



UNIVERSIDAD AUTONOMA CHAPINGO
DEPARTAMENTO DE FITOTECNIA
INSTITUTO DE HORTICULTURA

PERFIL FITOQUÍMICO DEL ACEITE ESENCIAL
DEL FRUTO DE TEJOCOTE MEXICANO
(*Crataegus* spp.)

TESIS

QUE COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL
GRADO DE:
MAESTRA EN CIENCIAS EN BIOTECNOLOGIA
AGRICOLA

PRESENTA:

MARÍA DOLORES PÉREZ LAINEZ



DIRECCION GENERAL ACADEMICA
DEPTO. DE SERVICIOS ESCOLARES
OFICINA DE EXAMENES PROFESIONALES

CHAPINGO, ESTADO DE MÉXICO, 2014.



La presente tesis titulada “**Perfil fitoquímico del aceite esencial del fruto de tejocote mexicano (Crataegus spp.)**” realizada por la alumna **María Dolores Pérez Lainez** bajo la dirección del Comité Asesor indicado, ha sido aprobada por el mismo y aceptada como requisito parcial para obtener el grado de:

MAESTRA EN CIENCIAS EN
BIOTECNOLOGIA AGRÍCOLA

Presidente:


Dra. María del Rosario García Mateos

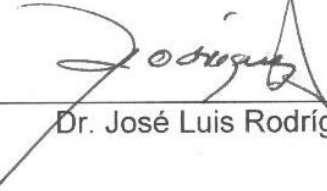
Asesor:


Dr. Ramón Marcos Soto Hernández

Asesor:


Dr. Raúl Nieto Ángel

Asesor:


Dr. José Luis Rodríguez de la O.

Chapingo, estado de México, mayo de 2014.

CONTENIDO

I. INTRODUCCIÓN	1
II. OBJETIVOS.....	3
III. HIPÓTESIS	4
IV. REVISIÓN DE LITERATURA	5
3.1 <i>Crataegus</i> spp.	5
3.1.1. Descripción botánica.....	6
3.1.2. Origen y distribución	9
3.1.3. Hábitat	10
3.1.4. Usos	10
3.1.5. Composición química.....	11
3.2 ACEITES ESENCIALES	14
3.2.1. Clasificación de aceites esenciales.....	16
3.2.2. Distribución y estado natural	18
3.2.3. Propiedades físico-químicas	21
3.2.4. Composición química.....	22
3.2.5. Biosíntesis de componentes volátiles del aroma en frutos	24
3.2.6. Algunos efectos biológicos en organismos	26

3.2.7. Modo de acción	27
3.2.8. Extracción de los aceites esenciales.....	29
V. MATERIALES Y MÉTODOS.....	34
4.1 MATERIAL VEGETAL	34
4.2 EXTRACCIÓN DEL ACEITE	35
4.3 IDENTIFICACIÓN PREELIMINAR DEL ACEITE ESENCIAL	37
4.4 CUANTIFICACIÓN E IDENTIFICACIÓN DEL ACEITE ESENCIAL.....	37
VI. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	40
5.1 . RENDIMIENTO DEL ACEITE ESENCIAL EN CADA ACCESIÓN.....	40
5.2 IDENTIFICACIÓN PREELIMINAR DE ACEITES ESENCIALES	43
5.3 IDENTIFICACIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE ACEITES ESENCIALES POR CROMATOGRAFÍA DE GASES	44
VII. CONCLUSIONES	72
VIII.BIBLIOGRAFÍA	73
IX. ANEXOS	86

