		x	x			x	x	x	x	x		x		x		x		x		
			x					x			x											x		x
14.937	1,2,4,5-tetrametilbenceno			x	x		x	x			x	x				x								
CETONAS																								
12.393	Acetofenona		x							x							x							
13.009	3-nonanona		x							x														
13.156	2-nonanona		x		x					x					x									

M=mezcal; MEZJAM= mezcal + jamaica; BC= bacanora; RC=raicilla

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	M1	M2	M3	M5	M6	M7	M8	M9	M10	M11	M12	M13	M14	M15	MEZJAM	BC1	RC1	RC2	RC3	RC4	RC5	RC6	RC7
14.516	5,9-dimetil-5,8-decadien-2-ona					x																		
14.820	3,6-dimetil-2-octanona	x																						
18.989	2-undecanona													x										
19.929	2-nonen-4-ona													x										
23.456	2,6-di-terc-butilbenzoquinona							x										x						
23.873	β -ionona																			x	x		x	x
24.502	Metilionona																	x						x
27.522	Benzofenona		x					x																
30.592	2-metilbenzofenona				x																			
ALCOHOLES																								
8.407	3,4-dimetil-1-pentanol											x					x		x					
9.480	Heptanol								x					x										
11.020	3-etil-4-metilpentanol		x			x		x		x	x	x	x			x	x		x	x	x	x		x
11.284	2-etilhexanol	x		x												x				x	x			x
11.938	o-cresol/3-metilfenol							x	x						x		x			x	x			x
12.549	1-octanol	x					x	x	x		x			x	x									
13.058	Trans-2-octenol													x										
13.803	Feniletanol	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x			x	x	x	x	x	x	x	x
14.795	3,4-xilenol/2,5-dimetilfenol								x						x		x				x	x		x
15.028	3-nonenol	x						x	x						x	x								
15.470	4-etilfenol														x		x							
15.578	Nonanol	x	x		x	x	x	x	x	x	x				x		x	x		x	x		x	x
16.723	2-propilheptanol																			x	x		x	x
17.135	3,7-dimetil-2-octen-1-ol								x	x	x			x							x			x

M=mezcal; MEZJAM= mezcal + jamaica; BC= bacanora; RC=raicilla

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	M1	M2	M3	M5	M6	M7	M8	M9	M10	M11	M12	M13	M14	M15	MEZJAM	BC1	RC1	RC2	RC3	RC4	RC5	RC6	RC7
18.426	1-decanol	x	x			x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x			x	x		x	x
19.262	2-undecanol								x						x	x								
20.615	3-alil-6-metoxifenol								x	x					x	x								
21.167	Undecanol	x						x	x	x	x		x											
21.615	2-metil-5-undecanol	x																						
23.766	Dodecanol							x	x				x	x		x				x	x	x	x	x
26.211	Tridecanol																						x	
28.010	6,9-petadecadien-1-ol													x										
28.167	7-tetradecanol													x										
TERPENOS																								
10.091	Mirceno																	x						
10.858	1,4-cineol											x				x		x	x	x	x		x	
11.162	Cimeno	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x		x				x	x	
11.302	Limoneno	x	x	x	x	x	x	x	x	x		x										x		
11.400	Eucaliptol												x			x		x		x	x		x	
12.165	cis-geraniol						x					x												
12.694	o-guayacol							x					x								x			x
13.067	Óxido de linalol					x						x				x		x	x			x		x
13.452	Linalol	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
13.769	Óxido de rosa																	x						
14.015	α -ciclocitral											x							x			x		x
14.021	β -ciclocitral							x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x			x		
14.052	Fenchol	x				x		x								x		x					x	
14.349	Óxido de rosa					x													x					
14.572	Isotujol													x				x			x		x	
14.594	Isopinocarveol	x	x				x		x	x	x			x										x
14.940	Carveol	x	x	x				x	x					x							x			
15.414	Butirato de linalilo											x							x					
15.643	Isoborneol	x	x					x	x	x				x	x	x		x					x	x
15.873	4-terpineol	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x			x	x	x	x	x	x	x	x	x	x

M=mezcal; MEZJAM= mezcal + jamaica; BC= bacanora; RC=raicilla

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	M1	M2	M3	M5	M6	M7	M8	M9	M10	M11	M12	M13	M14	M15	MEZJAM	BC1	RC1	RC2	RC3	RC4	RC5	RC6	RC7
16.015	p-guayacol														x				x				x	
16.531	α -terpineol	x	x				x	x			x	x												
17.084	Cis-geraniol															x		x		x			x	x
17.150	β -citronelol	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x		x	x	x	x	x
17.254	2-borneno																						x	
17.793	Trans-geraniol																	x		x	x			
17.826	3,7-dimetil-2,6-octadien-1-ol																x	x	x				x	
18.099	Dihidrocarveol		x														x	x						
18.927	Timol		x																x	x	x		x	x
19.165	o-timol																		x					
19.498	Edulan I													x	x	x	x							
19.675	Teaspirano		x							x	x					x								
20.204	Psi-limoneno																		x					
20.514	2,6-dimetil-2,6-octadieno																		x					
20.612	Eugenol											x	x	x					x					x
20.748	Actato de nerol																		x					
20.861	Dihidroeugenol																		x					
21.147	Isopulegol																		x					
21.295	Geranilacetato					x		x											x					
21.360	β -damascenona											x		x		x	x		x				x	x
23.082	Geranilacetona	x	x				x	x	x	x	x		x								x		x	
23.201	β -farneseno												x	x					x					
24.679	Aristolano													x		x								
24.767	4,6,8-trimetilazuleno														x									
25.899	trans-nerolidol		x	x									x	x		x	x	x	x			x	x	x
27.607	Eudesmol	x	x	x		x	x	x	x	x	x		x	x		x	x	x	x			x	x	
28.808	Bisabolol		x	x												x	x						x	
29.392	Farnesol																							x

M=mezcal; MEZJAM= mezcal + jamaica; BC= bacanora; RC=raicilla

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	M1	M2	M3	M5	M6	M7	M8	M9	M10	M11	M12	M13	M14	M15	MEZJAM	BC1	RC1	RC2	RC3	RC4	RC5	RC6	RC7	
FURANOS																									
11.755	2,2-dimetil-5-(1-metilpropen-1-il)-tetrahydrofurano			x		x	x	x			x					x									
13.680	2-metilbenzofurano	x		x	x	x	x	x		x						x							x		
16.905	4,7-dimetilbenzofurano	x		x	x	x	x	x			x				x	x						x	x		
24.866	Dibenzofurano	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x			x			x		x		x	x	x	
27.295	4-metildibenzofurano	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x			x	x									
ÉTERES																									
9.501	2,2,6-trimetil-6-viniltetrahidropirano			x								x								x	x				
12.592	1,1,3-trietoxipropano		x							x										x	x				
16.512	p-alilanol																							x	
17.351	2-ter-butyl-5-metilanol										x	x		x											
17.495	2-isopropil-1-metoxi-4-metilbenceno											x													
17.838	Geranilviniléter		x			x							x					x	x			x	x		
18.553	Epóxido de asacaridol								x			x													
18.863	Estragol										x	x													
19.713	2,2-dietoxietilbenceno																			x	x				
21.946	Difeniléter	x							x			x	x	x				x	x						
31.341	1,2-difenoxietano																					x			
HIDROCARBUROS AROMÁTICOS POLICICLÍCOS																									
11.739	Indeno						x																		
14.936	1,2,4,5-tetrametilbenceno	x																							

M=mezcal; **MEZJAM**= mezcal + jamaica; **BC**= bacanora; **RC**=raicilla

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	M1	M2	M3	M5	M6	M7	M8	M9	M10	M11	M12	M13	M14	M15	MEZJAM	BC1	RC1	RC2	RC3	RC4	RC5	RC6	RC7
15.092	3-metil-1H-indeno					X	X						X		X									
15.995	Naftaleno	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X					X			X	X
19.139	2-metilnaftaleno						X	X			X	X			X		X	X						
19.556	1-metilnaftaleno	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X		X		X	X	X	X		X
20.257	7-metil-1-naftol														X							X		
20.707	1,2-dihidro-1,1,6-trimetilnaftaleno	X	X	X	X	X	X	X		X	X	X			X									
21.382	Bifenilo	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X			X								X	
22.513	1,7-dimetilnaftaleno			X	X	X	X	X	X	X	X	X		X	X								X	
22.723	1-isopropenilnaftaleno	X		X	X	X	X			X	X	X			X								X	
22.933	1,4-dimetilnaftaleno			X	X	X	X				X	X			X					X				
23.191	Acenaftileno	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X		X					X	X	X
24.047	Acenafteno	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X		X								X	
24.078	3-metilbifenilo	X	X	X	X	X	X	X	X	X		X			X								X	
24.321	p-metilbifenilo							X			X													
24.964	1,4,5-treimetilnaftaleno														X									
25.200	3-(2-metil-propenil)-1H-indeno			X			X								X									
25.450	α -calacoreno														X							X		
25.527	1,6,7-treimetilnaftaleno						X					X			X					X				
25.996	2,3,5-trimetilnaftaleno			X			X					X			X				X					
26.464	Fluoreno	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X			X		X					X		
26.772	2-isopropenilnaftaleno	X		X	X		X								X							X		
26.813	1,2,3,4-tetrahidro-2,5,8-trimetil-1-naftaleno		X	X	X	X	X	X		X					X									
26.935	9-metilfluoreno			X	X	X	X	X		X	X	X			X					X				X
27.003	1-isopropilnaftaleno			X		X	X				X	X			X									

M=mezcal; MEZJAM= mezcal + jamaica; BC= bacanora; RC=raicilla

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	M1	M2	M3	M5	M6	M7	M8	M9	M10	M11	M12	M13	M14	M15	MEZJAM	BC1	RC1	RC2	RC3	RC4	RC5	RC6	RC7
27.290	Dibenzopirano				x	x	x	x	x	x	x	x			x									
28.515	Cadalin	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x			x		x	x	x				x	
28.835	1,4,5,8-trimetilnaftaleno				x		x	x	x	x	x	x			x	x	x							
29.067	2-metilfluoreno			x	x	x	x		x	x	x	x			x	x	x			x		x		
29.449	4-metilfluoreno		x	x	x	x	x	x	x	x	x	x			x	x	x		x			x		x
29.764	1,4,5,8-tetrametilnaftaleno																		x					
30.897	Fenanteno	x	x	x	x		x			x	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x		x	x
31.543	2,3-dimetilfluoreno			x	x	x	x	x	x	x	x	x			x								x	
33.239	2-metilfenanteno			x	x	x	x	x	x	x	x	x			x					x		x	x	
33.648	4,5-metilenfenanteno			x	x	x	x	x		x	x	x			x								x	
33.821	3-metilfenanteno				x		x		x	x	x	x			x				x			x		
36.344	Fluoranteno						x		x		x													
ALDEHÍDOS																								
8.185	5-metilfurfural	x	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x	x	x	x				x	x	x	x	x
9.257	Benzaldehído	x						x	x								x	x	x					
10.521	Octanal													x	x									
11.741	2-hidroxibenzaldehído																			x			x	
13.596	Nonanal	x	x		x	x		x	x			x	x	x	x	x	x	x	x	x	x		x	x
15.236	2-nonenal													x	x									
16.599	Decanal	x	x					x			x	x	x	x			x			x	x		x	x
16.957	p-men-1-enal																	x						
17.657	p-isopropilbenzaldehído																		x	x	x		x	x
17.756	trans-2-decenal							x						x										
19.441	Undecanal							x																
19.719	2,4-decadienal													x										
20.953	2-undecenal													x										

M=mezcal; MEZJAM= mezcal + jamaica; BC= bacanora; RC=raicilla

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	M1	M2	M3	M5	M6	M7	M8	M9	M10	M11	M12	M13	M14	M15	MEZJAM	BC1	RC1	RC2	RC3	RC4	RC5	RC6	RC7
28.110	4-bifenilcarboxialdehído											x				x								
28.560	Tetradecanal													x										
30.056	2-(fenilmetileno)-octanal																						x	
ÁCIDOS CARBOXÍLICOS																								
15.756	Ácido octanoico															x				x	x		x	
20.970	Ácido decanoico		x			x		x	x				x			x	x			x	x		x	x
25.818	Ácido undecanoico															x								
25.789	Ácido dodecanoico															x							x	
HIDROCARBUROS SIMPLES																								
16.421	Dodecano							x							x	x				x				
21.899	Tetradecano	x		x				x						x	x	x								
COMPUESTOS HETEROCÍCLICOS																								
27.298	Xanteno															x	x							

M=mezcal; **MEZJAM**= mezcal + jamaica; **BC**= bacanora; **RC**=raicilla

Tabla 13. Identificación de compuestos orgánicos volátiles mediante MEFS-CG-EM: tequila, charanda, ron, aguardiente, licor de caña y licor de agave

Tiempo de retención (min.)	Compuesto identificado	BEBIDAS																						
		T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	CH1	CH2	CH3	RON1	RON2	RON3	RON4	RON5	RON6	RON7	AG1	AG2	AG3	LCT	LARE
ÉSTERES																								
10.391	Hexanoato de etilo	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x	x
10.767	Acetato de hexilo										x	x	x		x		x		x					
11.738	Lactato de isoamilo																							
11.932	3-furoato de etilo	x	x									x	x	x	x	x	x							
12.107	Butanoato de isopentilo	x											x		x							x		
12.338	Acetato de metilhexilo														x									
12.426	Etilmalonato												x		x	x	x					x		
13.077	3-heptanoato de etilo												x	x	x	x	x	x	x			x		
13.361	Heptanoato de etilo	x	x				x	x	x							x	x					x		
14.129	Octanoato de metilo	x	x	x	x	x	x	x		x			x	x	x	x	x	x		x	x	x		
14.824	Acetato de 3-metilheptilo				x					x									x					
15.125	2,3-dietoxipropanoato de etilo											x												
15.294	Acetato de bencilo				x					x					x		x	x		x	x			
15.417	Butirato de linalilo																							
15.529	Benzoato de etilo											x	x		x	x	x					x		x
15.779	Succinato de dietilo	x	x	x		x						x	x	x										
16.188	Salicilato de metilo	x	x	x	x		x	x	x		x	x		x	x		x	x				x		
16.387	Octanoato de etilo	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x	x
17.059	Nonanoato de metilo			x	x					x			x	x	x		x	x		x	x	x		
17.730	2-octenoato de etilo												x			x	x							
17.818	Hexanoato de isopentilo		x										x			x	x					x		
17.953	Acetato de feniletilo	x	x		x	x	x	x	x		x	x	x	x		x	x	x					x	x
18.342	Salicilato de etilo											x	x	x								x		x
18.846	8-nonenoato de etilo																x							

T= tequila; CH=charanda; RON=ron; AG= aguardiente; LCT= licor de agave tonayan; LARE= licor de agave rancho escondido

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	CH1	CH2	CH3	RON1	RON2	RON3	RON4	RON5	RON6	RON7	AG1	AG2	AG3	LCT	LARE	
18.915	3-nonenoato de etilo												x								x				
19.142	Nonanoato de etilo	x	x	x	x		x		x	x		x										x	x	x	x
19.833	Decanoato de metilo	x	x	x		x	x	x	x				x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x		
20.463	Octanoato de 2-butilo															x						x			
20.511	3-fenilpropanoato de etilo		x			x	x	x					x			x	x	x	x					x	
21.015	Acetato de 4-terc-butilciclohexanol	x			x								x	x	x	x	x	x	x						
21.144	2-metilpropanoato de 3-hidroxi-2,2,4-trimetilpentilo				x								x	x	x	x	x	x	x						
21.271	Acetato de geraniol				x					x		x				x									
21.528	4-decenoato de etilo	x	x	x	x	x						x	x	x		x	x	x	x	x	x				
21.779	Decanoato de etilo	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x			x	x	x	x
22.129	Acetato de decilo																					x			
22.475	Undecanoato de metilo																						x		
23.061	Octanoato de isopentilo		x	x					x								x					x			
24.142	Decanoato de propilo																					x			
24.241	Undecanoato de propilo																					x			
24.985	Tridecanoato de etilo															x	x	x	x			x			
25.217	Maleato de dibutilo				x					x		x			x										
25.476	Decanoato de isobutilo																					x	x		
26.654	Dodecanoato de etilo	x	x	x		x	x	x	x		x	x	x	x	x		x	x				x	x	x	
27.767	Butanoato de fenilo	x	x	x	x	x			x													x			
27.829	Decanoato de isopentilo								x			x										x			
29.265	Benzoato de 2-etilhexilo				x					x															
30.590	Benzoato de bencilo	x		x	x	x	x																		
31.098	Tetradecanoato de etilo		x	x								x	x									x			

T= tequila; CH=charanda; RON=ron; AG= aguardiente; LCT= licor de agave tonayan; LARE= licor de agave rancho escondido

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	CH1	CH2	CH3	RON1	RON2	RON3	RON4	RON5	RON6	RON7	AG1	AG2	AG3	LCT	LARE	
31.287	Salicilato de 2-etilhexilo						x	x		x	x	x												x	
31.731	Tetradecanoato de isopropilo						x																		
32.199	Nonanoato de 2-feniletilo								x				x					x			x				
34.721	9-hexadecanoato de etilo												x	x	x						x				
35.151	Hexadecanoato de etilo		x		x				x			x	x	x	x						x			x	
36.169	Pentanoato de feniletilo												x		x						x				
COMPUESTOS AROMÁTICOS																									
12.951	3-etilestireno				x			x		x			x	x					x						
13.152	3,4-dimetilestireno	x	x	x	x			x	x									x		x	x				
14.937	1,2,4,5-tetrametilbenceno/Duren o		x															x		x	x				
17.055	Ciclo pentilbenceno																	x							
20.088	4-fenilciclohexano																x								
20.711	2-(1,3-butadienil)-metilestireno												x	x	x	x		x							
23.643	1-octenilbenceno									x															
CETONAS																									
10.073	2-octanona						x						x												
12.393	Acetofenona	x														x		x			x		x		
13.156	2-nonanona												x												
15.371	Propiofenona															x		x							
16.150	2-decanona	x			x								x	x	x	x		x							
16.677	3-butilcicloheptanona												x	x	x			x							
18.645	1-indanona																x								
18.989	2-undecanona											x	x	x	x		x								

T= tequila; CH=charanda; RON=ron; AG= aguardiente; LCT= licor de agave tonayan; LARE= licor de agave rancho escondido

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	CH1	CH2	CH3	RON1	RON2	RON3	RON4	RON5	RON6	RON7	AG1	AG2	AG3	LCT	LARE
21.344	1-(2,6,6-trimetil-1,3-ciclohexadien-1-il)-2-buten-1-ona				x																			
23.456	2,6-di-terc-butilbenzoquinona													x										
23.885	α -ionona				x																			
27.522	Benzofenona				x					x				x	x			x		x				
28.192	β -metilionona									x													x	
29.011	2-pentadecanona																						x	
30.592	2-metilbenzofenona				x																			
ALCOHOLES																								
8.407	3,4-dimetil-1-pentanol	x																						
9.678	Fenol											x						x	x					
10.496	2-octanol						x																	
10.784	3,4-dihidroxitolueno									x														
11.020	3-etil-4-metilpentanol	x	x	x	x	x	x	x	x													x	x	x
11.284	2-etilhexanol						x			x		x											x	x
12.549	1-octanol				x								x	x	x	x	x	x	x	x	x			
13.803	Feniletanol	x		x	x	x	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x	x	x		x		x	x
14.795	3,4-xilenol/2,5-dimetilfenol	x																						
15.301	o-etilfenol										x		x											
15.578	Nonanol													x	x		x	x	x					
16.721	2-propilheptanol												x											
16.988	4-terc-butilciclohexanol													x	x									
18.426	1-decanol	x	x	x	x	x								x	x		x	x	x		x			
18.969	Timol			x																				x
19.262	2-undecanol			x	x			x																
21.167	Undecanol																x							
23.766	Dodecanol				x	x					x	x	x	x					x	x	x	x		
28.564	1-hexadecanol				x																			

T= tequila; CH=charanda; RON=ron; AG= aguardiente; LCT= licor de agave tonayan; LARE= licor de agave rancho escondido

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	CH1	CH2	CH3	RON1	RON2	RON3	RON4	RON5	RON6	RON7	AG1	AG2	AG3	LCT	LARE			
TERPENOS																											
10.586	α -felandreno																								x		
10.858	1,4-cineol	x	x	x	x	x	x	x	x																	x	
10.913	α -terpineno																									x	
11.162	Cimeno		x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	
11.302	Limoneno		x		x				x										x							x	
11.400	Eucaliptol	x				x	x	x							x			x		x						x	
12.165	cis-geraniol																										
12.694	p-guayacol																										
13.067	Óxido de linalol	x		x	x	x	x	x	x																	x	
13.452	Linalol	x	x	x	x	x	x	x	x				x	x				x	x	x	x	x		x	x	x	
14.015	α -ciclocitral		x	x	x																			x	x		
16.970	β -ciclocitral	x		x	x	x	x	x	x										x							x	
14.052	Fenchol						x						x														
14.349	Óxido de rosa								x																		
14.572	Isotujol	x	x	x	x	x	x	x																			
14.594	Isopinocarveol																									x	
14.884	Alcanfor									x			x		x	x	x	x	x	x	x		x			x	
14.940	Carveol			x																						x	
15.128	p-mentona																			x							
15.414	Butirato de linalilo	x																								x	
15.643	Isoborneol				x	x	x																			x	
15.775	Mentol				x					x									x		x	x					
15.873	4-terpineol	x	x	x	x	x	x	x	x				x													x	x
16.015	Azuleno																										
16.401	Safranal							x																			
16.531	α -terpineol		x		x								x														
17.150	β -citronelol	x	x	x	x	x	x	x	x					x				x								x	
17.677	Carvona				x														x	x	x						
17.740	4-mentenona	x		x																							
17.826	3,7-dimetil-2,6-octadien-1-ol	x			x																						

T= tequila; CH=charanda; RON=ron; AG= aguardiente; LCT= licor de agave tonayan; LARE= licor de agave rancho escondido

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	CH1	CH2	CH3	RON1	RON2	RON3	RON4	RON5	RON6	RON7	AG1	AG2	AG3	LCT	LARE	
18.099	Dihidrocarveol				x											x		x							
18.817	Acetato de borneol															x			x						
18.944	Timol	x			x	x	x		x															x	
19.141	Carvacrol				x				x												x		x		
19.278	Cimenol		x																						
19.498	Edulan I	x	x	x		x	x	x	x		x			x	x	x	x	x						x	
20.596	Psi-limoneno	x																							
20.861	Dihidroeugenol			x											x										
21.295	Geranilacetato				x	x																			
21.360	β -damascenona						x	x						x		x		x						x	
23.082	Geranilacetona						x	x		x	x	x		x	x	x			x		x	x	x	x	
23.201	β -farneseno				x		x							x										x	
24.889	Cadineno		x																						
24.976	Calameneno		x																						
25.462	α -calacoreno		x						x																
25.702	Aristolona				x																				
25.899	trans-nerolidol		x		x	x	x	x	x						x				x						
27.504	Cubenol		x																						
27.607	Eudesmol					x	x	x						x											
27.830	Cubenol																						x		
28.808	Bisabolol				x		x	x																	
29.799	Farnesol																								
31.889	Acetato de farnesil																								
FURANOS																									
10.088	2-pentilfurano													x					x						
11.947	2-carboxilato de etilfurano															x			x						
13.680	2-metilbenzofurano		x	x					x																
17.239	3-fenilfurano											x													
ÉTERES																									
8.915	1,1-dietoxi-3-metilbutanol										x	x													

T= tequila; CH=charanda; RON=ron; AG= aguardiente; LCT= licor de agave tonayan; LARE= licor de agave rancho escondido

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	CH1	CH2	CH3	RON1	RON2	RON3	RON4	RON5	RON6	RON7	AG1	AG2	AG3	LCT	LARE
12.592	1,1,3-trietoxipropano										x	x	x					x						
13.094	1,1-dietoxihexano										x	x								x				
13.341	1,1-dietoxi-2-metilpropano											x												
15.026	4-vinilanol									x														
16.366	p-alilanol												x								x			
16.567	p-propilanol																				x			
17.351	2-tecr-butil-5-metilanol				x				x															
17.838	Geranilviniléter						x	x																
17.917	p-propenilanol												x	x							x			
18.689	1,1-dietoxioctano											x												
18.863	Estragol																				x	x		
19.711	(2,2-dietoxietil)-benceno																							x
21.422	p-acetoanol																				x			
21.946	Difeniléter				x	x				x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x			x	x
34.560	Octiléter																						x	
HIDROCARBUROS AROMÁTICOS POLICICLÍCOS																								
15.092	3-metil-1H-indeno				x						x		x	x			x	x						
15.995	Naftaleno									x	x	x						x	x		x			
17.097	Fenilciclopentano															x								
19.139	2-metilnaftaleno									x		x												
19.556	1-metilnaftaleno				x					x	x													
20.270	7-metil-1-naftol															x								
20.707	1,2-dihidro-1,1,6-trimetilnaftaleno		x	x					x				x	x	x			x			x	x		
21.382	Bifenilo										x		x											
22.513	1,7-dimetilnaftaleno	x	x	x	x			x																
23.191	Acenaftileno												x	x										
24.047	Acenafteno	x																						
24.321	p-metilbifenilo													x										
24.964	1,4,5-treimetilnaftaleno													x										

T= tequila; CH=charanda; RON=ron; AG= aguardiente; LCT= licor de agave tonayan; LARE= licor de agave rancho escondido

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	CH1	CH2	CH3	RON1	RON2	RON3	RON4	RON5	RON6	RON7	AG1	AG2	AG3	LCT	LARE	
25.996	2,3,5-trimetilnaftaleno	x																							
26.464	Fluoreno												x												
26.813	1,2,3,4-tetrahidro-2,5,8-trimetil-1-naftaleno													x	x	x		x							
26.935	9-metilfluoreno													x											
28.342	2,6-diisopropilnaftaleno																			x	x	x			
28.515	Cadalin	x	x	x	x		x	x	x		x	x	x								x		x		
28.835	1,4,5,8-trimetilnaftaleno	x		x																					
30.897	Fenanteno	x										x	x					x			x				
ALDEHÍDOS																									
8.388	5-metilfurfural	x	x	x		x	x	x	x																x
9.257	Benzaldehído				x						x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	
10.521	Octanal										x	x													x
11.748	2-hidroxibenzaldehído					x		x				x	x			x		x	x						x
13.160	2-metilundecanal															x									
13.596	Nonanal	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
15.236	2-nonenal																								
16.377	Safranal																							x	x
16.599	Decanal	x	x		x	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x	x
16.979	p-menten-9-al																							x	
17.657	p-isopropilbenzaldehído	x		x				x	x							x		x							
18.307	α -geranial				x																				
19.441	Undecanal									x	x							x			x	x	x		
22.115	Dodecanal										x					x	x		x			x	x		
25.093	Lilial				x											x	x		x			x	x		
ÁCIDOS CARBOXÍLICOS																									
15.735	Ácido octanoico	x						x						x											
20.970	Ácido decanoico				x		x	x						x							x				

T= tequila; CH=charanda; RON=ron; AG= aguardiente; LCT= licor de agave tonayan; LARE= licor de agave rancho escondido

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	CH1	CH2	CH3	RON1	RON2	RON3	RON4	RON5	RON6	RON7	AG1	AG2	AG3	LCT	LARE	
25.818	Ácido undecanoico																	x							
HIDROCARBUROS SIMPLES																									
13.431	Undecano									x															
16.421	Dodecano				x					x	x	x	x	x	x	x	x		x		x	x			
18.045	4-metildodecano									x															
18.210	2-metildodecano									x							x			x					
18.397	3-metildodecano																			x		x			
21.899	Tetradecano	x			x					x	x	x		x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x
COMPUESTOS HETEROCÍCLICOS																									
9.467	2,6,6-trimetil-2-viniltetrahidropirano	x																							
11.927	2-etilfuroato			x			x																		
17.165	Benzotiazol															x									

T= tequila; CH=charanda; RON=ron; AG= aguardiente; LCT= licor de agave tonayan; LARE= licor de agave rancho escondido

Tabla 14. Identificación de compuestos orgánicos volátiles mediante MEFS-CG-EM: whisky, coñac, vodka y vino tinto

Tiempo de retención (min.)	Compuesto identificado	BEBIDAS															
		W1	W4	W5	W6	CG1	CG2	CG3	V1	V2	V3	V4	V5	VT6	VT7	VT8	
ÉSTERES																	
10.391	Hexanoato de etilo	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	
10.767	Acetato de hexilo	x		x	x	x		x		x	x			x	x	x	
11.732	2-hexenoato de etilo													x	x	x	
11.932	3-furoato de etilo	x		x		x	x	x									
12.107	Butanoato de isopentilo					x					x			x			
12.433	Lactato de isoamilo															x	
13.077	3-heptanoato de etilo	x	x	x			x	x	x	x	x	x					
13.361	Heptanoato de etilo	x	x	x	x	x		x			x						
13.626	Butanodioato de metiletilo														x	x	
14.129	Octanoato de metilo	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	
14.814	Acetato de 3-metilheptilo								x	x	x		x				
15.292	Acetato de bencilo								x	x	x					x	
15.538	Benzoato de etilo	x	x	x	x												
15.779	Succinato de dietilo	x	x	x	x	x		x						x	x	x	
16.188	Salicilato de metilo							x						x	x	x	
16.387	Octanoato de etilo	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	
16.487	Dietilmetilsuccinato														x		
16.723	Acetato de octilo			x	x												
16.870	Noneoato de etilo				x				x								
17.059	Nonanoato de metilo				x		x		x	x	x						
17.268	Octanoato de isopropilo												x				
17.601	Etanoato de feniletilo		x	x	x									x	x	x	
17.730	2-octenoato de etilo	x		x	x	x		x									
17.818	Hexanoato de isopentilo	x		x	x	x	x	x						x		x	
17.953	Acetato de feniletilo	x	x	x	x	x		x						x	x	x	
18.329	Salicilato de etilo													x		x	
18.680	Pentadienoato de dietilo														x	x	
18.790	Acetato de bornilo											x					
18.915	3-nonenoato de etilo	x		x	x						x						
19.142	Nonanoato de etilo	x	x	x	x	x	x	x			x		x	x		x	

W=whisky; CG=coñac; V=vodka; VT= vino tinto

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	W1	W4	W5	W6	CG1	CG2	CG3	V1	V2	V3	V4	V5	VT6	VT7	VT8
19.584	Hexanoato de hexilo										X					
19.833	Decanoato de metilo			X	X	X	X	X			X			X	X	X
19.974	Butenodiato de dietilo					X	X									
20.096	Acetato de 4-terc-butilciclohexilo								X	X						
20.463	Octanoato de 2-butilo	X			X	X		X	X		X	X	X			
20.511	3-fenilpropanoato de etilo			X	X	X	X		X					X		
20.748	5-metilnonanoato de tetilo										X					
21.007	4-terc-butilacetato										X					
21.271	Acetato de geraniol						X		X							
21.438	Carbonato de fenilbutilo								X	X	X					
21.528	4-decenoato de etilo				X	X	X				X			X		X
21.779	Decanoato de etilo	X	X	X	X	X	X		X	X	X	X	X	X	X	X
21.871	9-decenoato de etilo			X				X								
22.575	Decanoato de 1-metiletilo												X			
23.061	Octanoato de isopentilo	X		X	X	X	X									
24.156	Decanoato de propilo	X		X	X											
24.255	Undecanoato de etilo	X		X	X											
25.217	Maleato de dibutilo						X									
25.476	Decanoato de isobutilo	X	X	X	X			X								
26.399	Pentanoato de 2-feniletilo							X								
26.654	Dodecanoato de etilo	X	X	X	X	X	X	X			X	X	X	X		X
27.767	Butanoato de fenilo				X											
27.829	Decanoato de isopentilo	X		X	X			X								
28.217	Citrato de etilo										X					
29.265	Benzoato de 2-etilhexilo								X	X		X				
31.098	Tetradecanoato de etilo	X		X			X	X			X		X			
31.228	Salicilato de 2-etilhexilo											X				
33.786	Hexadecanoato de metilo										X					
COMPUESTOS AROMÁTICOS																
11.023	1,2,3-trimetilbenceno	X			X	X	X		X			X				
12.962	m-etilestireno								X	X	X					
13.152	3,4-dimetilestireno								X	X		X	X		X	
14.937	1,2,4,5-tetrametilbenceno								X	X		X				
17.432	Isopentilbenceno											X				

W=whisky; CG=coñac; V=vodka; VT= vino tinto

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	W1	W4	W5	W6	CG1	CG2	CG3	V1	V2	V3	V4	V5	VT6	VT7	VT8
18.069	1-fenilhexano												x			
23.756	1-octenilbenceno								x	x						
CETONAS																
11.472	2,2,6-trimetilciclohexanona						x									
13.009	3-nonanona					x	x									
13.156	2-nonanona			x	x	x	x									
16.130	2-decanona												x			
18.838	3-undecanona				x											
18.989	2-undecanona						x		x			x	x			
19.929	2-nonen-4-ona															
22.436	α -ionona										x					
23.456	2,6-di-ter-butylbenzoquinona								x							
24.266	Tridecanona										x	x	x			
27.522	Benzofenona						x	x	x	x						
28.192	β -metilionona						x		x	x		x				
ALCOHOLES																
9.480	Heptanol													x	x	x
10.181	6-metil-5-hepten-2-ol													x		
11.020	3-etil-4-metilpentanol							x						x	x	x
11.284	2-etilhexanol			x		x	x		x					x	x	x
11.459	Alcohol bencilico										x				x	x
11.938	o-cresol/3-metilfenol															x
12.549	1-octanol			x			x		x	x	x			x		x
13.058	Trans-2-octenol															
13.607	2,5-dimetilfenol													x		
13.803	Feniletanol	x	x	x	x	x	x	x						x		
15.578	Nonanol													x		
16.988	4-ter-butylciclohexanol						x	x						x		
18.426	1-decanol			x	x		x	x								
19.262	2-undecanol													x		
23.766	Dodecanol									x		x				
TERPENOS																
11.162	Cimeno	x		x		x	x	x		x	x	x	x			

W=whisky; CG=coñac; V=vodka; VT= vino tinto

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	W1	W4	W5	W6	CG1	CG2	CG3	V1	V2	V3	V4	V5	VT6	VT7	VT8
11.302	Limoneno			x					x	x	x	x	x			
11.400	Eucaliptol														x	
12.165	cis-geraniol										x					
13.452	Linalol			x			x	x			x			x	x	x
14.021	β -ciclocitral						x	x								
14.594	Isopinocarveol									x	x					
14.940	Carveol										x				x	
15.774	Isomentol								x	x	x					
15.873	4-terpineol										x					
17.150	β -citronelol													x		x
17.255	2-borneno						x	x								
17.691	Carvona										x					
18.794	Acetato de bornilo										x					
19.498	Edulan I			x		x		x								
20.497	Isopulegol										x					
21.360	β -damascenona		x	x	x	x	x	x							x	
23.082	Geranilacetona								x	x	x	x	x			
25.899	trans-nerolidol						x	x						x		x
26.794	Geranilisovalerato										x					
27.490	Cubenol										x					
27.911	Cadinol										x					
ÉTERES																
11.587	2-etilhexilter-butiléter												x			
15.731	Verbeniléter										x					
17.351	2-ter-butil-5-metilanisol									x						
18.840	p-proenilanol										x					
18.863	Estragol						x									
21.946	Difeniléter						x		x	x	x	x	x	x	x	
HIDROCARBUROS AROMÁTICOS POLICICLÍCOS																
15.995	Naftaleno		x						x	x	x	x	x			
19.139	2-metilnaftaleno										x					
19.556	1-metilnaftaleno	x			x	x	x		x	x		x				
20.707	1,2-dihidro-1,1,6-trimetilnaftaleno					x	x	x						x		

W=whisky; CG=coñac; V=vodka; VT= vino tinto

Continuación

Tr (min)	Compuesto identificado	W1	W4	W5	W6	CG1	CG2	CG3	V1	V2	V3	V4	V5	VT6	VT7	VT8
21.382	Bifenilo												x			
22.513	1,7-dimetilnaftaleno						x		x					x		
22.933	1,4-dimetilnaftaleno						x				x					
24.078	3-metilbifenilo								x		x					
25.200	3-(2-metil-propenil)-1H-indeno										x					
25.527	1,6,7-treimetilnaftaleno						x	x								
25.996	2,3,5-trimetilnaftaleno					x	x									
26.813	1,2,3,4-tetrahidro-2,5,8-trimetil-1-naftaleno						x									
28.515	Cadalin							x								
ALDEHÍDOS																
9.257	Benzaldehído	x	x	x		x	x	x	x		x			x		
11.748	2-hidroxibenzaldehído										x					
13.596	Nonanal			x			x	x	x	x	x	x	x			
15.236	2-nonenal		x													
16.599	Decanal			x			x		x	x	x	x	x	x	x	x
17.657	p-isopropilbenzaldehído								x	x				x		
17.756	trans-2-decenal										x					
18.462	Cinamaldehído										x					
19.441	Undecanal			x					x	x	x					
19.719	2,4-decadienal															
20.953	2-undecenal										x					
22.117	Dodecanal										x					
30.081	Hexilcinamaldehído									x						
ÁCIDOS CARBOXÍLICOS																
15.735	Ácido octanoico						x							x	x	
20.970	Ácido decanoico			x	x		x	x						x	x	x
25.818	Ácido undecanoico						x	x								
25.842	Ácido dodecanoico				x	x	x									
HIDROCARBUROS SIMPLES																
16.421	Dodecano						x		x	x	x	x	x	x		x
18.200	2-metildodecano								x	x						
21.899	Tetradecano						x		x	x	x	x	x	x		x

W=whisky; CG=coñac; V=vodka; VT= vino tinto

Tabla 15. Compuestos orgánicos volátiles identificados en mezcal, ron, tequila, coñac, aguardiente, bacanora, whisky, raicilla, charanda, licor de agave, licor de caña y vino tinto

Muestra	Terpenos	Esteres	Ácidos carboxílicos	Aldehídos	Cetonas	Furanos	PAH's	Alcoholes	Éteres	Hidrocarburos simples	Compuestos heterocíclicos	Compuestos aromáticos	Total de compuestos identificados
MEZCALES													
M1	12	24	0	4	1	4	13	8	1	1	0	1	69
M2	16	19	1	3	4	2	10	4	2	0	0	1	62
M3	9	19	0	1	0	5	24	2	1	1	0	2	64
M5	4	15	0	2	2	3	24	2	0	0	0	1	53
M6	10	19	1	1	1	5	22	4	1	0	0	1	65
M7	10	22	0	1	0	5	31	4	0	0	0	2	75
M8	14	20	1	6	2	5	20	9	0	2	0	2	81
M9	11	19	1	3	0	1	17	13	2	0	0	0	67
M10	11	20	0	1	3	3	23	6	1	0	0	1	69
M11	10	21	0	2	0	4	26	7	2	0	0	3	75
M12	13	20	0	4	0	2	26	4	6	0	0	2	77
M13	9	18	1	3	0	0	3	4	2	0	0	1	41
M14	16	22	0	9	2	0	1	10	2	1	0	1	64
M15	9	22	0	4	1	3	33	9	0	2	0	0	83
MEZJAM	18	21	4	3	0	4	4	7	0	4	1	2	68
RONES													
RON1	6	28	0	4	5	1	7	4	4	1	0	2	62
RON2	8	17	2	3	5	0	7	7	2	2	0	2	55
RON3	7	22	0	3	3	0	2	6	1	2	0	1	47
RON4	7	21	0	7	5	1	3	2	1	1	1	1	50
RON5	6	25	0	4	0	0	1	5	1	3	0	1	46
RON6	11	18	1	6	5	2	5	5	2	0	0	4	59
RON7	8	10	0	5	0	0	1	6	1	2	0	1	34

Continuación

Muestra	Terpenos	Esteres	Ácidos carboxílicos	Aldehídos	Cetonas	Furanos	PAH's	Alcoholes	Éteres	Hidrocarburos simples	Compuestos heterocíclicos	Compuestos aromáticos	Total de compuestos identificados
TEQUILAS													
T1	14	17	1	4	2	0	6	5	0	1	1	1	52
T2	16	19	0	3	0	1	3	2	0	0	0	2	46
T3	13	15	0	3	0	1	4	5	0	0	1	1	43
T4	23	18	1	5	5	0	4	7	2	2	0	2	69
T5	15	12	0	4	0	0	0	4	1	0	0	0	36
T6	19	14	1	3	1	0	1	4	1	0	1	0	45
T7	16	11	2	5	0	0	2	3	1	0	0	2	42
T8	14	14	0	3	0	1	2	2	1	0	0	1	38
VINOS													
VT6	3	18	2	3	0	0	2	10	1	2	0	0	41
VT7	4	14	2	1	0	0	0	4	1	0	0	1	27
VT8	3	20	1	1	0	0	0	6	0	2	0	0	33
COÑACS													
CG1	3	20	0	1	2	0	3	2	0	0	0	1	32
CG2	6	20	4	3	6	0	7	6	2	2	0	2	58
CG3	7	20	2	2	1	0	3	3	0	0	0	0	38
AGUARDIENTE													
AG1	6	7	0	2	1	0	1	2	7	3	0	2	31
AG2(CACHAZA)	13	34	1	4	1	0	5	5	1	1	0	2	67
AG3(GUARO)	4	10	0	5	2	0	2	1	2	3	0	0	29
BACANORA													
BC1	13	10	1	3	1	0	9	8	0	0	1	0	46
WHISKIES													
W1	1	23	0	1	0	0	1	1	0	0	0	1	28
W4	1	13	0	2	0	0	1	1	0	0	0	0	18

Continuación

Muestra	Terpenos	Esteres	Ácidos carboxílicos	Aldehídos	Cetonas	Furanos	PAH's	Alcoholes	Éteres	Hidrocarburos simples	Compuestos heterocíclicos	Compuestos aromáticos	Total de compuestos identificados
W5	5	27	1	4	1	0	0	4	0	0	0	0	42
W6	1	28	2	0	2	0	1	2	0	0	0	1	37
RAICILLA													
RC1	26	18	0	3	3	1	3	2	2	0	0	1	59
RC2	16	13	0	3	0	0	6	3	2	0	0	0	43
RC3	8	17	2	5	1	1	9	8	3	1	0	1	56
RC4	11	16	2	4	1	0	2	10	4	0	0	0	50
RC5	10	20	0	1	0	3	18	4	1	0	0	2	59
RC6	20	14	3	6	1	2	4	6	1	0	0	0	57
RC7	13	15	1	4	2	1	6	10	1	0	0	1	54
CHARANDA													
CH1	4	12	0	3	2	0	3	3	2	5	0	2	36
CH2	3	9	0	6	1	1	6	1	4	2	0	0	33
CH3	2	20	0	5	1	0	3	4	6	2	0	0	43
LICORES													
LCT	9	9	0	7	1	0	1	3	1	1	0	0	32
LARE	14	8	0	6	0	0	0	4	2	1	0	0	35
VODKA													
V1	3	15	0	5	4	0	4	2	1	3	0	6	43
V2	5	12	0	5	2	0	2	2	2	3	0	5	38
V3	15	24	0	9	2	0	5	2	3	2	0	1	63
V4	3	10	0	2	3	0	2	2	1	2	0	4	29
V5	3	10	0	2	3	0	2	0	2	2	0	2	26

7.2 ANÁLISIS QUIMIOMÉTRICO DE COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES DE LAS DIFERENTES BEBIDAS ALCOHÓLICAS

Con el fin de explorar la similitud de los perfiles de compuestos orgánicos volátiles de las diferentes bebidas alcohólicas se realizó análisis multivariable: análisis de componentes principales.

El análisis de componentes principales (PCA, principal component analysis), es una técnica que pertenece al grupo de técnicas quimiométricas de reconocimiento de modelos, cuyo objetivo principal es “analizar” tablas de datos en busca de relaciones entre objetos y variables.

El PCA constituye un procedimiento matemático que permite transformar un número de variables correlacionadas en un número menor de variables no correlacionadas (ortogonales), llamadas componentes principales. El primer componente (eje) absorbe la mayor cantidad de variabilidad posible del conjunto de datos y cada uno de los componentes restantes absorbe el resto. Es decir, el primer componente principal que se extrae es el que resume lo mejor posible la información contenida en la matriz de datos original.

Es un método tradicionalmente utilizado para reducir la dimensionalidad de un conjunto de datos multivariados o identificar nuevas variables subyacentes al conjunto de datos que permitan una mejor interpretación de los mismos.

La aplicación del PCA sobre un conjunto de datos va a dar lugar a un nuevo conjunto de variables no correlacionadas entre sí (ortogonales) ordenadas de acuerdo a la cantidad de varianza que cada una explica. El procedimiento puede conceptualizarse considerando la distribución de las muestras en dos dimensiones definidas por dos variables (X_1 , y X_2). En la figura 9, el gráfico (a) esquematiza la distribución de los datos en el espacio dimensional definido por X_1 y X_2 , con medias μ_1 y μ_2

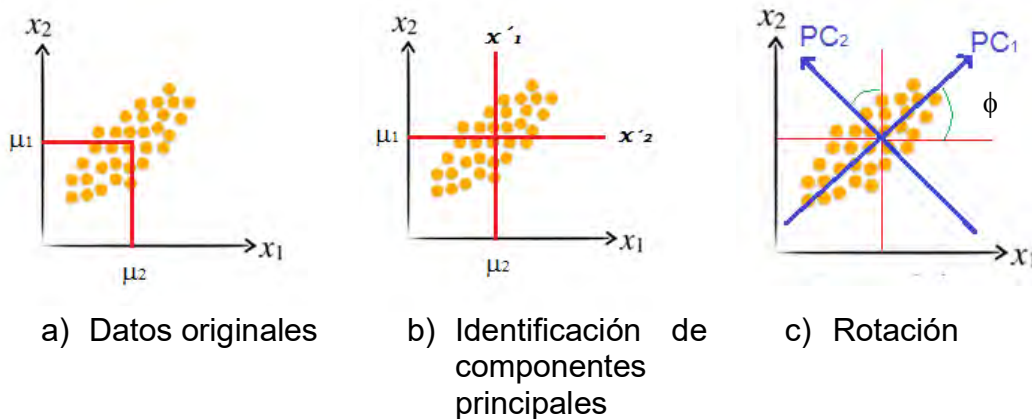


Figura 9. Distribución de los datos en el espacio dimensional

La dispersión (varianza) de los puntos alrededor de la media $\mu_1 - \mu_2$ es indicadora de la correlación y la calidad de la información asociada a ambas variables. Sin embargo, el sistema de coordenadas en (a) no necesariamente es el que mejor representa el comportamiento de los datos en el espacio multidimensional definido por esas dos variables X_1 y X_2 .