ÍNDICE DE CUADROS

Cuadro 1. Principales componentes fitoquímicos mencionados por Edwards <i>et al.</i> (2012).....	12
Cuadro 2. Partes de la planta utilizadas en la obtención de aceite esencial.....	19
Cuadro 3. Propiedades de compuestos de los aceites esenciales de acuerdo a su grupo funcional.....	22
Cuadro 4. Métodos para la extracción de aceites esenciales	30
Cuadro 5. Identificación del material vegetal utilizado.	35
Cuadro 6. Rendimiento del aceite esencial de 11 accesiones de <i>Crataegus</i> spp..	40
Cuadro 7. Componentes del aceite esencial de <i>Crataegus</i> spp.	46
Cuadro 7. Continuación. Componentes del aceite esencial de <i>Crataegus</i> spp.	47
Cuadro 8: Características químicas de los componentes identificados en el aceite esencial de <i>Crataegus</i> spp.	48
Cuadro 8: Continuación. Características químicas de los componentes identificados en el aceite esencial de <i>Crataegus</i> spp.	49
Cuadro 8: Continuación. Características químicas de los componentes identificados en el aceite esencial de <i>Crataegus</i> spp.	50
Cuadro 8: Continuación. Características químicas de los componentes identificados en el aceite esencial de <i>Crataegus</i> spp.	51

Cuadro 8: Continuación. Características químicas de los componentes identificados en el aceite esencial de <i>Crataegus</i> spp.	52
Cuadro 9. Componentes del aceite esencial de tejocote agrupados por su funcionalidad química.	53
Cuadro 10. Componentes del aceite esencial de <i>Crataegus mexicana</i> (ACC86)..	55
Cuadro 11: Compuestos identificados en las accesiones de estudio.	57
Cuadro 11: Continuación. Compuestos identificados en las accesiones de estudio.	58
Cuadro 12. Componentes en común entre las especies de estudio y su cantidad relativa expresada en porcentaje.	60
Cuadro 12. Continuación. Componentes en común entre las especies de estudio y su cantidad relativa expresada en porcentaje.	61
Cuadro 12. Continuación. Componentes en común entre las especies de estudio y su cantidad relativa expresada en porcentaje.	62
Cuadro 13. Compuestos volátiles identificados en <i>Crataegus</i> spp. y presentes en otras especies vegetales.	67
Cuadro 13. Continuación. Compuestos volátiles identificados en <i>Crataegus</i> spp. y presentes en otras especies vegetales.	68
Cuadro 13. Continuación. Compuestos volátiles identificados en <i>Crataegus</i> spp. y presentes en otras especies vegetales.	69

Cuadro 13. Continuación. Compuestos volátiles identificados en *Crataegus* spp.
y presentes en otras especies vegetales.70

Cuadro 13. Continuación. Compuestos volátiles identificados en *Crataegus* spp.
y presentes en otras especies vegetales.71

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Árbol de tejocote	6
Figura 2. Flor del árbol de tejocote.	7
Figura 3. Fruto del árbol de tejocote	8
Figura 4. Algunas propiedades de los aceites esenciales.	15
Figura 5. Factores que intervienen en la emisión de los aceites esenciales.....	20
Figura 6. Rutas biosintéticas para la síntesis de compuestos volátiles en plantas (--- varios pasos). Fuente: Marín-Loaiza y Céspedes (2007).	26
Figura 7. Equipo de hidrodestilación.....	36
Figura 8. Cromatógrafo de gases acoplado a detector de masas (CG-EM).	38
Figura 9. Material de estudio.	42
Figura 10. Aceites esenciales en Cromatografía en Capa Fina.	43
Figura 11: Cromatograma del aceite esencial de <i>Crataegus mexicana</i> (ACC86)..	54
Figura 12: Comparación de espectros de masas del ácido hexanoico presente en la ACC86: A) espectro obtenido del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro obtenido de la biblioteca NIST02.	56