El objetivo es usar un PCA para trasladar y/o rotar los ejes originales, de tal forma que los valores originales sobre los ejes X_1 y X_2 sean redistribuidos (proyectados) en un nuevo conjunto de ejes (dimensiones) X'_1 y X'_2 . En el gráfico (b) esto se obtiene simplemente restando la media al valor original de cada dato: $X'_1 = X_1 - \mu_1$ y $X'_2 = X_2 - \mu_2$.

El nuevo sistema de coordenadas X' puede entonces ser rotado alrededor de su origen $\mu_1 - \mu_2$, un cierto ángulo ϕ de tal forma que el primer eje X'_1 quede asociado con la máxima cantidad de varianza de la distribución de datos en el espacio espectral. Este nuevo eje se llama ahora "primer componente principal" ($PC_1 = \lambda_1$) (Gráfico (c)). El segundo componente ($PC_2 = \lambda_2$) es perpendicular al primero (ortogonal) y de esta forma, los ejes mayor y menor de los datos son respectivamente el primer y segundo componentes principales del sistema.

En términos generales, hay tantos componentes como dimensiones tiene el sistema de coordenadas originales y cada uno contiene una menos cantidad de varianza.

La reproyección de los datos originales en nuevos ejes requieren la obtención de ciertos coeficientes de transformación que son aplicados sobre los datos originales en forma lineal. Esta transformación lineal de los datos se realiza a partir de la matriz de varianza-covarianza, o también de la matriz de correlación, de los datos originales y por lo tanto se dice que este método es dependiente de los datos.

La transformación se calcula a partir de los datos originales de la siguiente forma (en este caso se partirá de la matriz de varianza-covarianza):

(1) $n \times n$ es la matriz de covarianza, Cov, de un conjunto de datos (datos n dimensionales).

(2) Los autovalores, $E = [\lambda_{1,1}, \lambda_{2,2}, \lambda_{3,3}, \dots, \lambda_{n,n}]$ y los autovectores $EV = [akp, \dots]$ para $k=1$ hasta n bandas y $p = 1$ hasta n componentes] de la matriz de covarianza se calculan como:

$$EV \text{ Cov } EV^T = \begin{matrix} & & & & & & & E \\ & & & & & & & \left(\begin{matrix} \lambda_{1,1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{2,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{3,3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_{4,4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_{5,5} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_{6,6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_{n,n} \end{matrix} \right) \end{matrix}$$

Donde:

EV^T es la matriz de autovectores supuesta

EV y E es una matriz de covarianza diagonal cuyos elementos $\lambda_{i,i}$ son los autovalores que corresponden a la varianza explicada por cada uno de los componentes p . Hay tantos autovalores como componentes y tantos componentes como bandas originales (variables originales). Los autovalores fuera de la diagonal ($\lambda_{i,j}$) valen 0 y se ignoran.

A partir de los autovalores es posible calcular el porcentaje de varianza explicada por cada componente:

$$\%_p = \frac{\text{autovalor } \lambda_p * 100}{\sum_{p=1}^n \text{autovalores } \lambda_p}$$

A su vez, calculando la correlación que existe entre cada banda y cada componente, es posible determinar cuál es el aporte (pesos o *loads*) de cada una de las bandas originales a la formación de cada componente de forma tal que:

$$R_{kp} = \frac{a_{kp} * \sqrt{\lambda_p}}{\sqrt{Var_k}}$$

Donde:

a_{kp} = autovector para la banda k y el componente p

λ_p = autovalor p

Var_k = varianza de la banda k en la matriz de covarianza

La lectura de los pesos de cada banda en cada componente permite conocer para cada componente principal cuales son las variables originales que más información aportan. De esta manera en los primeros 2 o 3 componentes se concentra la mayor variabilidad existente. [27, 28]

Se realizó el análisis de componentes principales (PCA, por sus siglas en inglés) a los compuestos orgánicos volátiles de las diferentes bebidas alcohólicas en estudio obtenidos mediante MEFS-CG-EM, se utilizó el software XLSTAT versión 2016.03.31175. [29]

Las variables medidas fueron el número obtenido de los diferentes grupos funcionales: cetonas, furanos, ésteres, éteres, PAH's, hidrocarburos simples, compuestos aromáticos, compuestos heterocíclicos, terpenos, alcoholes, aldehídos y ácidos carboxílicos para cada bebida alcohólica. (Tabla 15).

La representación gráfica de los datos en el plano formado por los dos primeros componentes se presenta en la figura 10. Los dos primeros componentes principales o factores explican el 35.00% de la variabilidad total de las muestras (Figura 10). El factor F1 permite distinguir mayoritariamente las bebidas alcohólicas destiladas que provienen de agave (mezcal, tequila, raicilla y bacanora) de las que provienen de caña (ron, charanda y aguardiente), ya que F1 se correlaciona positivamente a las bebidas

alcohólicas que provienen de agave y negativamente a las bebidas alcohólicas que provienen de caña. De las 46 bebidas alcohólicas destiladas que provienen de caña y agave, 9 no cumplen con esta descripción (T4, T5, T7, T8, AG2, M13, M14, LARE y RC4).

El factor F2 se correlaciona positivamente al mezcal y se correlaciona negativamente a los tequilas, por lo que permite distinguir a los mezcales de los tequilas a excepción de cinco mezcales (M2, M9, M13, M14 Y MEZJAM) y un tequila (T2) de las 23 muestras analizadas. Se encontró que dentro de los mezcales que no se agrupan el mezcal M14 es abocado (procedimiento que se utiliza para suavizar el sabor del mezcal, mediante la adición de productos naturales saborizantes o colorantes permitidos) y el mezcal MEZJAM es una bebida preparada ya que es mezcal añejo con Jamaica (*Hibiscus Sabdariffa*, flor de Jamaica). El mezcal y el tequila se pueden diferenciar porque el mezcal es elaborado en su gran mayoría de forma artesanal, en cambio el tequila es elaborado de forma industrial (proceso de producción estandarizado); otra diferencia es que el tequila se produce exclusivamente de *Agave tequilana Weber var. azul* en cambio, el mezcal puede producirse de distintos tipos de agave a excepción del *Agave tequilana Weber var. azul* y las zonas geográficas que cuentan con Denominación de Origen para el mezcal son más amplias y distribuidas en el territorio mexicano (San Luis Potosí, Oaxaca, Puebla, Tamaulipas, Zacatecas, Durango, Guerrero, Guanajuato y Michoacán) lo que agrega un factor de variabilidad en la elaboración del mezcal en cada región, mientras que en el caso del tequila es una región con denominación de origen más reducida (Tamaulipas, Nayarit, Michoacán, Jalisco y Guanajuato). [30]

De los mezcales analizados 10 se encuentran correlacionados positivamente a los factores F1 y F2 (Figura 10), en donde los descriptores predominantes fueron furanos, ésteres e hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH's); la presencia mayoritaria de estos descriptores en el mezcal probablemente es porque generalmente en los mezcales hay largos tiempo de fermentación (hasta de diez días), no se adicionan en la mayoría de los casos levaduras, lo que hace que una gran cantidad de levaduras y bacterias locales participen activamente en la fermentación que además de la conversión de azúcares a etanol, se producen principalmente ésteres étilicos y metílicos, entre otros. En el caso de los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH'S, por sus siglas en inglés),

es a causa de la combustión de maderas que se usan para calentar los “hornos” donde el maguey debe ser cocido y estos son absorbidos por el agave. Los furanos también se forman durante la cocción y son derivados de la degradación térmica de las hexosas y pentosas (Figura 10).

En la figura 10 se observa la correlación positiva al factor F2 y negativa a F1 de aguardiente, charanda, vodka, ron (1,3,5 y 6) y whisky (1 y 4) donde los compuestos predominantes fueron hidrocarburos simples, éteres, cetonas y compuestos aromáticos.

Los rones se agrupan negativamente al factor F1 y se caracterizan por ser de caña. Las bebidas alcohólicas que provienen de la uva, como el vino tinto (VT6, VT7, VT8) y el coñac (CG1 y CG2) se encuentran correlacionados negativamente al factor F1 a excepción del CG3. De las 6 bebidas alcohólicas que se producen de uva, cinco se agrupan. El coñac CG3 se encuentra correlacionado positivamente al factor F1 y negativamente al factor F2 en donde los descriptores que más contribuyen son alcoholes, terpenos, ácidos carboxílicos y compuestos heterocíclicos; los alcoholes aportan aromas frutales y los terpenos aromas florales. Este coñac se caracteriza por poseer fuertes notas frutales y florales, esto lo vuelve diferente de los demás coñacs.

En cuanto a las bebidas alcohólicas que se producen de granos (vodka y whisky), se encuentran correlacionados negativamente al factor F1, excepto el whisky W6. Las diferentes muestras de vodka se encuentran agrupados negativamente al factor F1 y positivamente al factor F2, excepto el vodka V3, este vodka es adicionado de pimienta blanca como saborizante lo que probablemente provoca que su descriptor principal sean los aldehídos y no los éteres, cetonas, hidrocarburos simples y compuestos aromáticos como es el caso de los otros.

Como se observa en la figura 10, cada tipo de bebida alcohólica (mezcal, ron, vodka, etc.) generalmente se asocia al utilizar a los compuestos orgánicos volátiles como variables en el análisis de componentes principales. Las bebidas que no se agrupan tienen alguna característica que las hace particulares dentro de su mismo grupo de bebida alcohólica como saborizantes añadidos, proceso de maduración, entre otros.

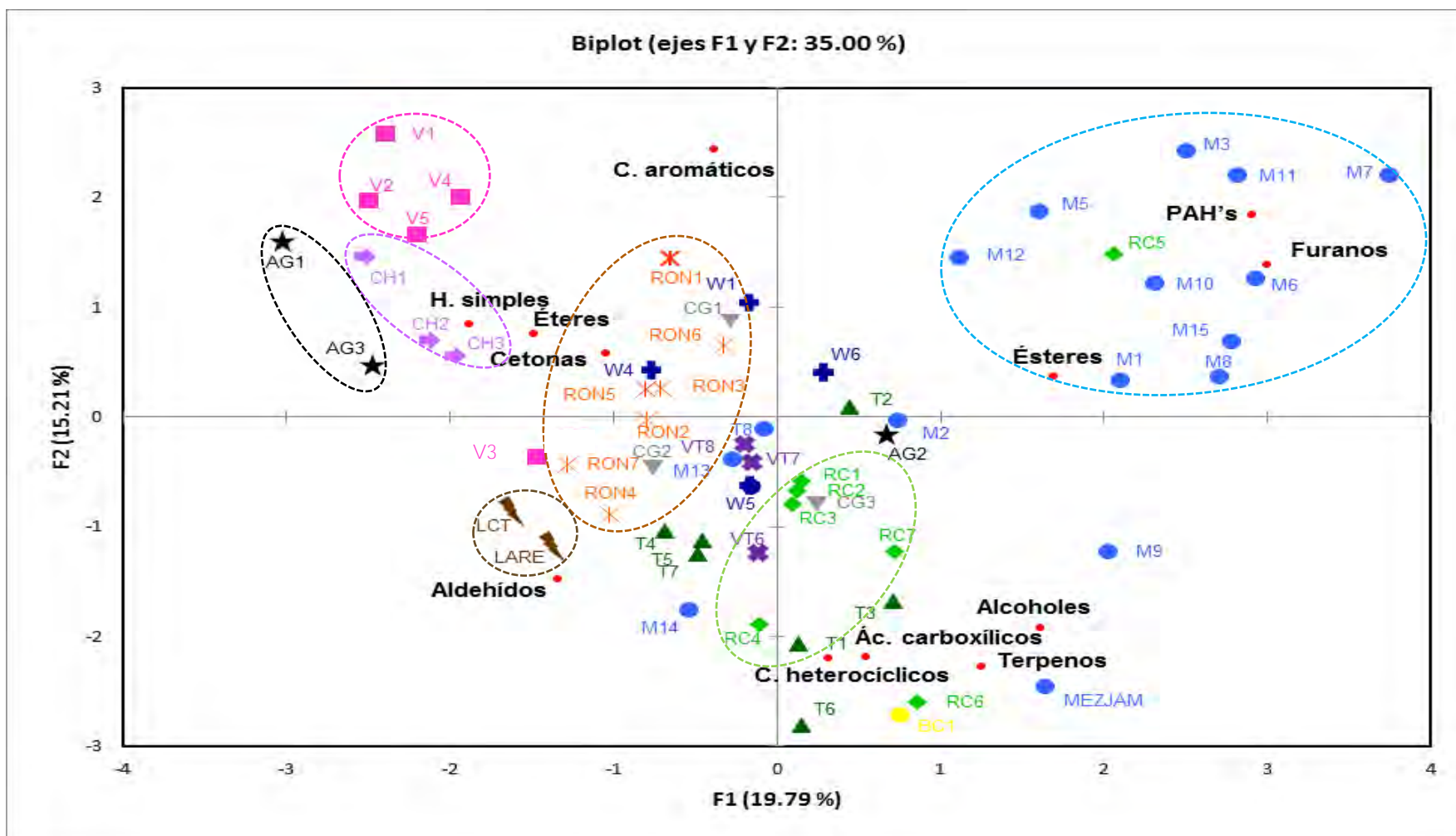


Figura 10. Análisis de componentes principales (PCA), de los compuestos orgánicos volátiles obtenidos por MEFS-CG-EM.

7.3 DETERMINACIÓN DE METANOL Y ALCOHOLES SUPERIORES

Mediante cromatografía de gases con detector de ionización de flama. Se identificó metanol y alcoholes superiores de las bebidas alcohólicas comparando los tiempos de retención obtenidos con los de una disolución estándar (Figura 11).

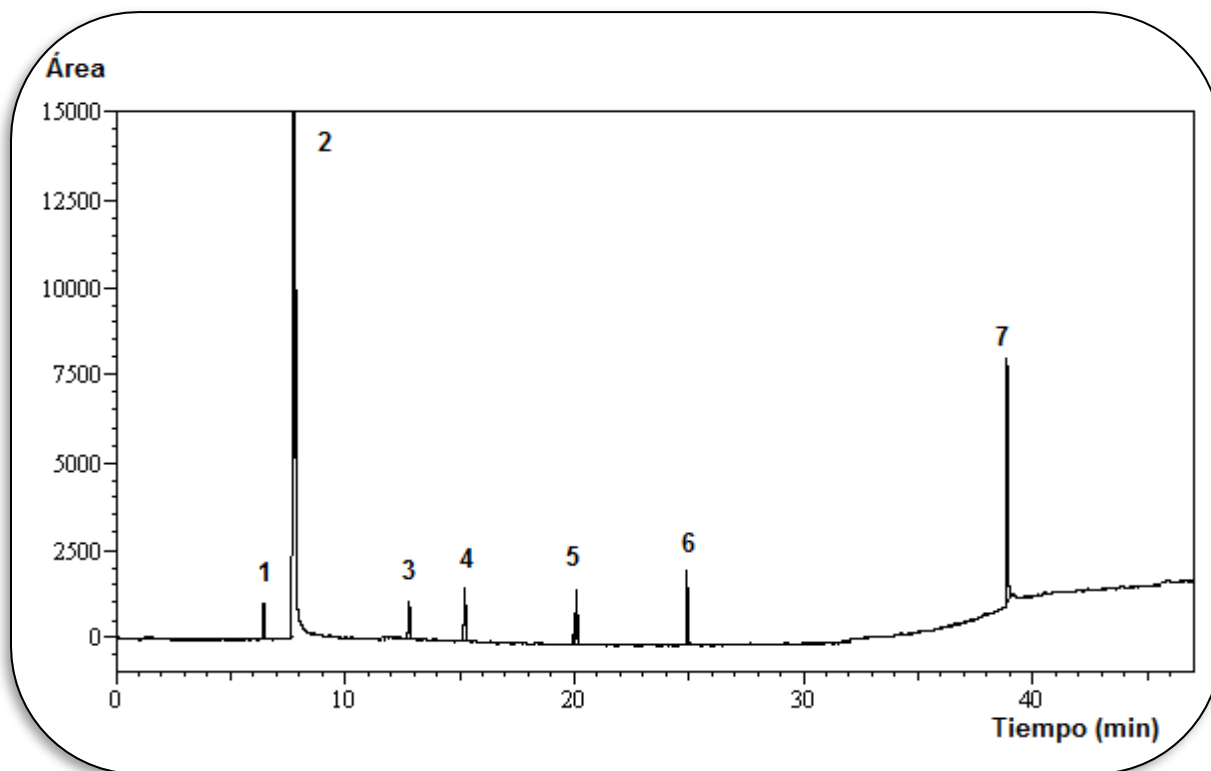


Figura 11. Cromatograma de estándares en etanol: 1, metanol (6.456); 2, etanol (7.770); 3, propanol (12.797); 4, isobutanol (15.218); 5, alcohol isoamílico (20.080); 6, hexanol (24.917) y 7, feniletanol (38.883).

En la figura 12. Se muestra el cromatograma del mezcal M14, el cual presentó la mayor cantidad de metanol.

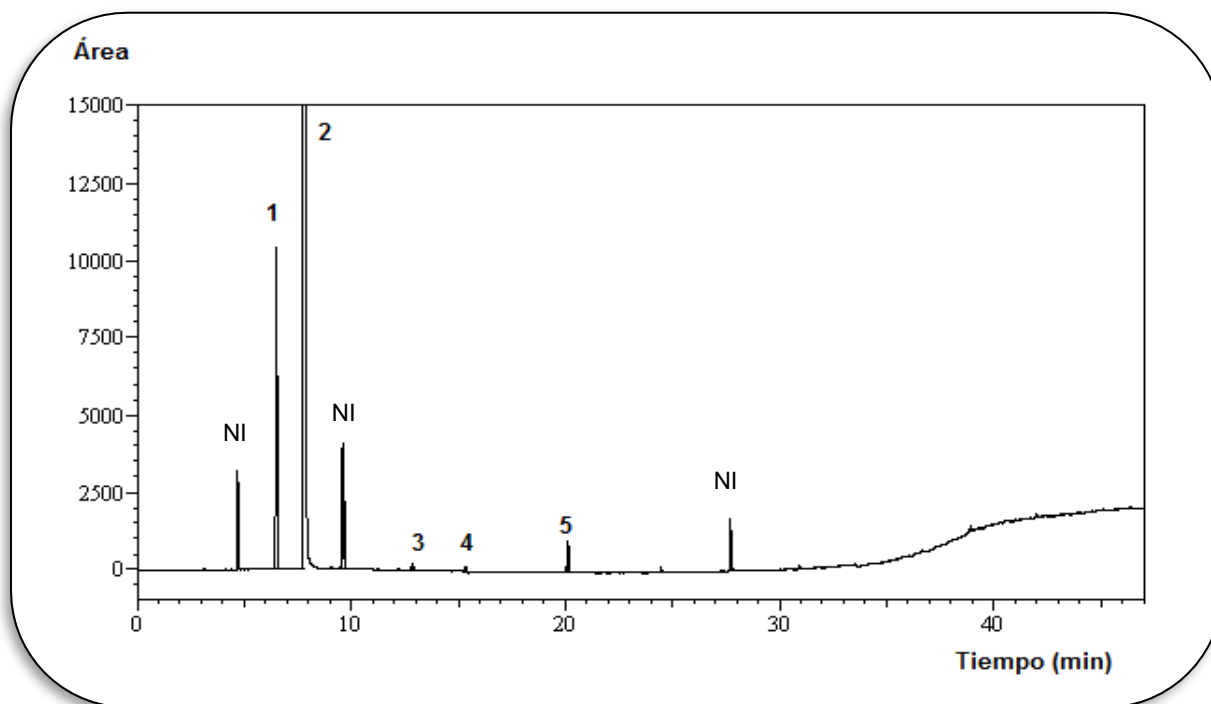


Figura 12. Cromatograma del mezcal M14. Identificación como en la Figura 10. (NI= no identificado).

Se cuantificó metanol y alcoholes superiores (propanol, isobutanol, alcohol isoamílico, hexanol y feniletanol) por cromatografía de gases con detector de ionización de llama. La concentración se calculó con curvas de calibración (Anexo I) y los resultados se expresaron en mg/100 mL de alcohol anhidro. En la tabla 15 se presentan los resultados obtenidos de la cuantificación de metanol en mg/100mL de alcohol anhidro y el porcentaje de etanol de cada muestra indicado en la etiqueta.

Tabla 16. Cuantificación de metanol en mg/100mL de alcohol anhidro y porcentaje de etanol de cada muestra (n=3)

Muestras	Metanol (mg/ 100mL de alcohol anhidro)	%CV	Etanol %v/v declarado
MEZCALES			
M1	21.84	10.02	39.35
M3	41.91	4.41	41.4
M5	286.29	4.08	50.00
M6	98.27	14.70	47.00
M7	180.17	9.09	48.00
M9	291.61	11.68	47.33
M12	56.00	0.00	47.00
M13	139.43	7.88	39.95
M14	431.95	4.27	38.06
M15	44.61	0.75	40.00
M10	60.87	3.21	48.01
M11	177.38	1.29	51.18
RAICILLAS			
RC3	105.41	3.49	39.52
RC4	59.67	4.35	41.00
RC5	70.22	7.96	47.00
RC6	26.58	11.17	38.81
RC7	24.46	9.93	37.22
TEQUILAS			
T1	43.37	5.19	40.00
T2	79.70	10.88	54.63
T3	61.61	7.67	38.09
T5	301.73	1.59	38.04
T7	124.37	6.83	38.00
T8	89.53	10.75	37.73
RONES			
RON1	98.25	0.39	40.18
RON5	121.42	3.30	38.00
COÑACS			
CG1	13.31	11.18	36.97
CG3	9.36	10.42	37.00

En la tabla 17 se presenta la concentración de alcoholes superiores expresada en mg/ 100 mL de alcohol anhidro.

Tabla 17. Cuantificación de alcoholes superiores en mg/100mL de alcohol anhidro.

Muestras	Propanol*	CV%	Isobutanol*	CV%	Alcohol isoamílico*	CV%	Hexanol*	CV%	Feniletanol*	CV%	Total de alcoholes superiores*
MEZCALES											
M1	ND**	-	11.97	1.6	29.55	0.76	ND	-	ND	-	41.52
M3	ND	-	16.03	9.13	32.68	8.05	ND	-	ND	-	48.71
M5	6.02	4.78	22.78	3.35	63.83	5.69	32.32	9.85	21.10	5.19	146.05
M6	11.74	9.92	24.06	5.94	42.64	8.51	13.94	8.45	16.52	7.36	108.90
M7	36.30	2.14	32.24	3.95	64.22	2.24	39.59	7.66	16.91	8.08	189.25
M9	11.52	10.60	15.51	1.30	39.84	0.03	29.26	4.12	16.44	2.37	112.56
M10	17.27	4.62	45.20	5.47	77.42	6.97	11.87	8.50	14.27	6.97	166.03
M11	16.92	12.48	70.16	3.62	123.70	9.03	27.88	6.74	34.88	7.71	273.54
M12	5.74	2.36	18.98	5.52	50.15	10.30	17.60	6.26	15.58	3.11	108.06
M13	6.32	7.49	17.61	4.21	38.63	5.33	7.23	10.94	12.97	6.82	82.76
M14	6.02	8.34	16.81	4.76	44.61	5.00	7.15	8.53	14.47	5.04	89.07
M15	11.64	5.64	35.71	4.60	69.97	9.25	31.97	12.00	12.01	6.07	161.30
RAICILLAS											
RC3	28.98	3.01	58.72	5.19	82.98	2.86	ND	-	12.13	6.35	182.81
RC4	63.18	8.15	34.46	7.42	49.68	7.01	ND	-	13.28	11.26	160.61
RC5	13.13	11.13	51.93	12.07	106.54	13.26	ND	-	14.18	8.95	185.78
RC6	ND	-	23.86	9.31	37.57	11.16	ND	-	13.69	11.08	75.11
RC7	16.85	8.29	19.20	11.79	24.76	9.99	2.78	13.38	ND	-	63.59
TEQUILAS											
T1	18.82	9.93	31.09	4.18	40	7.60	40	9.07	40.00	9.98	169.91
T2	9.93	10.62	44.81	8.11	54.63	4.56	54.63	6.98	54.63	2.94	218.63
T3	7.16	5.48	10.29	5.12	21.70	23.9	ND	-	ND	-	39.14
T5	13.59	1.91	15.71	9.56	14.65	7.54	ND	-	7.33	5.46	51.28
T7	ND	-	15.52	7.05	7.76	3.78	ND	-	3.88	7.81	27.16
T8	17.63	11.33	39.71	10.89	28.67	11.57	ND	-	ND	-	86.01
RONES											
RON1	ND	-	3.91	5.98	8.46	1.78	4.76	11.81	ND	-	17.13
RON5	2.49	4.59	6.69	5.15	14.14	5.22	ND	-	ND	-	23.32
COÑACS											
CG1	9.92	2.06	77.9	6.63	115.51	7.34	113.63	7.29	ND	-	316.97
CG3	ND	-	24.66	8.68	39.94	10.42	ND	-	ND	-	64.60

n=3, *mg/100 mL de alcohol anhidro, **ND= No detectado

Con base en la NOM-070-SCFI-1994, las especificaciones para metanol son de 30 a 300mg/100mL de alcohol anhidro; los mezcales que se encontraron fuera de los límites permisibles son: M1 y M14 (Tabla 16). Con respecto a los alcoholes superiores los límites establecidos son de 100mg a 400mg/ 100mL de alcohol anhidro. Los mezcales que no cumplieron las especificaciones fueron M1, M3, M13 y M14 ya que se encontraron por debajo del límite permitido. (Tabla 17).

La NOM-142-SSA1/SCFI-2014 establece las especificaciones para las bebidas destiladas como la raicilla, el ron y el coñac; el cual el límite máximo para metanol es de 300mg/mL y para alcoholes superiores el límite máximo es de 500mg/mL de alcohol anhidro. Esta norma no especifica los límites mínimos para metanol y alcoholes superiores. Por lo que todas las raicillas, los rones y los coñacs están dentro de las especificaciones establecidas (Tabla 16 y 17).

Para el tequila, la NOM-006-SCFI-2012 indica los límites permisibles de metanol y alcoholes superiores que deben de ser de 30 a 300 mg/100mL de alcohol anhidro en metanol y de 20 a 500 mg/100mL de alcohol anhidro en alcoholes superiores. Por lo que todos los tequilas analizados se encontraron dentro de los límites establecidos a excepción del tequila T5 que se encuentra por arriba del límite establecido por la norma para metanol. (Tabla 16 y 17).

7.4 ANÁLISIS QUIMIOMÉTRICO DE ALCOHOLES SUPERIORES EN LAS DIFERENTES BEBIDAS ALCOHÓLICAS DESTILADAS

Los alcoholes superiores tienen un aroma característico (quemado) que puede tener una fuerte influencia en el sabor de las bebidas alcohólicas, además si su concentración y/o el consumo de las bebidas que los contienen son elevados, estos componentes pueden ser algunos de los responsables del dolor de cabeza y malestar general que se manifiestan después de la embriaguez. [15]

Se realizó el análisis de componentes principales a las muestras de la tabla 16, en donde las variables medidas fueron los alcoholes superiores (propanol, isobutanol, alcohol isoamílico, hexanol y feniletanol). Los dos componentes principales explican el 73.74% de la variabilidad total. (Figura 13). La mayoría de los mezcales se correlacionan negativamente al factor F2 y las raicillas se correlacionan positivamente al factor F2. Por lo que el factor F2 permite distinguir los mezcales de las raicillas a excepción de RC6, M10 y M7 de las 17 muestras analizadas (mezcales y raicillas). (Figura 13)

Los tequilas añejos T1, T2 y T7 se correlacionan negativamente con el factor F2 y se diferenciaron de los tequilas blancos T5 y T8.

Los rones ron5 y ron1 se agrupan negativamente al factor F1 y F2 por lo que no se distinguen de los mezcales como en el PCA de la figura 9 en donde se observaba la diferencia de las bebidas alcohólicas que se producen de caña de las que se producen de agave por lo tanto los alcoholes superiores probablemente no son un marcador que logre hacer esa distinción en este tipo de bebidas alcohólicas estudiadas. En cuanto a los descriptores (alcoholes superiores) no se encuentra ninguno correlacionado negativamente en el factor F1, por lo que en esas bebidas alcohólicas probablemente no hay una contribución mayoritaria de ninguno de los alcoholes superiores. (Figura 13).

La muestra de coñac CG3 se correlaciona negativamente al factor 1 y el coñac CG1 se correlaciona positivamente, se sigue diferenciando el coñac 3 del 1 a pesar de que las variables medidas cambiaron. (De todos los compuestos orgánicos volátiles a solo alcoholes superiores).

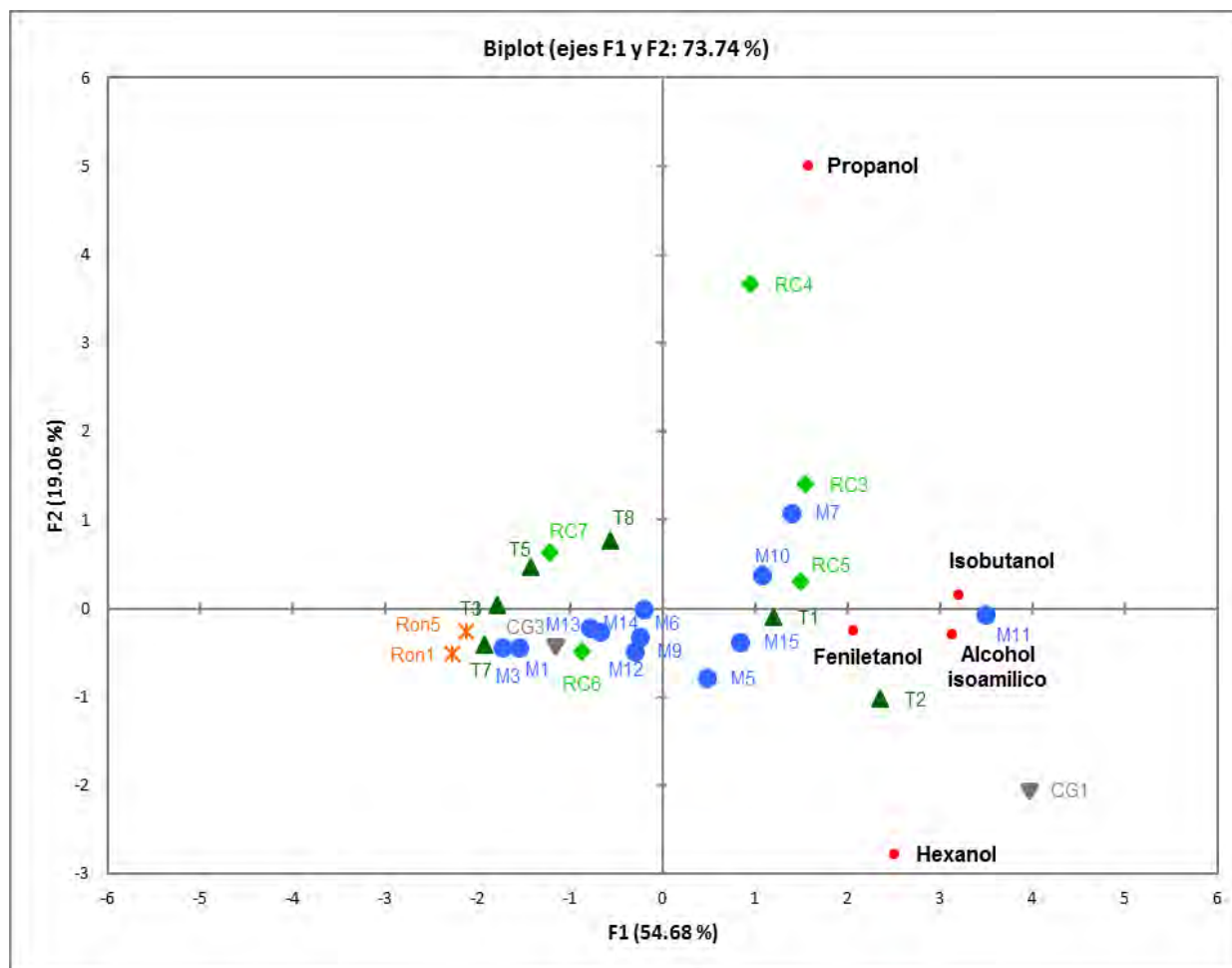


Figura 13. Análisis de componentes principales de alcoholes superiores en muestras de mezcal, raicilla, tequila, ron y coñac.

Además de los alcoholes superiores como descriptores se adiciono el metanol como otra variable al análisis de componentes principales, como se ilustra en la Figura 14.

El análisis de componentes principales (Figura 14) explica el 64.78% de la variabilidad de las muestras. Se observa que, al introducir metanol como otra variable, la distribución de las muestras cambió, las raicillas se correlacionan negativamente al factor F2 y de los 10 mezcales que se agrupaban solo se agrupan 7 en este caso, sin embargo, se sigue diferenciando a los mezcales de las raicillas.

A diferencia del análisis de componentes principales de la figura 14, las muestras de tequila no se agruparon por el tipo de maduración, tampoco por el tipo de materia prima (*Agave tequilana weber*), por lo que probablemente no es el valor de una única variable la que permite caracterizar a las bebidas alcohólicas, sino una combinación de todas las variables, lo que hace que se distingan unos tequilas de otros pueden deberse a más factores como el tipo de cepa de levadura y condiciones de fermentación. Los rones mantuvieron la correlación negativa al factor F1 y al F2, así que el hecho de agregar otra variable como el metanol, no causo que cambiaran significativamente las agrupaciones que se formaron solamente utilizando a los alcoholes superiores como variables. (Figura 14).

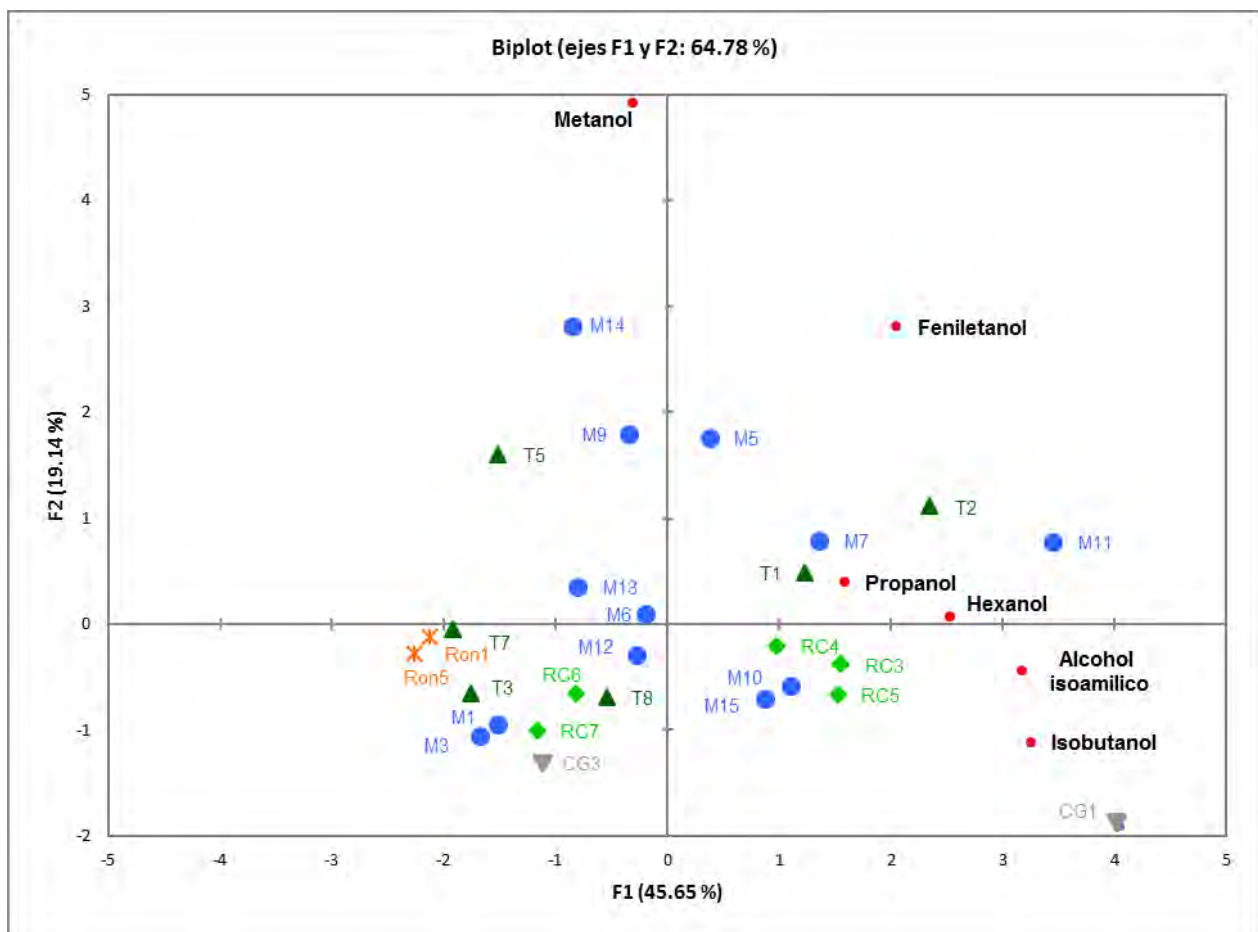


Figura 14. Análisis de componentes principales de alcoholes superiores y metanol como descriptores.

La complejidad de los mezcales proviene de la materia prima y los procesos básicos con los que fue elaborado ya que el mezcal blanco (base de todos los demás), es un destilado que no ha sido sujeto a proceso de maduración alguno. [1]

Se realizó el análisis de componentes principales solamente a los mezcales y las variables medidas fueron metanol y alcoholes superiores (Figura 15). El análisis explica el 87.59% de la variabilidad total de las muestras. Los cuatro mezcales (M1, M3, M13, M14) que se producen a partir de *Agave angustifolia* Haw “Espadín” se correlacionan negativamente al factor F1, menos el M15 que se correlaciona positivamente al factor F1; los mezcales M6 y M12 que se producen a partir del *Agave duranguensis* se correlacionan negativamente al factor F1. Los mezcales que pertenecen a otras especies de agave se correlacionan positivamente al factor F1, estos mezcales tienen en común que provienen de agaves silvestres a excepción de los mezcales M9 y M15. (Figura 15). El agrupamiento del *Agave duranguensis* y la distinción entre agave silvestre y cultivado ya se habían reportado en trabajos previos de estudio de agaves midiendo otros grupos de compuestos. (Valtierra, G, 2008) [31]

Si no se considera al metanol como variable en el PCA, se sigue conservando la correlación negativa del factor F1 de los mezcales que provienen del *Agave angustifolia* Haw “Espadín” (agave cultivado) y los mezcales que provienen del *Agave duranguensis*. (agave silvestre) (Figura 15).

Se correlacionan positivamente al factor F1 los agaves de tipo silvestre (*A. marmorota*, *A. karwinski*, *A. potatorum*, *A. cupreata*). Por lo tanto, se diferenciaron los agaves cultivados de los silvestres, menos los mezcales que provienen del silvestre *duranguensis*. Los mezcales que se correlacionan positivamente al factor F1, que son en su mayoría los mezcales silvestres, tienen mayor contribución de los alcoholes superiores que los que se correlacionan negativamente al factor F1 que principalmente son los mezcales cultivados. El Mezcal M11 proviene del *Agave karwinski* (Figura 15), este mezcal tiene un sabor muy herbal e intenso que incluso se suele mezclar con otros agaves para suavizar el resultado, como se observa: este mezcal es el que tiene asociado una mayor contribución de los alcoholes isobutanol, soamilico y feniletanol.

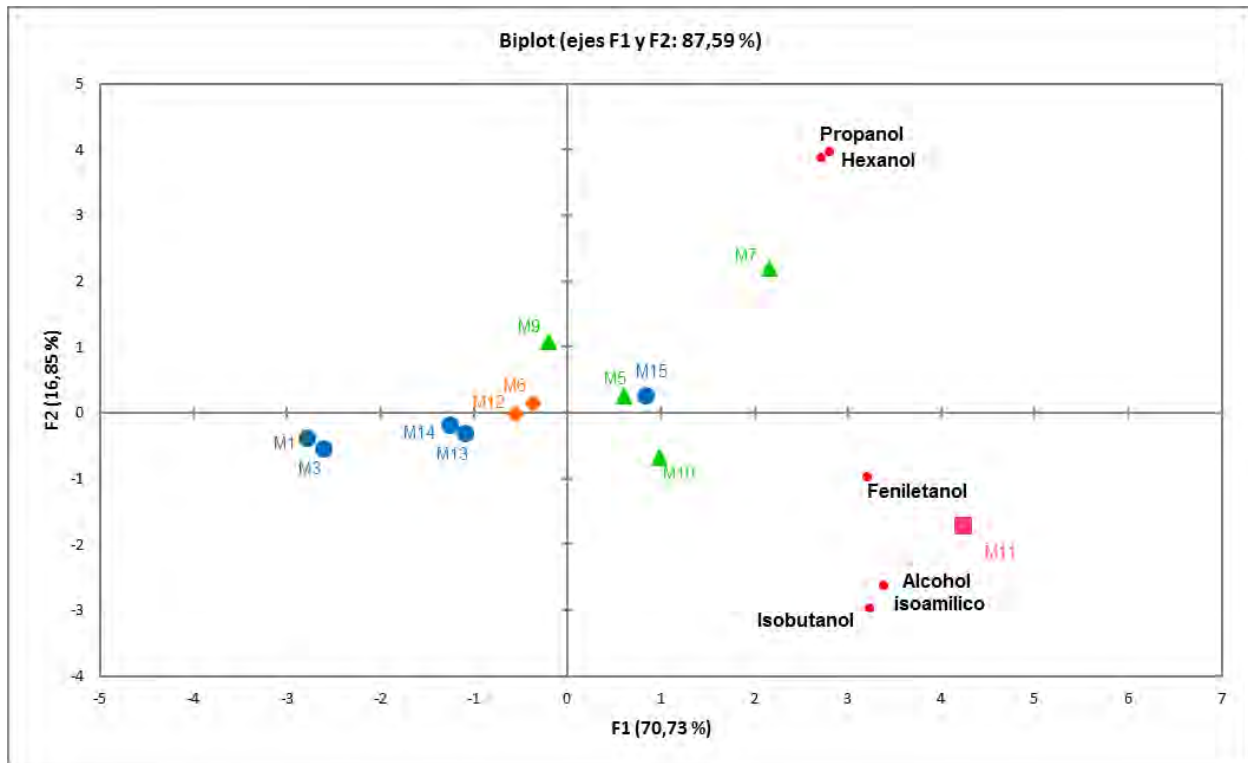


Figura 15. Análisis de componentes principales de alcoholes superiores en muestras de mezcal.

Los mezcales M6 y M12 provienen del *Agave duranguensis* se correlacionan negativamente al factor F1. Los mezcales M10, M5, M11 y M7 provienen de agaves de tipo silvestre.

Los cinco mezcales que provienen del *Agave angustifolia* Haw “Espadín” (M1, M3, M13, M14 y M15), cuatro de ellos se agrupan negativamente al factor F1 y al F2.

Se realizó el análisis de componentes principales a los mezcales utilizando como variables a los compuestos orgánicos volátiles; el PCA explica el 52.31% de la variabilidad total. De los 7 mezcales que se producen a partir del *Agave angustifolia* Haw “Espadín” (M1, M2, M3, M8, M13, M14 y M15), 5 se agrupan negativamente al factor F2 (Figura 16).

Se observó que en cada uno de los cuatro cuadrantes del PCA hay descriptores que distinguen a los mezcales entre sí, esto es probablemente por múltiples factores como el proceso de producción, tipo de levadura, condiciones de fermentación y tipo de agave.

Se compararon los PCA's para mezcales de las figuras 15 y 16; en un análisis de PCA se utilizaron como variables medidas alcoholes superiores (Figura 15) y en otro a compuestos orgánicos volátiles (Figura 16), se observó en los PCA's de las figuras 15 y 16 que los mezcales provenientes del *Agave angustifolia* Haw "Espadín" se correlacionan negativamente al factor F2 y los mezcales M6 y M12 que provienen del *Agave duranguensis* se correlacionan negativamente al factor F1. Con el PCA de la figura 16 no se agruparon los mezcales M6 y M12 que se producen a partir de *Agave duranguensis* a diferencia del PCA de la figura 15 que solo con los descriptores de alcoholes superiores se asociaron.