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO 1. Cromatograma del aceite esencial de <i>Crataegus mexicana</i> (ACC86)..	86
ANEXO 2. Componentes del aceite esencial de <i>Crataegus mexicana</i> (ACC86)..	87
ANEXO 3: Comparación de espectros de masas del ácido hexanoico, componente principal del aceite esencial de la ACC86: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.....	88
ANEXO 4. Cromatograma del aceite esencial de <i>Crataegus mexicana</i> (ACC100).....	89
ANEXO 5. Componentes del aceite esencial de <i>Crataegus mexicana</i> (100).....	90
ANEXO 6: Comparación de espectros de masas del 5-etildihidro -2(3H) – furanona componente principal del aceite esencial de la ACC100: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02..	91
ANEXO 7. Cromatograma del aceite esencial de <i>Crataegus aurescens</i> (ACC15).....	92
ANEXO 8. Componentes del aceite esencial de <i>Crataegus aurescens</i> (ACC15)..	93
ANEXO 9: Comparación de espectros de masas del ácido heptanoico componente principal del aceite esencial de la ACC15: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.....	94
ANEXO 10. Cromatograma del aceite esencial de <i>Crataegus boroussana</i> (ACC72).....	95

ANEXO 11. Componentes del aceite esencial de <i>Crategus Boroussana</i> (ACC72).....	96
ANEXO 12: Comparación de espectros de masas del ácido hexanoico componente principal del aceite esencial de la ACC72: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.....	97
ANEXO 13. Cromatograma del aceite esencial de <i>Crataegus sulfured</i> (ACC04). .	98
ANEXO 14. Componentes del aceite esencial de <i>Crategus sulfured</i> (ACC04).....	99
ANEXO 15: Comparación de espectros de masas del ácido hexanoico componente principal del aceite esencial de la ACC04: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.....	100
ANEXO 16. Cromatograma del aceite esencial de <i>Crataegus mexicana</i> (ACC55).....	101
ANEXO 17. Componentes del aceite esencial de <i>Crataegus mexicana</i> (ACC55).	102
ANEXO 18: Comparación de espectros de masas del ácido 2,2-dimetil-3-2propenil ciclopropancarboxílico, (reportado como No Identificado debido a su bajo porcentaje de identidad) componente principal del aceite esencial de la ACC55: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.....	104
ANEXO 19. Cromatograma del aceite esencial de <i>Crataegus mexicana greggiana</i> (ACC50).....	105
ANEXO 20. Componentes del aceite esencial de <i>Crataegus mexicana</i> (ACC50).	106

ANEXO 20. Continuación. Componentes del aceite esencial de <i>Crataegus mexicana</i> (ACC50).....	107
ANEXO 21: Comparación de espectros de masas del etilfosfonofluoridato 2-ciclohexiletil (reportado como No Identificado debido a su bajo porcentaje de identidad) componente principal del aceite esencial de la ACC50: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.	108
ANEXO 22. Cromatograma del aceite esencial de <i>Crataegus gracillior</i> (ACC26).	109
ANEXO 23. Componentes del aceite esencial de <i>Crataegus gracillior</i> (ACC26).	110
ANEXO 23. Continuación. Componentes del aceite esencial de <i>Crataegus gracillior</i> (ACC26).....	111
ANEXO 24: Comparación de espectros de masas del etilfosfonofluoridato 2-ciclohexiletil (reportado como No Identificado debido a su bajo porcentaje de identidad) componente principal del aceite esencial de la ACC26: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.	112
ANEXO 25. Cromatograma del aceite esencial de <i>Crataegus rosei</i> (ATEX05). ..	113
ANEXO 26. Componentes del aceite esencial de <i>Crataegus rosei</i> (ATEX05).....	114
ANEXO 27: Comparación de espectros de masas del ácido hexanoico, componente principal del aceite esencial de la ATEX05: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.....	115
ANEXO 28. Cromatograma del aceite esencial de <i>Crataegus aurescens</i> (ATEX02).	116

ANEXO 29. Componentes del aceite esencial de <i>Crataegus mexicana</i> (ATEX02).	117
ANEXO 30: Comparación de espectros de masas del ácido hexanoico componente principal del aceite esencial de la ATEX02: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.....	118
ANEXO 31. Cromatograma del aceite esencial de <i>Crataegus mexicana</i> sp.....	119
ANEXO 32. Componentes del aceite esencial de <i>Crataegus</i> sp.....	120
ANEXO 33: Comparación de espectros de masas del ácido hexanoico, componente secundario del aceite esencial de la ATEX06: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.....	121

PERFIL FITOQUÍMICO DEL ACEITE ESENCIAL DEL FRUTO DE TEJOCOTE MEXICANO (*Crataegus* spp.)