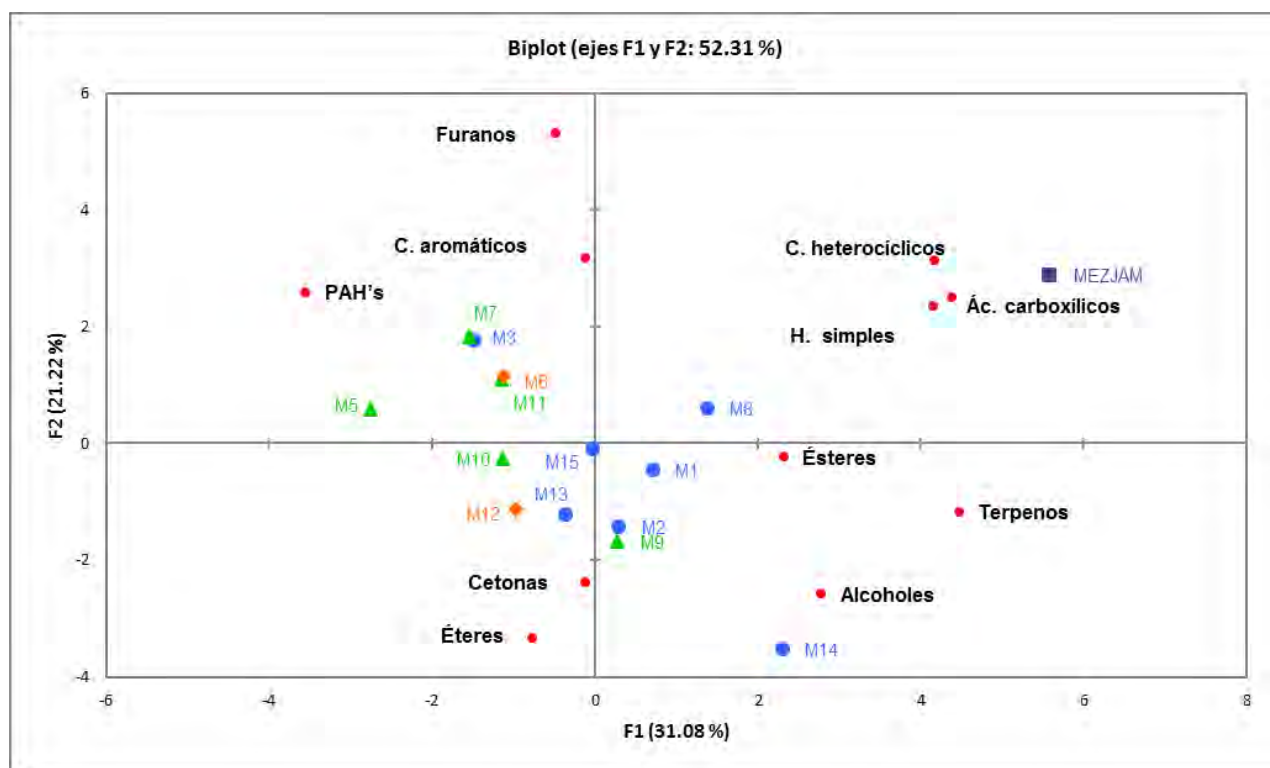


Figura 16. Análisis de componentes principales de los compuestos orgánicos volátiles de mezcales.

8 CONCLUSIONES

Se obtuvo el perfil de compuestos orgánicos volátiles que se clasificó en: alcoholes, cetonas, aldehídos, ácidos carboxílicos, terpenos, hidrocarburos aromáticos policíclicos, hidrocarburos simples, compuestos aromáticos y compuestos heterocíclicos de diferentes bebidas alcohólicas (mezcal, tequila, raicilla, charanda, ron, bacanora, whisky, licor de agave, licor de caña, aguardiente, vodka, coñac y vino tinto) mediante microextracción en fase sólida en modo head space seguida de cromatografía de gases acoplado a espectrometría de masas.

Se determinaron las diferencias entre bebidas alcohólicas mediante el perfil de compuestos orgánicos volátiles obtenido.

Se optimizó una metodología por cromatografía de gases con detector de ionización de llama para la cuantificación de metanol y alcoholes superiores (propanol, isobutanol, alcohol isoamílico y feniletanol).

Se realizó el análisis multivariado de componentes principales (PCA) a las bebidas alcohólicas, en donde las variables medidas fueron los compuestos orgánicos volátiles observándose que las bebidas alcohólicas que se producen a partir de agave se distinguen de las que se producen a partir de caña. También se observó que cada tipo de bebida alcohólica (ron, tequila, mezcal, etc) se agrupó con base en el perfil de compuestos orgánicos volátiles. El mezcal presentó la mayor variabilidad en su composición química, probablemente a causa de múltiples factores como el número elevado de microorganismos que participan en la fermentación, por la gran diversidad de especies de agaves utilizados y por el proceso artesanal de producción.

Se realizó el PCA a los mezcales, tequilas y raicillas utilizando como variable solamente a los alcoholes superiores y se observó que los mezcales se diferencian de las raicillas y los mezcales que provienen de agave tipo silvestre se distinguen de los mezcales de agaves cultivados.

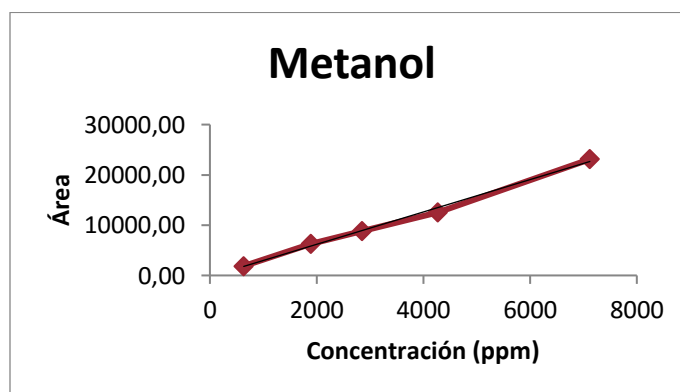
Se analizaron 12 mezcales de los cuales M1 y M14 no cumplen con los límites establecidos para metanol y M1, M3, M13 y M14 presentaron valores fuera de la norma para alcoholes superiores (NOM-070-SCFI-1994). Las muestras analizadas de tequila, raicilla, ron y coñac cumplen las especificaciones para metanol y alcoholes superiores de acuerdo con los valores establecidos a excepción del tequila T5 que está por arriba de los límites establecidos para metanol. (NOM-006-SCFI-2012 y NOM-142-SSA1/SCFI-2014).

9 ANEXO I

Curvas de calibración de alcoholes superiores

Tabla 1. Datos de curva de calibración del metanol. Concentraciones entre 0.6 y 7 mg/mL, (n=3)

Concentración (ppm)	Área			Promedio	D.E	CV%
	1	2	3			
633,6	1915	1815	1875,3	1868,43	50,35	2,69
1890	6920	6463	5496	6293,00	727,06	11,55
2848	9085	9142	8290	8839,00	476,30	5,39
4272	13315	12432	12021	12589,33	661,19	5,25
7120	20990	24102,1	24227	23106,37	1833,89	7,94

**Figura 1.** Curva de calibración del metanol. Concentraciones entre 0.6 y 7 mg/mL**Tabla 2.** Datos de curva de calibración de propanol. Concentraciones entre 0.1 y 2 mg/mL, (n=3)

Concentración (ppm)	Área			Promedio	D.E	CV%
	1	2	3			
138	402	389	375	389	13,50	3,47
414	811	792	659	1189	82,82	6,97
690	1731	1618	1520	1930	105,59	5,47
1380	2322	2219	2170	4150	77,58	1,87
2140	6533	6185	5473	6064	540,32	8,91

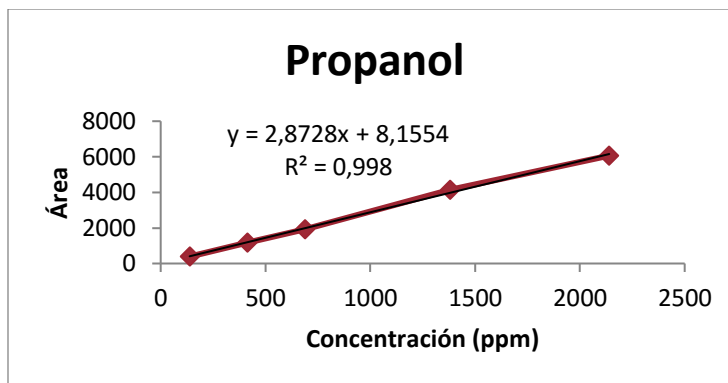


Figura 2. Curva de calibración de propanol. Concentraciones entre 0.1 y 2 mg/mL

Tabla 3. Datos de curva de calibración de isobutanol. Concentraciones entre 0.3 y 3 mg/mL, (n=3)

Concentración (ppm)	Área			Promedio	D.E	CV%
	1	2	3			
313,8	609	601	515	575	52,12	9,06
627,6	1326	1201	1501	1342,67	150,69	11,22
1046	2912	2515	2671	2699,33	200,01	7,41
2092	4311	5199	4642	4717,33	448,77	9,51
3138	8101,5	7694	8502	8099,17	404,01	4,99

n=3

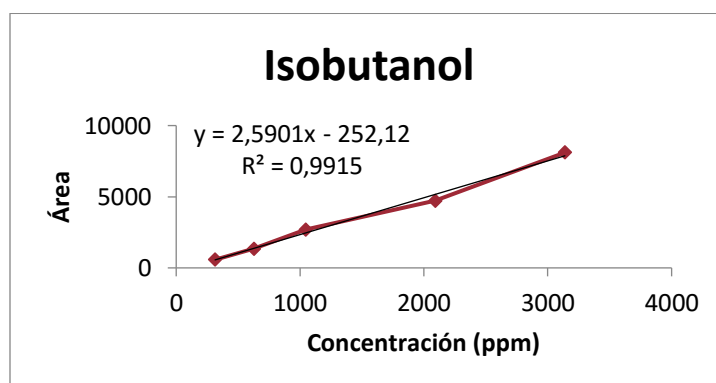
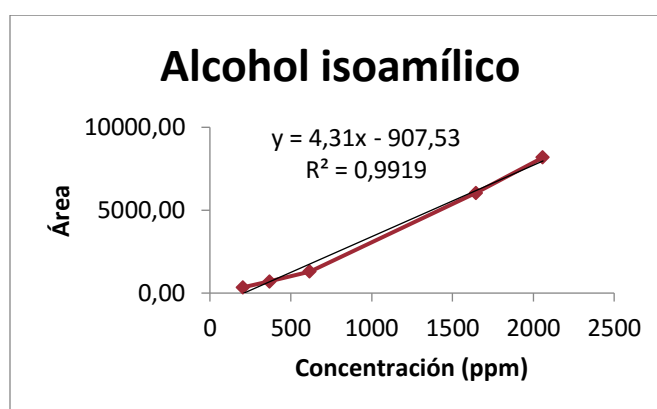


Figura 3. Curva de calibración de isobutanol. Concentraciones entre 0.3 y 3 mg/mL

Tabla 4. Datos de Curva de calibración de alcohol isoamílico. Concentraciones entre 0.2 y 2 mg/mL, (n=3)

Concentración (ppm)	Área			Promedio	D.E	CV%
	1	2	3			
205,44	386	318	342	348,67	34,49	9,89
370,8	665	655	806	708,67	84,44	11,92
618	1302	1356	1238	1298,67	59,07	4,55
1648	5931	6238	5991	6053,33	162,72	2,69
2060	8026	7952	8567	8181,67	335,75	4,10

**Figura 4.** Curva de calibración de alcohol isoamílico. Concentraciones entre 0.2 y 2 mg/mL**Tabla 5.** Datos de curva de calibración de hexanol. Concentraciones entre 0.1 y 2 mg/mL, (n=3)

Concentración (ppm)	Área			Promedio	D.E	CV%
	1	2	3			
125.28	321	331	253	301.67	42.44	14.07
280.8	608	765	703	692.00	79.08	11.43
468	1169	950	1024	1047.67	111.40	10.63
835.2	1349	1382	1575	1435.33	122.08	8.51
2088	3261	3382	2945	3196.00	225.63	7.06

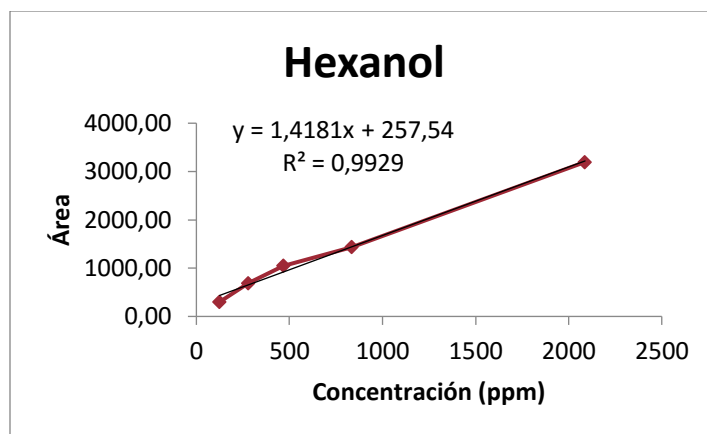


Figura 5. Curva de calibración de hexanol. Concentraciones entre 0.1 y 2 mg/mL

Tabla 6. Datos de curva de calibración de feniletanol. Concentraciones entre 0.2 y 2 mg/mL, (n=3)

Concentración (ppm)	Área			Promedio	D.E	CV%
	1	2	3			
228.4	350	412	377	379.67	31.09	8.19
343	734	679	756	723.00	39.66	5.49
507	1142	1215	1325	1227.33	92.12	7.51
1014	4270	3580	4099	3983.00	359.33	9.02
2028	10741	11995	11933	11556.33	706.78	6.12

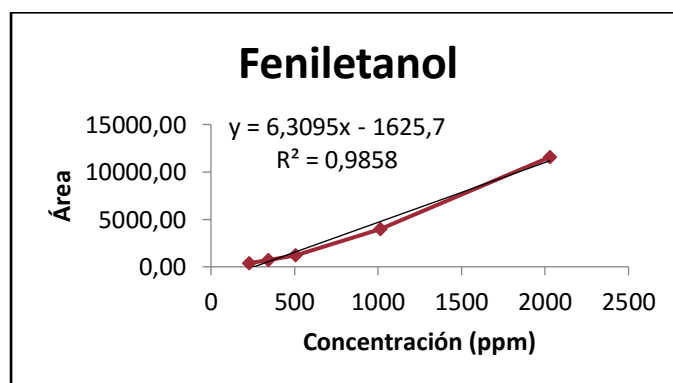


Figura 6. Curva de calibración de feniletanol. Concentraciones entre 0.2 y 2 mg/mL

Información de bebidas alcohólicas

#	Bebida	Información
MEZCALES		
1	M1	<i>Agave angustifolia</i> Haw, San Juan del Río Tlacolula, Oaxaca
2	M2	<i>Agave angustifolia</i> Haw, "Espadín"
3	M3	<i>Agave angustifolia</i> Haw, San Juan del Río Tlacolula, Oaxaca
4	M5	<i>Agave cupreata pápalo</i> , Guerrero
5	M6	<i>Agave duranguensis</i> cenizo
6	M7	<i>Agave marmorota</i> , Santiago Matatlan
7	M8	<i>Agave angustifolia</i> Haw "Espadín"
8	M9	<i>Agave potatorum tobalá</i>
9	M10	<i>Agave convallis, jabalí</i>
10	M11	<i>Agave karwinski</i>
11	M12	<i>Agave duranguensis</i> , Michoacán
12	M13	<i>Agave angustifolia</i> Haw "Espadín", silver
13	M14	Mezcal joven abocado con gusano de agave, <i>Agave angustifolia</i> Haw "Espadín"
14	M15	<i>Agave angustifolia</i> Haw "Espadín" con gusano, Tlacolula
15	MEZJAM	Marca: Mezcamaica, <i>Agave angustifolia</i> Haw "Espadín" con Jamaica deshidratada y miel de agave.
TEQUILAS		
16	T1	Cinco años de añejamiento
17	T2	Cinco años de añejamiento, Jalisco
18	T3	Reposado
19	T4	Reposado
20	T5	100% agave, blanco
21	T6	100% agave, reposado
22	T7	Reserva añejo
23	T8	Cuervo tradicional plata
RAICILLAS		
24	RC1	<i>Agave Maximiliano</i> , "Lechugilla"
25	RC2	No disponible
26	RC3	<i>Agave angustifolia</i> Haw, Jalisco
27	RC4	No disponible
28	RC5	<i>Agave angustifolia</i> Haw, Jalisco
29	RC6	<i>Agave Maximiliano</i> , "Lechuguilla"
30	RC7	<i>Agave angustifolia</i> Haw
BACANORA		
31	BC1	No disponible
CHARANDAS		
32	CH1	No disponible
33	CH2	No disponible
34	CH3	No disponible
RONES		
35	RON1	Ron añejo Mocambo, 20 años
36	RON2	Ron Bundaberg, Australia
37	RON3	Ron añejo superior, Santiago de Cuba
38	RON4	Ron añejo

39	RON5	Ron blanco, Santiago de Cuba Carta Blanca
40	RON6	Ron Jamaica Appleton añejado
41	RON7	Ron Kraken Ghost White

LICORES

42	LCT	Licor de caña Tonayán
43	LARE	Licor de agave Rancho Escondido

AGUARDIENTES

44	AG1	No disponible
45	AG2	Guaro, Costa Rica
46	AG3	Cachaza, Brasil

VINOS TINTOS

47	V6	Merlot
48	V7	Cabernet
49	V8	Cabernet

COÑACS

50	CG1	No disponible
51	CG2	No disponible
52	CG3	Couvasier

VODKAS

53	V1	Smirnoff
54	V2	Vodka Wygorowa
55	V3	Vodka kentucky moonshinne White pepper
56	V4	XACKN Premium vodka, exportado de Siberia
57	V5	Vodka Belunga Transatlantic raicing

WHISKIES

58	W1	No disponible
59	W4	Añejado 12 años
60	W5	Pura malta
61	W6	No disponible

10 ANEXO II

Se muestra a manera de ejemplo un cromatograma iónico total de cada una de las bebidas alcohólicas analizadas mediante MEFS-CG-EM.

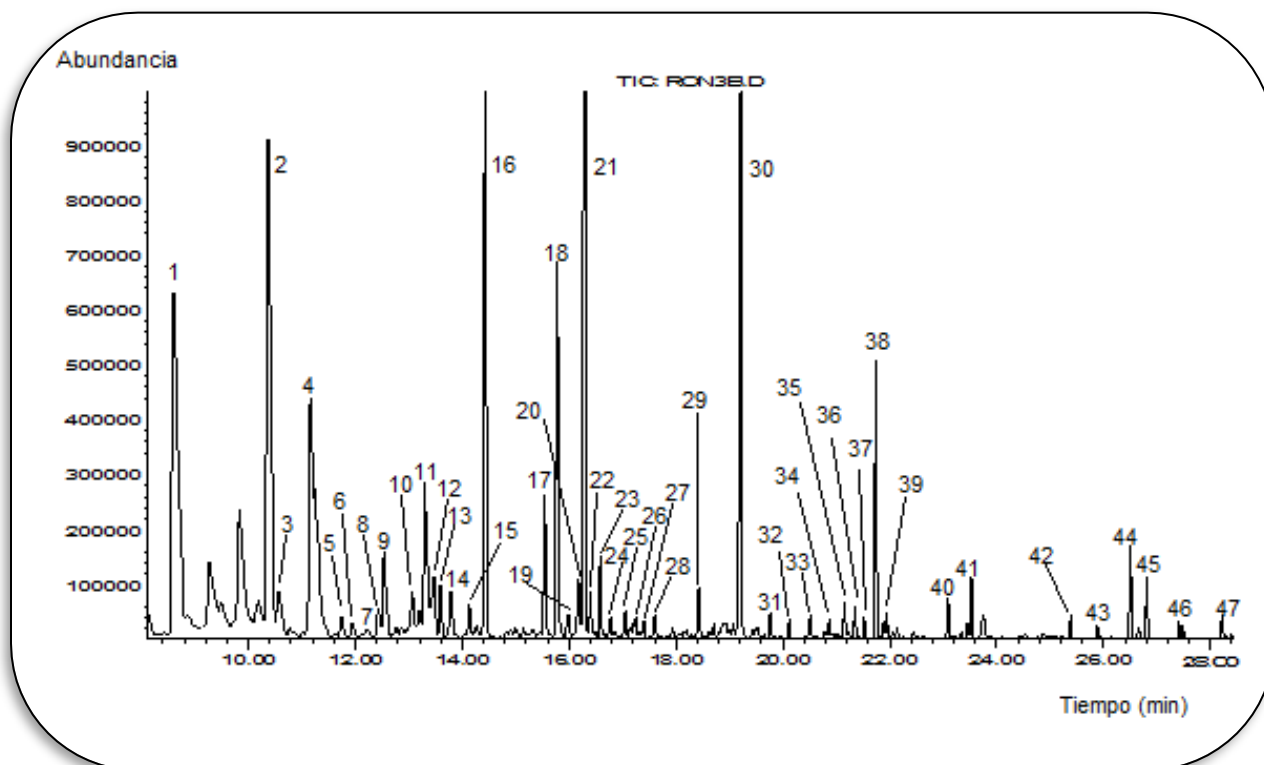

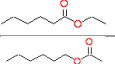
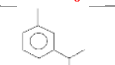






























Figura 1. Cromatograma iónico total: Ron 3

Tabla 1. Identificación de compuestos orgánicos volátiles de una muestra de ron. (n=2)

No. de pico	Tiempo de retención (min)	Compuesto identificado	Prob.	Match	Estructura química	Área	
						1	2
1	9.252	Benzaldehído	67.2	905		14682450	13187991
2	10.391	Hexanoato de etilo	82.7	917		53465949	51752998
3	10.767	Acetato de hexilo	78.4	983		134562	156428
4	11.163	Cimeno	30.9	918		20494680	20108035
5	11.450	Eucaliptol	45.6	798		97234598	10298401

6	11.932	2-furoato de etilo	71.3	872		1267886	1180193
7	12.107	Butanoato de isopentilo	56.9	645		598234	601293
9	12.338	Acetato de etilhexilo	35.2	613		543401	523878
10	12.426	Etilmalonato	56.5	598		2109105	2306564
11	12.548	1-octanol	68.3	885		983474	982039
12	13.073	6-heptenoato de etilo	71.6	761		4764629	4494152
13	13.592	Nonanal	82.4	904		2539892	3136756
14	13.799	Feniletanol	81.5	908		3776547	3581031
15	14.131	Octanoato de metilo	87.4	891		1810048	1895603
16	14.888	Alcanfor	24.2	718		70829432	65636424
17	15.294	Acetato de bencilo	58.2	745		357898	396891
18	15.530	Benzoato de etilo	29.8	696		8083268	7737910
19	15.578	Nonanol	54.2	845		4875092	4082393
20	16.150	2-decanona	60.1	735		980992	908238
21	16.288	Salicilato de metilo	68.9	818		53872559	53623832
22	16.387	Octanoato de etilo	92.0	929		6406165	6831873
23	16.415	Dodecano	31.5	890		2244375	2327751
24	16.595	Decanal	70.2	931		2628935	3688450
25	16.677	3-butilcicloheptanona	42.0	730		495877	499234
26	16.988	4-ter-butilciclohexanol	54.0	791		500834	580231
27	17.057	Nonanoato de metilo	61.1	773		1405211	1387867
28	17.730	2-octenoato de etilo	86.5	727		689790	654985
29	18.425	1-decanol	12.3	886		2861609	2569261
30	19.496	Edulan I	50.7	805		69746925	69823164
31	19.830	Decanoato de metilo	51.5	567		133949	127328
32	20.700	1,2-dihidro-1,1,6-trimetilnaftaleno	37.2	720		892374	887234
33	20.721	2-(1,3-butadienil)-metilestireno	41.5	768		991231	987143
34	20.868	p-dihidroeugenol	36.4	609		662741	630893
35	21.020	Acetato de 4-terc-butilciclohexilo	46.7	731		263837	250987
36	21.145	2-metilpropanoato de 3-hidroxi-2,4,4-trimetilpentilo	72.3	836		1997946	1679084

37	21.778	Decanoato de etilo	87.3	932	<chem>CCCCCCCCC(=O)OCC</chem>	1180930	1136673
38	21.887	Tetradecano	42.8	917	<chem>CCCCCCCCCCCC</chem>	916656	785268
39	21.951	Difenil éter	76.5	843	<chem>c1ccc(Oc2ccccc2)cc1</chem>	626718	755621
40	23.084	Geranilacetona	62.3	872	<chem>CC(=O)C=C(C)C=C(C)C</chem>	1907390	1877145
41	23.766	Dodecanol	72.6	881	<chem>CCCCCCCCCCCCO</chem>	409834	408237
42	25.217	Maleato de dibutilo	59.6	525	<chem>CCCCOC(=O)C=CC(=O)OCCCC</chem>	203954	277367
43	25.889	trans-nerolidol	28.6	804	<chem>CCCC(O)C=CC(C)C</chem>	484139	483586
44	26.656	Dodecanoato de etilo	82.0	867	<chem>CCCCCCCCCCCC(=O)OCC</chem>	803992	667438
45	26.818	1,2,3,4-tetrahidro-2,5,8-trimetil-1-naftalenol	35.3	728	<chem>CC1C(C)C(O)C2C(C)C1C2</chem>	3019078	2556443
46	27.527	Benzofenona	75.0	856	<chem>O=C(c1ccccc1)c2ccccc2</chem>	348932	295800
47	28.219	Metilionona	37.8	736	<chem>CC(C)C=C(C)C(C)C</chem>	1229767	954678

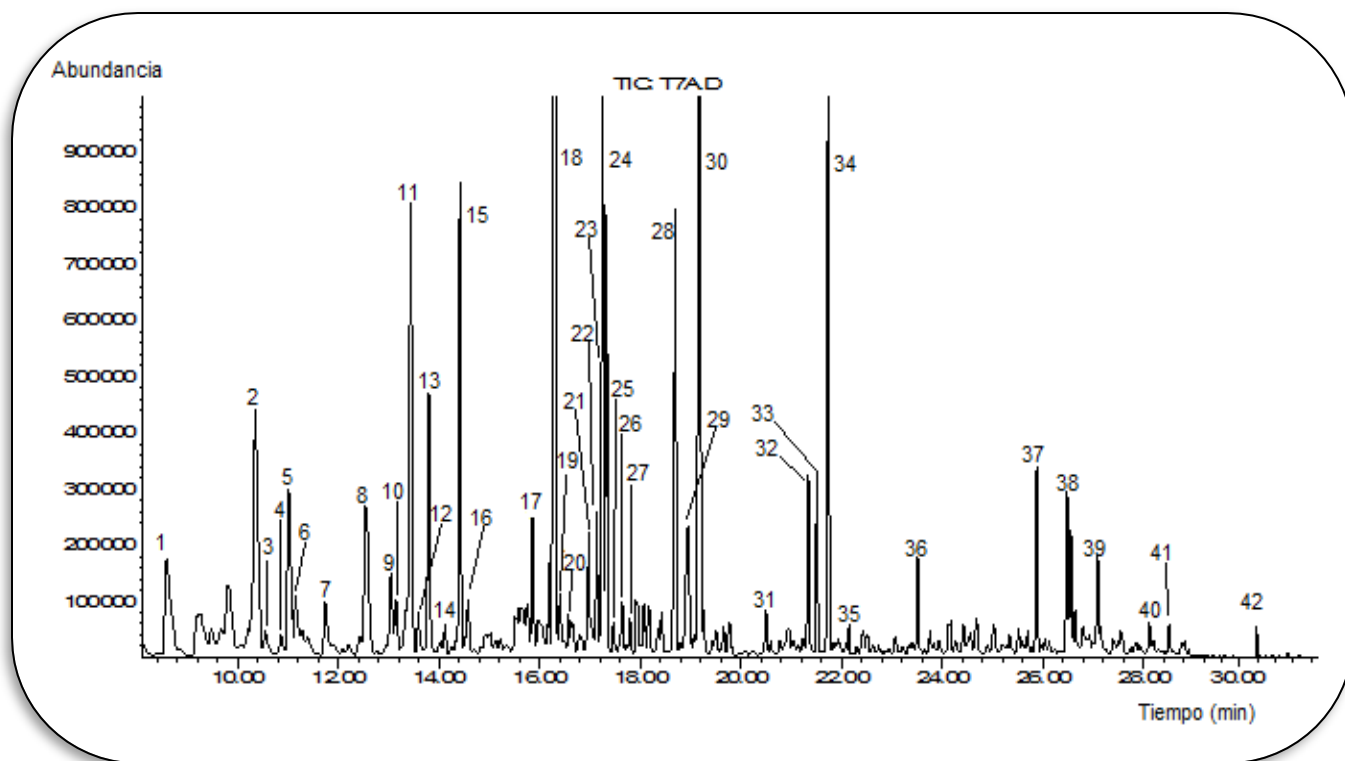
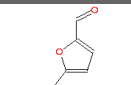
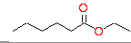
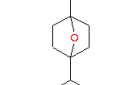
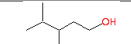
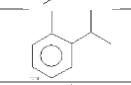
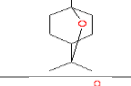
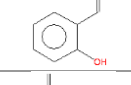
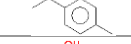
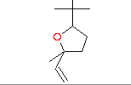
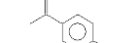
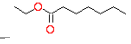
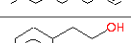

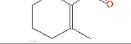

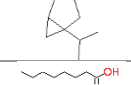
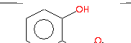
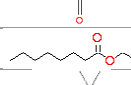
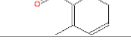
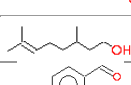



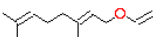
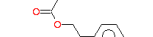
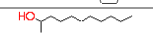
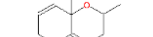
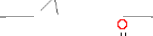


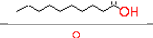
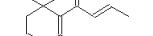


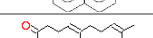
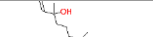



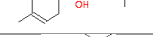


Figura 2. Cromatograma iónico total: tequila T7

Tabla 2. Identificación de compuestos orgánicos volátiles de una muestra de tequila. (n=2)

No. de pico	Tr (min)	Compuesto identificado	Prob.	Match	Estructura química	Área	
						1	2
1	9.189	5-metilfurfural	88.3	900		2080574	2245692
2	10.391	Hexanoato de etilo	74.5	880		28213693	27734024
3	10.861	1,4-cineol	40.0	753		1360620	1358567
4	11.016	3-etil-4-metilpentanol	72.2	948		15244731	15123380
5	11.162	o-cimeno	24.9	903		5390070	5392470
6	11.394	Eucaliptol	57.8	836		2021960	2106341
7	11.748	2-hidroxibenzaldehído	51.5	738		4704968	4855473
8	12.951	3-etilestireno	45.6	689		980238	943494
9	13.044	Óxido de linalol	34.0	741		6054971	6053582
10	13.145	α -p-dimetilestireno	18.8	874		4224395	4130358
11	13.352	Heptanoato de etilo	71.6	737		35494007	37120182
12	13.589	Nonanal	27.0	796		2655457	3289738
13	13.800	Feniletanol	86.0	953		15863041	15574853
14	14.010	β -ciclocitral	64.7	895		6688847	6747818
15	14.118	Octanoato de metilo	86.0	909		46228435	46945073
16	14.576	Isotujol	36.9	900		3633892	3685793
17	15.694	Ácido octanoico	52.7	746		1046047	1909440
18	16.188	Salicilato de metilo	74.4	864		75033412	75265924
19	16.297	Octanoato de etilo	66.4	754		8284344	9295030
20	16.401	Safranal	47.0	832		3803252	3519318
21	16.574	Decanal	43.8	841		1933450	2399132
22	17.150	β -citronelol	32.6	902		6540337	6696338
23	17.639	p-isopropilbenzaldehído	49.5	829		3431541	2847178

26	17.837	Geranilvinileter	31.2	811		1503342	1611959
27	17.928	Acetato de feniletilo	30.9	771		5137639	5312370
28	19.258	2-undecanol	32.2	839		2100133	2525384
29	19.497	Edulan I	39.5	868		1815482	1826706
30	19.816	Decanoato de metilo	33.1	750		45388161	44561201
31	20.511	3-fenilpropanoato de etilo	69.8	786		2779175	2878168
32	20.948	Ácido decanoico	60.3	765		3066204	3839533
33	21.335	β -damascenona	56.9	920		8754841	8861832
34	21.734	Decanoato de etilo	89.9	940		30419432	31691587
35	22.502	1,7-dimetilnaftaleno	24.4	887		1666207	1790766
36	23.066	Geranilacetona	21.2	770		1638169	1830374
37	25.873	Trans-nerolidol	54.5	932		8469745	12543098
38	26.635	Dodecanoato de etilo	74.6	786		2887122	3290053
39	27.607	Eudesmol	83.7	892		866484	9128382
40	28.808	Bisabolol	56.1	735		912341	831752
41	28.504	Cadalin	45.3	851		1673463	1880435
42	31.287	Salicilato de 2-etilexilo	93.5	844		361690	419843

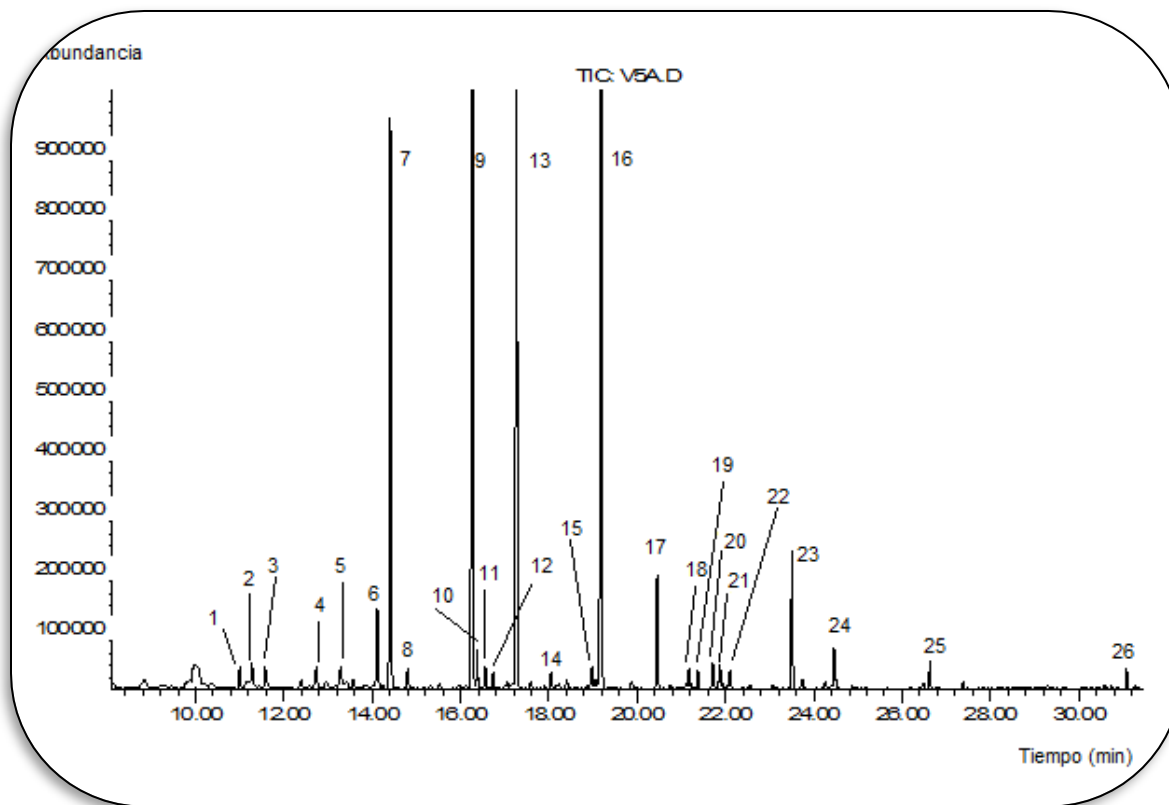

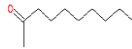
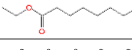




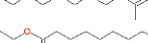
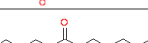









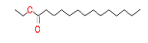


Figura 3. Cromatograma iónico total: vodka V5

Tabla 3. Identificación de compuestos orgánicos volátiles de una muestra de vodka. (n=2)

No. de pico	Tr (min)	Compuesto	Prob.	Match	Estructura química	Área	
						1	2
1	11.144	p-cimeno	30.2	892		594430	624397
2	11.275	Limoneno	36.1	733		1023702	1073356
3	11.587	2- etilhexiltercbutiléter	58.9	782		637882	719773
4	12.949	α-p-dimetilestireno	27.6	746		753000	628247
5	13.573	Nonanal	45.2	826		596798	487601
6	14.113	Octanoato de metilo	93.3	930		4038439	3831161
7	14.803	Acetato de 3- metilheptilo	64.5	833		713012	627403

8	15.967	Naftaleno	32.2	763		238532	252181
9	16.130	2-decanona	42.2	742		187919	177813
10	16.271	Octanoato de etilo	91.9	928		465293	466325
11	16.379	Dodecano	46.7	932		406559	430592
12	16.562	Decanal	38.9	861		675862	519411
13	17.268	Octanoato de isopropilo	74.7	884		30572055	29058328
14	18.069	1-fenilhexano	60.1	606		245572	182115
15	18.981	2-undecanona	89.4	902		918263	854219
16	19.051	Nonanoato de etilo	69.0	842		37081176	35063956
17	20.452	Octanoato de butilo	77.6	881		4340159	4181024
18	21.364	Bifenilo	33.9	750		104899	109746
19	21.713	Decanoato de etilo	73.9	882		1116965	1154087
20	21.864	Tetradecano	40.3	919		724716	297713
21	21.928	Difeniléter	81.3	877		477757	471992
22	22.575	Decanoato de 1-metiletilo	75.9	783		196046	194004
23	23.067	Geranilacetona	39.4	794		198525	90292
24	24.264	Tridecanona	67.3	820		378829	370537
25	26.631	Dodecanoato de etilo	83.3	876		649023	516071
26	31.080	Tetradecanoato de etilo	70.0	774		303778	198597

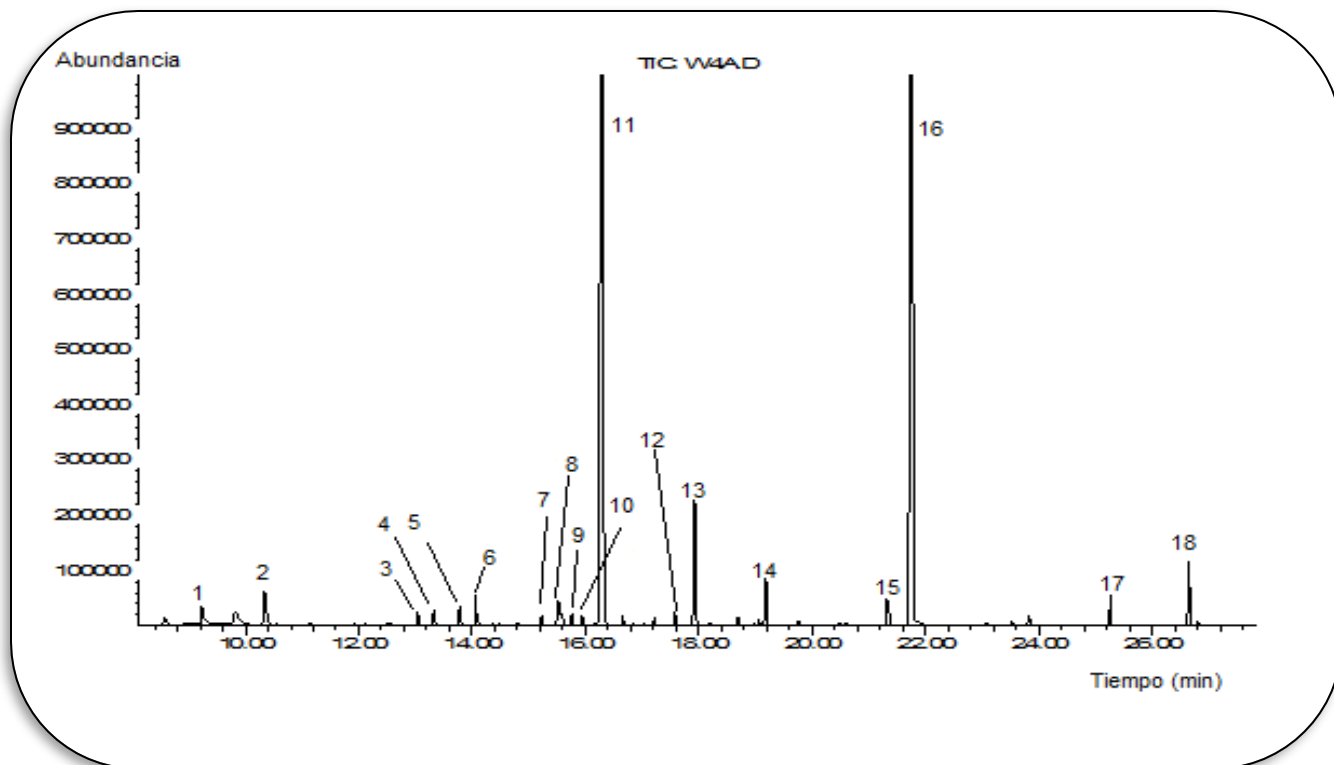


Figura 4. Cromatograma iónico total: whisky W4

Tabla 4. Identificación de compuestos orgánicos volátiles de una muestra de whisky. (n=2)

No. de pico	Tiempo de retención (min)	Compuesto identificado	Prob.	Match	Estructura química	Área	
						1	2
1	9.256	Benzaldehído	41.8	641		413859	710187
2	10.391	Hexanoato de etilo	92.3	927		2070880	3239565
3	13.077	6-heptenoato de etilo	55.3	727		220342	322474
4	13.361	Heptanoato de etilo	43.1	583		312912	437346
5	13.802	Feniletanol	84.5	920		902162	1187895
6	14.123	Octanoato de metilo	80.8	836		108367	181446
7	15.212	2-nonenal	34.5	756		76330	100364
8	15.521	Benzoato de etilo	40.4	785		1612506	1712701

9	15.775	Succinato de dietilo	80.3	785	<chem>CCOC(=O)CC(=O)OCC</chem>	156657	327294
10	15.996	Naftaleno	32.9	794	<chem>C1=CC=C2C=CC=CC2=C1</chem>	106168	225316
11	16.315	Octanoato de etilo	91.9	923	<chem>CCCCCCCCC(=O)OCC</chem>	77815587	99929103
12	17.603	Etanoato de feniletilo	78.3	834	<chem>CCOC(=O)Cc1ccccc1</chem>	283905	358754
13	17.923	Acetato de feniletilo	55.4	953	<chem>CC(=O)OCc1ccccc1</chem>	5518076	6711187
14	19.142	Nonanoato de etilo	63.6	831	<chem>CCCCCCCCC(=O)OCC</chem>	274422	324515
15	21.360	β -damascenona	50.5	901	<chem>CC(=C)C=C(C)C=C(C)C</chem>	1441998	1621141
16	21.747	Decanoato de etilo	89.5	933	<chem>CCCCCCCCC(=O)OCC</chem>	51548642	63497394
17	25.476	Decanoato de isobutilo	63.3	756	<chem>CCCCCCCCC(=O)OC(C)C</chem>	342340	356231
18	26.635	Dodecanoato de etilo	79.1	905	<chem>CCCCCCCCC(=O)OCC</chem>	2446855	617087

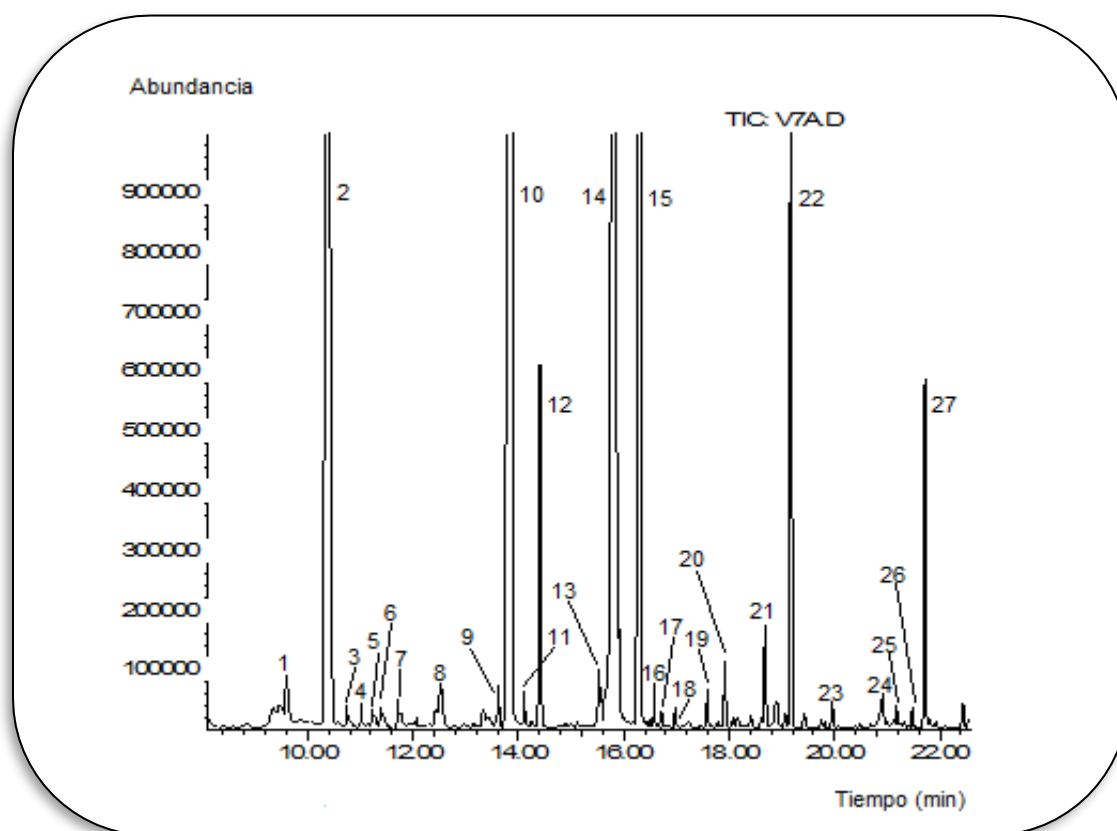













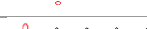


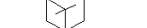






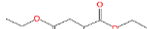
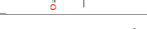
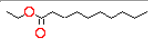
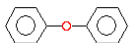


Figura 5. Cromatograma iónico total: vino V7

Tabla 5. Identificación de compuestos orgánicos volátiles de una muestra de vino. (n=2)

No. de pico	Tr	Compuesto identificado	Prob	Match	Estructura química	Área	
						1	2
1	9.480	Heptanol	74.2	834		9982827	9678941
2	10.369	Hexanoato de etilo	90.9	951		15164546	16277380
3	10.759	Acetato de hexilo	65.7	784		979338	1218495
4	11.020	3-etil-4-metilpentanol	56.5	781		1212660	1280834
5	11.285	2-etilhexanol	60.5	815		1285628	1571270
6	11.398	Eucaliptol	43.5	749		1651593	1768738
7	11.732	2-hexenoato de etilo	55.6	709		2283577	2410485
8	12.522	1-octanol	23.4	844		3922640	4404159
9	13.426	Linalol	24.0	701		1112273	1282959
10	13.626	Butanodioato de metiletilo	80.4	768		16921756	17624074
11	14.126	Octanoato de metilo	81.7	835		1046235	983028
12	14.549	Isopinocarveol	42.3	820		854160	763354
13	15.778	Succinato de etilo	97.0	933		202983	177935
14	15.735	Ácido octanoico	95.3	890		66135562	67401376
15	16.188	Salicilato de metilo	65.5	694		117200348	112174341
16	16.381	Octanoato de etilo	89.5	917		306616	310876
17	16.487	Dietilmetilsuccinato	71.4	725		625460	634935
18	16.597	Decanal	59.2	863		560017	561888
19	17.682	Etanoato de feniletilo	64.1	693		1323923	1447234
20	17.952	Acetato de β-feniletilo	49.0	872		2836332	3278006
21	18.608	Pentadenoato de dietilo	80.5	741		421440	435116
22	19.142	Nonanoato de etilo	51.4	686		35140369	34157376
23	19.814	Decanoato de metilo	71.5	824		287809	240370
24	20.970	Ácido decanoico	87.2	880		3015365	3506642
25	21.324	β-damascenona	43.9	660		353298	463214

26	21.718	Decanoato de etilo	85.0	921		1891426	1920312
27	21.929	Difeniléter	59.6	807		13320856	13659438

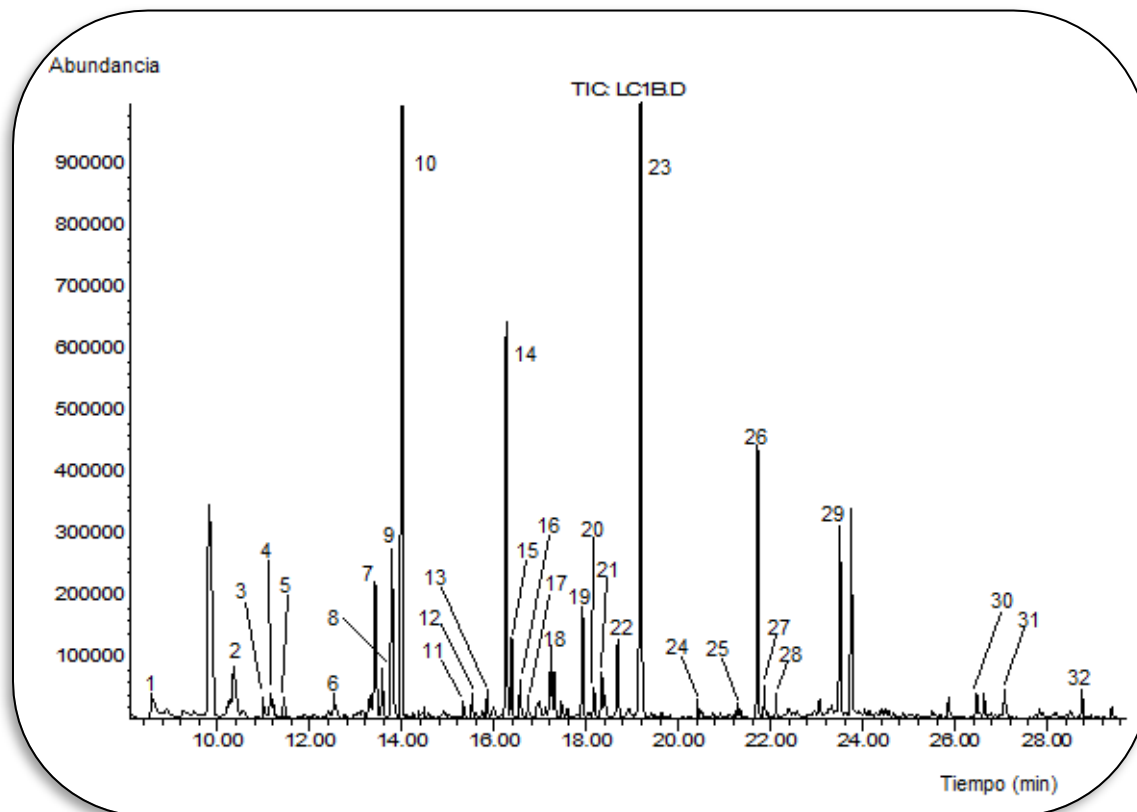

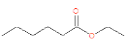
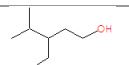
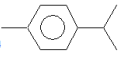
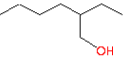


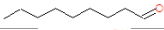




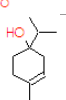


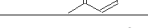
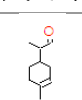
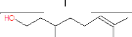
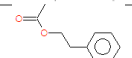


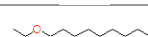

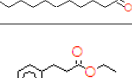


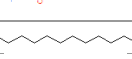
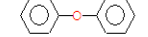
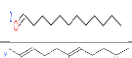





Figura 6. Cromatograma iónico total: licor de caña LCT

Tabla 6. Identificación de compuestos orgánicos volátiles de una muestra de licor de caña. (n=2)

No. de pico	Tr (min)	Compuesto	Prob.	Match	Estructura	Área	
						1	2
1	9.253	Benzaldehído	43.9	724		527801	740902
2	10.343	Hexanoato de etilo	78.2	865		3189595	4724970
3	11.005	3-etil-4-metilpentanol	42.2	784		392058	662281
4	11.122	p-cimeno	11.8	644		1204841	1357480
5	11.284	2-etilhexanol	46.0	735		7859308	7623489

6	12.393	Acetofenona	57.7	766		195996	203349
7	13.412	β -linalol	72.7	916		4480860	7886239
8	13.674	Nonanal	69.6	877		1399071	1879703
9	13.807	Feniletanol	84.8	947		5226205	9588003
10	14.000	α -ciclocitral	77.1	906		97610741	96468545
11	15.529	Benzoato de etilo	65.2	703		674812	665723
12	15.607	isoborneol	31.7	869		160354	290422
13	15.847	4-terpineol	61.5	866		457030	829840
14	16.260	Octanoato de etilo	88.2	872		11148763	12880456
15	16.377	Safranal	15.1	651		933095	3339900
16	16.563	Decanal	66.4	922		1345585	1616221
17	16.979	1-p-menten-9-al	51.9	683		954686	1670703
18	17.112	β -citronelol	34.7	767		289105	471651
19	17.917	Acetato de β -feniletilo	53.9	911		2418697	4672922
20	18.342	Salicilato de etilo	95.9	931		1089428	2124139
21	18.926	Carvacrol	18.5	749		458731	994962
22	19.142	Nonanoato de etilo	62.9	747		113442	195612
23	19.640	Undecanal	30.8	780		92781753	92597545
24	20.495	3-fenilpropanoato de etilo	51.0	691		202754	430083
25	21.617	Decanoato de etilo	87.9	936		11240383	10102044
26	21.866	Tetradecano	34.0	880		28905285	24100729
27	21.942	Difeniléter	55.6	771		144495	280511
28	22.114	Dodecanal	28.1	723		200430	481204
29	23.066	Geranilacetona	43.2	836		711382	1091453
30	26.654	Dodecanoato de etilo	76.8	877		132229	112930
31	27.830	Cubenol	35.4	694		140447	136370
32	28.515	Cadalin	52.0	817		205557	211244

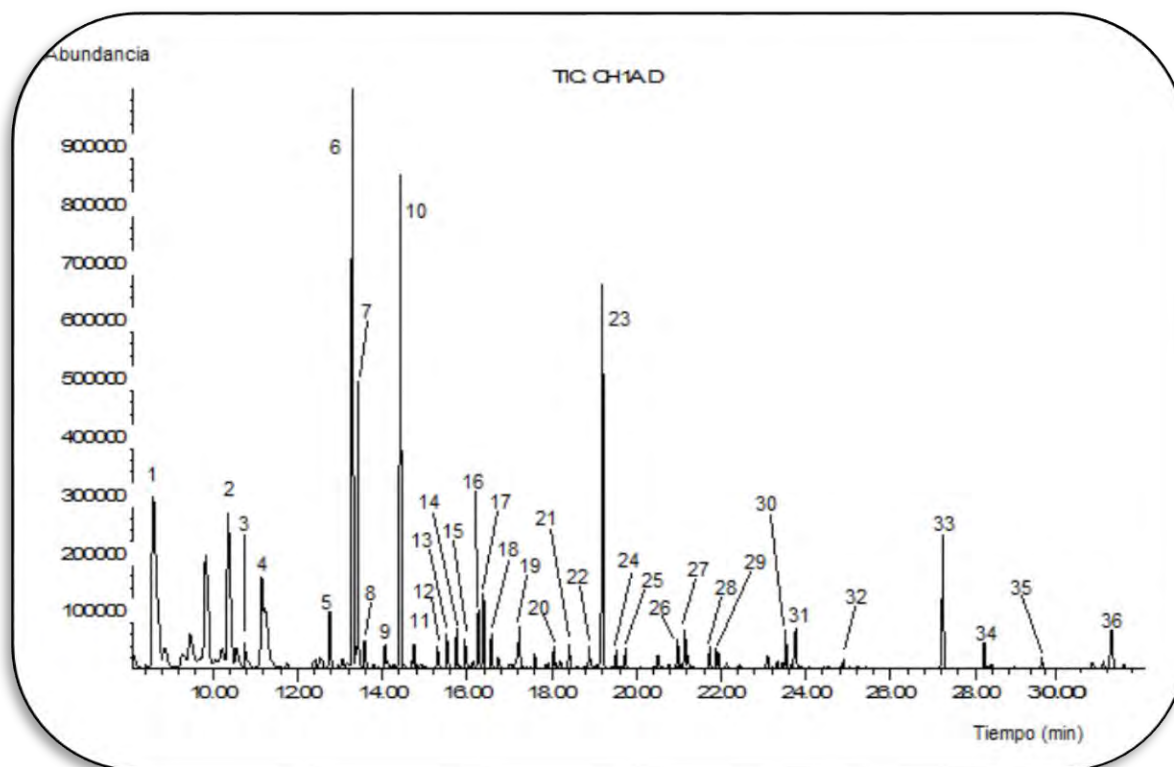
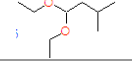
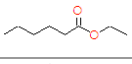
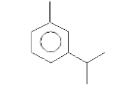
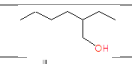
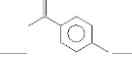
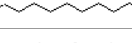
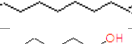
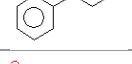
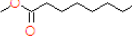
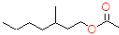





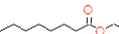





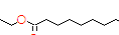

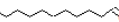

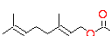


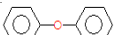
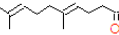
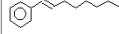
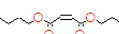


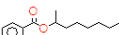
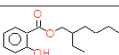


Figura 7. Cromatograma iónico total: charanda CH1

Tabla 7. Identificación de compuestos orgánicos volátiles de una muestra de charanda. (n=2)

No. de pico	Tr (min)	Compuesto identificado	Prob.	Match	Estructura química	Área	
						1	2
1	8.915	1,1-dietoxi-3-metilbutanol	49.6	662		23078748	24567821
2	10.361	Hexanoato de etilo	83.4	839		14825090	13908737
3	11.157	β -cimeno	24.4	912		6991545	8237644
4	11.330	Etilhexanol	69.3	909		6631975	8751012
5	12.951	3-etilestireno	55.8	710		589328	589745
6	13.431	Undecano	27.9	746		23476293	24565210
7	13.585	Nonanal	80.7	913		15587049	16883678
8	13.789	Feniletanol	76.0	760		326351	307751
9	14.128	Octanoato de metilo	72.5	800		320519	443428

10	14.715	Acetato de 3-metilheptilo	63.3	705		21589481	22630372
11	14.908	Alcanfor	28.9	828		351775	367886
12	15.026	4-vinilanisol	48.6	690		193106	204217
13	15.292	Acetato de bencilo	77.5	854		289238	343148
14	15.771	Mentol	11.8	822		397372	296481
15	15.979	Naftaleno	37.8	805		628303	717498
16	16.272	Octanoato de etilo	86.5	891		2669517	2433626
17	16.390	Dodecano	38.0	925		3156092	3337113
18	16.556	Decanal	71.8	925		1422315	1722851
19	17.039	Nonanoato de metilo	54.4	606		413750	498764
20	18.045	4-metildodecano	20.0	699		126203	136134
21	18.203	2-metildodecano	26.3	749		421909	448933
22	19.070	Nonanoato de etilo	51.4	686		140369	157376
23	19.131	2-metilnaftaleno	34.6	969		18545880	18425588
24	19.442	Undecanal	27.4	767		130248	283021
25	19.556	1-metilnaftaleno	41.6	950		324019	341772
26	21.271	Acetato de geraniol	91.3	969		728995	7934120
27	21.731	Decanoato de etilo	76.9	873		828346	725655
28	21.884	Tetradecano	42.1	927		770454	845324
29	21.995	Difeniléter	79.5	853		598610	659074
30	23.087	Geranilacetona	40.3	870		960116	959974
31	23.643	1-octenilbenceno	77.5	754		165840	177632
32	25.219	Maleato de dibutilo	74.8	610		165001	187544
33	27.507	Benzofenona	81.7	900		325945	226851
34	28.214	β -metilionona	51.0	734		105181	137798
35	29.272	Benzoato de 2-etilhexilo	77.8	630		151329	132411
36	31.287	Salicilato de 2-etilhexilo	69.1	843		692345	652541

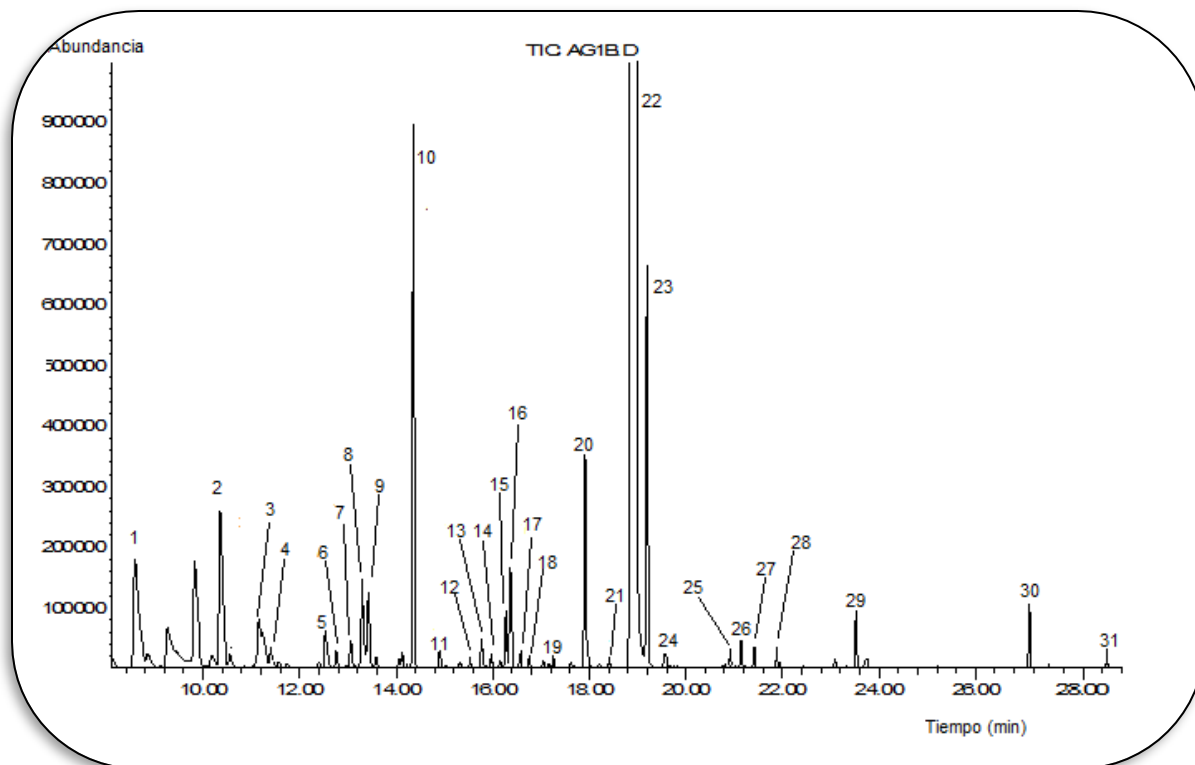

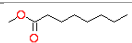







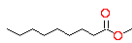





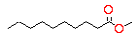


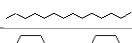

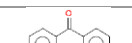

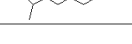


Figura 8. Cromatograma iónico total: aguardiente AG1

Tabla 8. Identificación de compuestos orgánicos volátiles de una muestra de aguardiente. (n=2)

No. de pico	Tiempo de retención (min)	Compuesto identificado	Prob.	Match	Estructura química	Área	
						1	2
1	9.256	Benzaldehído	50.5	742	<chem>O=Cc1ccccc1</chem>	6259164	5218238
2	10.395	Hexanoato de etilo	89.9	927	<chem>CCCCC(=O)OCC</chem>	14992654	13964147
3	11.162	Cimeno	17.5	876	<chem>CC1=CC=C(C=C1)C(C)C</chem>	4606561	3908379
4	11.404	Eucaliptol	52.4	814	<chem>CC12C=CC(OC1)CC2</chem>	1347039	1379865
5	12.535	1-octanol	34.6	895	<chem>CCCCCCCCO</chem>	2469613	2671024
6	13.094	1,1-dietoxihexano	86.4	842	<chem>CCCCCOCC</chem>	1400938	1447265
7	13.152	3,4-dimetilestireno	28.9	645	<chem>CC1=CC=C(C=C1)C(C)C</chem>	1446145	1502520
8	13.426	Linalol	33.4	734	<chem>CC1=CC=C(C=C1)C(C)C</chem>	4207812	4529046

9	13.587	Nonanal	77.4	858		569055	651640
10	14.128	Octanoato de metilo	86.1	879		31786586	32753716
11	14.594	Isopinocarveol	24.5	676		300410	309736
12	14.937	Dureno	32.3	947		333095	314367
13	15.294	Acetato de bencilo	84.2	778		155747	148111
14	15.775	Mentol	14.8	938		118611	128732
15	16.276	Octanoato de etilo	87.4	883		252308	235434
16	16.366	p-Alilanol	68.1	879		8700438	6019239
17	16.567	p-propilanol	62.9	772		1245045	676845
18	17.058	Nonanoato de metilo	71.4	775		313757	284021
19	17.677	Carvona	27.2	516		106887	132687
20	17.917	p-propenilanol	59.2	953		9548019	9743857
21	18.210	2-metildodecano	27.4	627		44309849	45246145
22	18.397	3-metildodecano	37.6	772		24749623	22119523
23	18.863	Estragol	40.5	793		3377015	4074017
24	19.883	Decanoato de metilo	24.9	602		8905725	7130879
25	21.422	p-Acetonilanol	68.3	902		899140	890442
26	21.528	4-decenoato de etilo	53.0	712		499470	669134
27	21.885	Tetradecano	39.8	916		744619	549553
28	21.946	Difenil éter	81.3	809		236635	223788
29	23.766	Dodecanol	89.6	885		908691	738509
30	27.521	Benzofenona	79.4	831		189059	207361
31	28.342	2,6-diisopropilnaftaleno	73.4	764		794582	723049

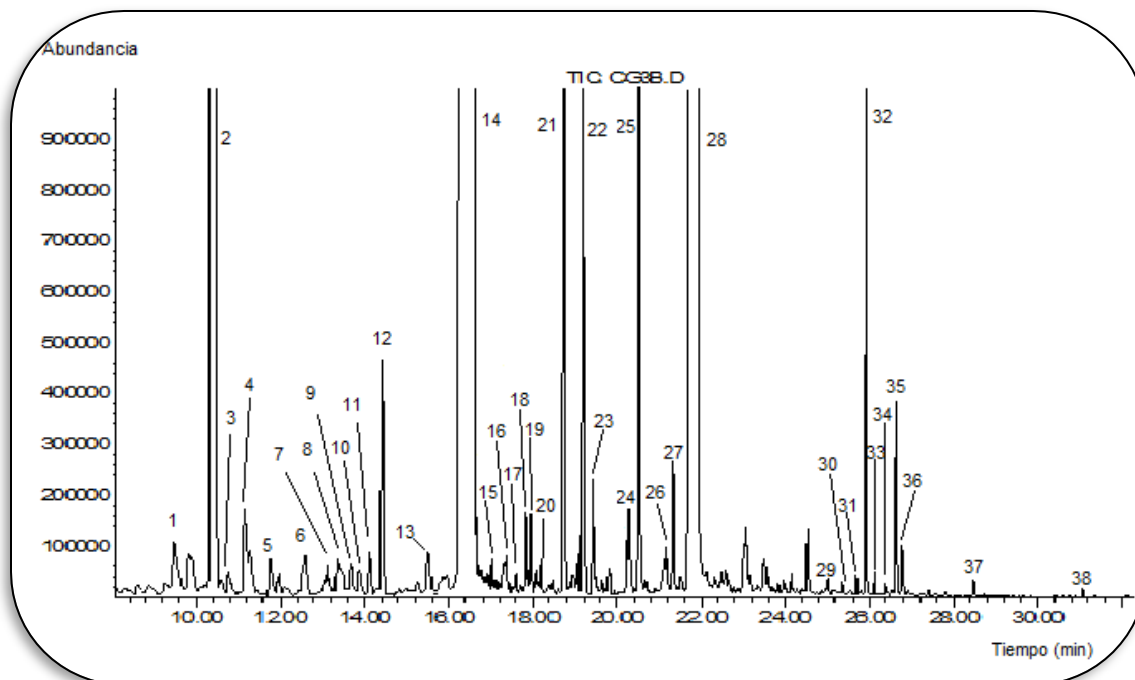


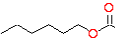


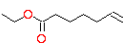
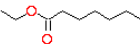


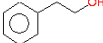
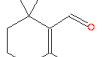
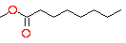
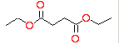
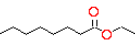
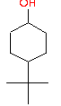

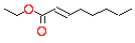
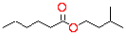
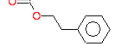
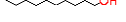
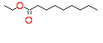
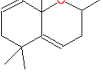

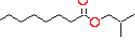
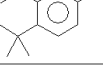
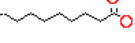
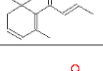


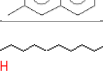
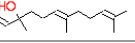
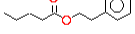

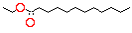

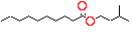

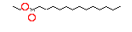


Figura 9. Cromatograma iónico total: coñac CG3

Tabla 9. Identificación de compuestos orgánicos volátiles de una muestra de coñac. (n=2)

No. de pico	Tr (min)	Compuesto identificado	Prob.	Match	Estructura química	Área	
						1	2
1	9.260	Benzaldehído	64.3	854		115933	114270
2	10.404	Hexanoato de etilo	91.4	954		226685446	200221345
3	10.959	Acetato de hexilo	72.3	841		312012	21141
4	11.149	β -cimeno	22.6	892		7247766	8343227
5	11.929	Furoato de etilo	81.2	969		2452030	2135087
6	13.077	6-heptenoato de etilo	60.0	787		1598832	1543789
7	13.348	Heptanoato de etilo	51.5	671		2789517	2671303
8	13.414	Linalol	37.5	703		2106636	2126247

9	13.585	Nonanal	53.2	753		1702222	2907736
10	13.781	Feniletanol	78.2	906		3988721	3043791
11	14.021	β -ciclocitral	35.3	723		845205	995837
12	14.120	Octanoato de metilo	86.7	913		3785897	3845676
13	15.845	Succinato de dietilo	79.6	803		1215295	1203732
14	16.453	Octanoato de etilo	91.7	916		827946520	963759299
15	16.988	4-ter-butilciclohexanol	66.4	805		1692129	1690859
16	17.310	2-borneno	20.7	744		126699	181100
17	17.619	2-octenoato de etilo	39.8	646		444589	681558
18	17.811	Hexanoato de isopentilo	83.5	923		5570328	4137629
19	17.944	Acetato de β -feniletilo	31.0	743		4333953	5082109
20	18.424	1-decanol	19.8	824		3196751	2158428
21	19.182	Nonanoato de etilo	80.9	852		36858662	30203184
22	19.494	Edulan I	56.5	851		10548766	119084565
23	19.820	Decanoato de metilo	80.2	913		3528561	3519096
24	20.458	Octanoato de 2-butilo	46.7	864		2534469	2623432
25	20.700	1,2-dihidro-1,1,6-trimetilnaftaleno	56.7	926		25966481	26349228
26	21.296	Ácido decanoico	85.3	879		182231	194103
27	21.369	β -damascenona	57.8	724		231234	221312
28	21.871	9-decenoato de etilo	40.7	828		404987101	453873702
29	25.479	Decanoato de isobutilo	42.9	795		46620	45863
30	25.527	1,6,7-trimetilnaftaleno	39.9	932		53421	59374
31	25.703	Ácido undecanoico	41.3	860		70349	64908
32	25.865	Nerolidol	41.3	860		139071827	143211959
33	26.399	Pentanoato de 2-feniletilo	25.8	762		7161940	6008845

34	26.653	Dodecanoato de etilo	78.5	901		497662	433645
35	27.522	Benzofenona	52.1	689		231542	267512
36	27.813	Decanoato de isopentilo	86.9	885		356684	355910
37	28.503	Cadalin	63.1	895		137259	130165
38	31.078	Tetradecanoato de etilo	84.7	907		25823	24129

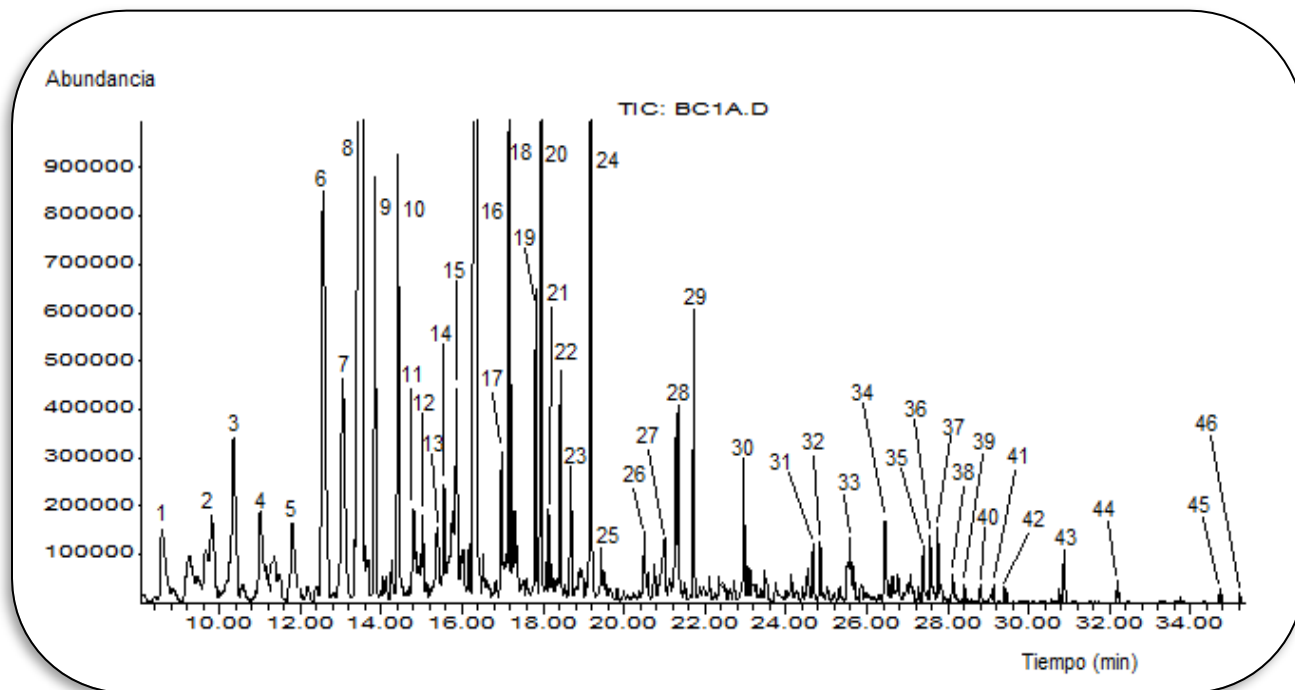
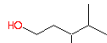

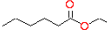



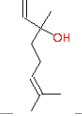









































Figura 10. Cromatograma iónico total: bacanora BC1

Tabla 10. Identificación de compuestos orgánicos volátiles de una muestra de bacanora. (n=2)

No. de pico	Tiempo de retención (min)	Compuesto identificado	Prob.	Match	Estructura química	Área	
						1	2
1	8.405	3,4-dimetil-1-pentanol	43.5	744		673253	712910
2	9.251	Benzaldehido	48.4	738		7894000	11349288
3	10.391	Hexanoato de etilo	78.3	881		24070988	20114967

4	11.024	3-etil-4-metilpentanol	68.4	918		12567071	15261276
5	11.962	o-cresol	32.5	887		10841163	5145042
6	12.393	Acetofenona	27.7	766		21959961	22033439
7	13.468	Linalol	60.7	917		19450576	151286759
8	13.631	Nonanal	26.5	777		29634278	29711268
9	13.855	Feniletanol	87.1	952		14224162	19265029
10	14.021	β -ciclocitral	55.6	792		15754789	15298345
11	14.128	Octanoato de metilo	80.9	858		1461148	1354372
12	14.795	2,5-dimetilfenol	77.9	873		674367	635467
13	15.470	4-etilfenol	20.3	835		1305284	1478404
14	15.564	Nonanol	15.4	807		3726332	3745538
15	15.868	4-terpineol	68.6	839		16720791	16860484
16	16.177	Salicilato de metilo	68.8	725		4292737	4190645
17	16.599	Decanal	74.5	892		892384	873274
18	17.168	β -citronelol	39.2	933		34195338	36351817
19	17.826	3,7-dimetil-2,6-octadien-1ol	42.5	916		17089187	17789856
20	17.953	Acetato de feniletilo	43.0	916		29202529	30064878
21	18.299	Dihidrocarveol	72.1	845		2562433	2612893
22	18.429	1-decanol	18.7	911		1731603	1780902
23	19.139	2-metilnaftaleno	67.5	705		5813376	5872364
24	19.496	Edulan I	52.5	859		1722945	1541880
25	19.556	1-metilnaftaleno	46.3	704		25643670	25423132
26	20.790	Ácido decanoico	78.0	838		9114231	9824257
27	21.271	Acetato de geraniol	36.3	918		9643156	8740430
28	21.339	β -damascenona	49.7	896		11366885	11392779
29	21.725	Decanoato de etilo	86.8	921		9478898	9348084
30	23.170	Acenaftileno	70.1	807		2701691	2513526

31	24.577	Aristolano	67.4	718		564756	542384
32	24.768	4,6,8-trimetilazuleno	47.2	750		305548	317350
33	25.871	Nerolidol	32.3	866		414001	306046
34	26.454	Fluoreno	46.4	770		616241	531686
36	27.295	9H-xanteno	26.5	841		959875	841854
35	27.592	τ-eudesmol	28.4	877		1659677	992358
37	27.754	Butanoato de fenilo	29.7	911		3868423	3905914
38	28.525	Cadalin	49.9	708		809812	876901
39	28.721	Bisabolol	52.8	703		901450	519357
40	28.835	1,4,5,8-trimetilnaftaleno	73.0	858		702341	712383
41	29.052	2-metilfluoreno	23.5	893		419963	297465
42	29.449	4-metil-9Hfluoreno	44.1	905		474338	397693
43	30.897	Fenanteno	27.9	944		2928857	2168838
44	32.199	Nonanoato de 2-feniletilo	73.4	896		547654	598234
45	34.721	Hexadecanoato de metilo	56.4	822		332344	337207
46	35.151	Hexadecanoato de etilo	78.7	903		879384	836578

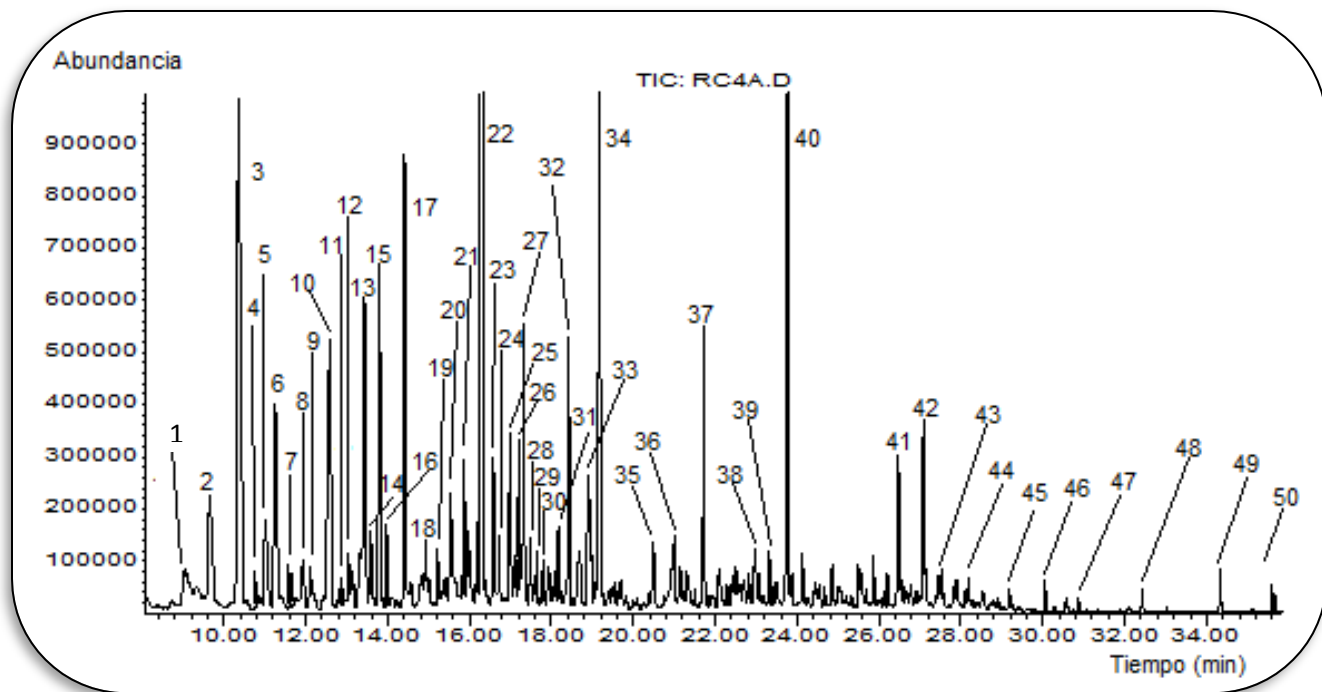








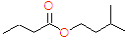
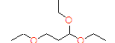
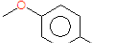
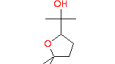
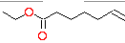
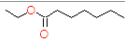
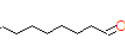
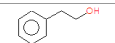
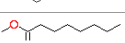
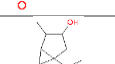
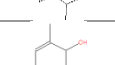
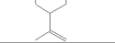

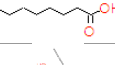
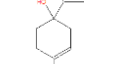
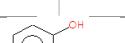
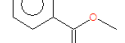

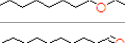
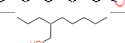

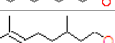
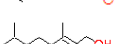
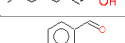
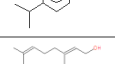
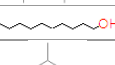
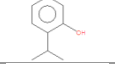

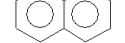
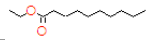
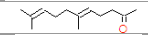

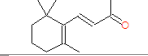
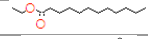
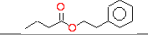
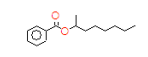
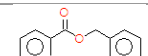
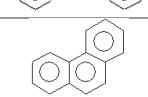
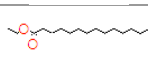
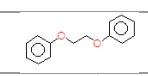
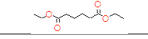
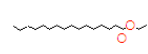


Figura 11. Cromatograma iónico total: raicilla RC4

Tabla 11. Identificación de compuestos orgánicos volátiles de una muestra de raicilla. (n=2)

No. de pico	Tr (min)	Compuesto	Prob.	Match	Estructura química	Área	
						1	2
1	9.189	5-metilfurfural	84.2	866		260920	274303
2	9.501	2,2,6-trimetil-6-viniltetrahidropirano	73.9	734		736452	697845
3	10.390	Hexanoato de etilo	87.2	932		59621188	59219853
4	10.858	1,4-cineol	34.8	743		1466778	1374059
5	11.011	3-etil-4-metilpentanol	71.4	929		9793712	9256145
6	11.251	2-etilhexanol	65.5	937		20160579	19112473
7	11.404	Eucaliptol	31.9	715		1859839	1559332
8	11.923	o-cresol	28.7	809		4493071	4404078

9	12.106	Butanoato de isopentilo	35.5	803		1347595	3764732
10	12.596	1,1,3-trietoxipropano	88.4	795		29725902	33148262
11	12.792	p-guayacol	34.2	805		1549357	1556030
12	13.067	Óxido de linalol	45.6	634		5729834	5081233
13	13.177	6-heptenoato de etilo	74.5	890		2375801	2384923
14	13.345	Heptanoato de etilo	55.0	717		2841653	3993137
15	13.596	Nonanal	44.9	809		6369844	6658885
16	13.802	Feniletanol	85.9	948		22858529	19866392
17	14.129	Octanoato de metilo	77.6	678		544857	576523
18	14.582	Isotujol	63.4	790		320716	309810
19	14.939	Carveol	18.8	690		3347038	3369741
20	15.539	Nonanol	23.9	822		8244032	8272731
21	15.754	Ácido octanoico	59.0	766		5796282	7803294
22	15.899	4-terpineol	54.6	933		9339668	8729715
23	16.169	Salicilato de metilo	75.9	884		15273505	15386066
24	16.312	Octanoato de etilo	73.4	782		5461443	5114412
25	16.581	Decanal	68.5	910		7596760	8545554
26	16.722	2-propilheptanol	29.8	883		3436787	3968018
27	17.059	Nonanoato de metilo	88.2	923		829748	875246
28	17.132	β -citronelol	68.6	924		7406975	7445257
29	17.235	3,7-dimetil-2-octen-1-ol	73.0	679		6938045	635423
30	17.640	p-isopropilbenzaldehido	35.1	877		2847653	2992607
31	17.793	trans-geraniol	50.2	802		2741159	2772732
32	18.427	1-decanol	27.0	911		13987692	15299893
33	18.914	Timol	23.8	721		12530118	15069657
34	19.538	1-metilnaftaleno	21.5	770		41793566	42838721
35	19.714	(2,2-dietoxietil)benceno	62.7	717		2209420	2377701
36	20.492	3-fenilpropanoato de etilo	39.8	691		5013159	5304926
37	21.012	Ácido decanoico	64.7	769		9424673	8352086

38	21.723	Decanoato de etilo	87.1	926		14143547	19079103
39	23.071	Geranilacetona	37.6	867		2458566	2747009
40	23.791	Dodecanol	12.8	931		66939698	64051974
41	26.074	β -ionona	37.5	860		1794546	1977774
42	26.632	Dodecanoato de etilo	64.3	760		2324735	S U
43	27.767	Butanoato de fenilo	47.1	601		456234	464378
44	29.245	Benzoato de 2-etilhexilo	36.1	702		701194	866765
45	30.575	Benzoato de bencilo	82.3	769		1034317	1200704
46	30.874	Fenantreno	27.1	902		719407	863255
47	31.072	Tetradecanoato de etilo	56.7	686		133884	197754
48	31.341	1,2-difenoxietano	46.6	613		151818	208236
49	33.033	Hexadienoato de etilo	55.8	687		231100	402322
50	35.119	Hexadecanoato de etilo	75.9	735		131236	223559

11 BIBLIOGRAFÍA

- [1] Oyarzabál, Iván Saldaña. *Anatomía del mezcal*, 2012. [En línea]. Disponible: <http://www.anatomiadelmezcal.com> [Último acceso: junio 2016].
- [2] R. Clarke. *Química del flavor del vino*, España, ACRIBIA, 2010, pp. 148-183.
- [3] Blugass, Alan J. *Handbook of alcoholic beverages: technical analytical and nutritional aspects. Vol. II*, Republic of Korea, Wiley, 2011, pp. 650-682.
- [4] Pawliszin, Janusz. *Solid phase microextraction: theory and practice*, Canada, Wiley-VCH, 1997, pp. 11-43.
- [5] J. Gromadzka. y. W.Wardencki. *Static headspace sampling and solid-phase microextraction for assessment of edible oils stability*, Chromatographia, vol. 71, pp. 81-86, 2010.
- [6] Paulina Biernacka, Waldemar Wardencki, Beata Plutowska. *Identification of Volatile Compounds in Raw Spirits of Different Organoleptic Quality*, Journal of the Institute of Brewing, vol. 116, n° 4, pp. 433-439, October, 2010.
- [7] Araceli Peña Álvarez, Guadalupe Medina Valtierra. *Identification and Quantification of Aldehydes in Mezcal by Solid Phase Microextraction with On-fiber Derivatization – Gas Chromatography*, Journal of Mexican Chemical Society, vol. 5, n° 2, pp. 84-88, 2011.
- [8] Antonio De León-Rodríguez, Pilar Escalante-Minakata. *Characterization of Volatile Compounds from Ethnic Agave Alcoholic Beverages by Gas Chromatography-Mass Spectrometry*, Food Technology and Biotechnology, vol. 46, n° 4, pp. 448-455, 2008.
- [9] Cirlini, M., Caligiani, A., Palla, L. y Palla, G. *HS-SPME/GC-MS and chemometrics for the classification of balsamic vinegars of Modena of different maturation and ageing*, Food Chem, vol. 124, pp. 1678-1683, 2011.
- [10] Iglesias, J., Gallardo, J. M. y Medina. *Determination of carbonyl compounds in fish species samples with solid-phase microextraction with on-fibre derivatization*, Food Chem, vol. 123, pp. 771-778, 2010.
- [11] Secretaria de economía. NOM-142-SSA1/SCFI-2014, *Norma Oficial Mexicana Bebidas alcohólicas. Especificaciones sanitarias. Etiquetado sanitario y comercial*.

- [12] Secretaria de economía. PROY-NOM-199-SCFI-2015, *Proyecto de Norma Oficial Mexicana. Bebidas alcohólicas-Denominación, especificaciones fisicoquímicas, información comercial y métodos de prueba.*
- [13] Garibay, Mariano García. *Bioteología alimentaria*, México, LIMUSA, 2000, pp. 263-266.
- [14] Hernández, Alicia. *Microbiología industrial*, Costa Rica, EUNED, 2003, pp. 109-112
- [15] Gil, Ángel. *Tratado de nutrición*, tomo II, de *Composición y calidad nutritiva de los alimentos*, Madrid, Médica Panamericana, 2010, pp. 293-298.
- [16] Torres, José Hidalgo. *Tratado de enología, tomo I*, España, Mundi-Prensa, 2011, pp. 576-580.
- [17] Simunovic, Estay Yerko. *Manual de bebidass alcohólicas y vinagres*, Chile, Ministerio de Agricultura Servicio Agrícola y Ganadero, 1999, pp. 13-20.
- [18] Orozco, Julia Muñoz de Cote. *Las bebidas alcohólicas en la historia de la humanidad, Ciencia y cultura AAPAUNAM*, vol. 2, nº Especial, pp. 50-53, 2010.
- [19] Secretaria de economía. NOM-070-SCFI-1994, *Norma Oficial Mexicana, Bebidas alcohólicas-Mezcal-Especificaciones.*
- [20] Harris, Daniel C. *Análisis químico cuantitativo*, Barcelona, Reverté, 2001, pp. 655-683.
- [21] Katja Dettmer-Wilde, Werner Engewald. *Practical Gas Chromatography*, New York, Springer, 2014, pp. 7-10.
- [22] Mc. Nair, Harold. *Cromatografía de gases*, Washington D.C, Secretaria General de la Organización de los Estados Americanos, 1981, pp. 3-15.
- [23] Mc. Nair, Harold. *Cromatografía de gases*, Washington D.C, Secretaria General de la Organización de los Estados Americanos, 1981, pp. 3-15.
- [24] Christian, Gary D. *Química Analítica*, México, Mc Graw Hill, 2009, pp. 585-599.
- [25] Satinder, Ahuja. *Chromatography and separation science*, USA, Academic Press, 2003, pp. 34-36.
- [26] Reyes, David. *Determinación de los principales compuestos orgánicos del mezcal por cromatografía de gases capilar espectrometría de masas*, Tesis Licenciatura, México D,F, Facultad de Química, UNAM, 2006.

- [27] Miller, J.N. y Miller, J.C. *Estadística y Quimiometría para Química Analítica*. Ed. Pearson Educación, S.A. Madrid, 2002.
- [28] Gallego, Roque Serrano. *Introducción al análisis de datos experimentales: tratamiendo de datos en bioensayos*, Publicaciones de la Universitat Jaume, 2003, pp. 78-96.
- [29] Software para análisis de componentes principales, «XLSTAT,» [En línea]. Disponible <https://www.xlstat.com/en/solutions/features/principal-component-analysis-pca>. [Último acceso: Junio 2016].
- [30] J. A. Molina-Guerrero, J. E. Botello-Álvarez, A. Estrada-Baltazar. *Compuestos volátiles en mezcal*, Revista Mexicana de Ingeniería Química, vol. 6, nº 1, pp. 41-50, 2007.
- [31] Medina Valtierra, María Guadalupe. Cuantificación de alcoholes y aldehídos en mezcal por cromatografía de gases y microextracción en fase sólida seguido de cromatografía de gases, Tesis Licenciatura, México D.F, Facultad de Química, UNAM 2008.
- [32] Secretaria de economia. NOM-006-SCFI-2012, *Norma Oficial Mexicana, Bebidas alcohólicas-Tequila-Especificaciones*.
- [33] Secretaria de economia. NOM-168-SCFI-2004, *Norma Oficial Mexicana. Bebidas alcohólicas-Bacanora-Especificaciones de elaboración: envasado y etiquetado*.
- [34] Judith F. Rubinson, Kenneth A. Rubinson. *Química Analítica Contemporánea*, México, Prentice Hall, 2000, pp. 436-441.
- [35] I. Jolliffe, *Principal component analysis*, England: Springer Science, 2001.