María Dolores **Pérez Lainez**¹ y María del Rosario **García Mateos**²

RESUMEN

Los aceites esenciales son sustancias responsables del aroma de las plantas, tienen importantes funciones: atrayentes de polinizadores, protección contra herbívoros y alelopáticos. Presentan numerosas propiedades terapéuticas (antisépticas, antibacterianas, entre otras). En México no se encuentra documentado el perfil de fitoquímicos presentes en el aceite esencial de flores y frutos de tejocote. En el presente estudio se obtuvo por hidrodestilación el aceite esencial del fruto de 11 accesiones de tejocote mexicano. El rendimiento promedio fue de 0.00073 %. Se identificaron 52 componentes por CG-EM, destacan principalmente ésteres (21 %), terpenos (15 %) y ácidos orgánicos (13 %). Los ácidos hexanoico, heptanoico, octanoico y nonanoico son los metabolitos de mayor abundancia en ocho de accesiones (86, 100, 15, 72, 04, ATEX02, ATEX05 y ATEX06) de estudio. No se encontró una relación del perfil de componentes del aceite esencial con el origen de las muestras, ni con color y ni tamaño del fruto.

Palabras clave: Hidrodestilación, *Crataegus* spp., componentes volátiles, tejocote mexicano.

¹ Tesista

² Director

PHYTOCHEMICAL PROFILE OF AN ESSENTIAL OIL EXTRACTED FROM FRUITS OF MEXICAN TEJOCOTE (*Crataegus* spp.)

María Dolores **Pérez Lainez**¹ y María del Rosario **García Mateos**²

ABSTRACT

Essential oils are the substances that are responsible to the fragrance of plants, and they perform other important functions, attracting pollinators, protecting plants from herbivores and allelopathy. Essential oils present important therapeutic properties (antiseptic, antibacterial, among others). In Mexico there are no available data regarding the phytochemical profile of fruit and flowers from tejocote. In the present study, we obtained the essential oil using hydrodistillation from fruits of 11 accessions of Mexican tejocote. The average output of this process was 0.00073 %. We identified 52 components using GC-MS, outstanding esters (21 %), terpenes (15 %) and organic acids (13 %). Hexanoic, heptanoic, octanoic and nonanoic acids are the most abundant metabolites in eight of the eleven studied accessions (86, 100, 15, 72, 04, ATEX01, ATEX05 and ATEX06). We could not find any relation between the component profile identified and the origin of the samples analysed, nor with the color or the size of the fruit.

Index words: Hydrodistillation, *Crataegus* spp., volatile components, Mexican tejocote.

¹ Tesista

² Director

I. INTRODUCCIÓN

El género *Crataegus* agrupa alrededor de 150 especies en todo el mundo, se encuentra en regiones templadas de Asia, Europa y Norte América, 95 de ellas se encuentran en el continente Americano, 13 de ellas se consideran originarias de México (Phipps, 1997). El nombre común que reciben las especies de *Crataegus* en México es “tejocote”, nombre que deriva del Náhuatl “*texócotl*”, que significa fruta dura y agria (Patrick Barry, citado por Tukey, 1964), al cual se le atribuyen propiedades medicinales desde tiempos prehispánicos, siendo usado en la medicina tradicional, para el tratamiento de varias enfermedades respiratorias, como: gripe, tos, asma, bronquitis, etc. (Arrieta *et al.*, 2010).

Algunos países de Europa y Asia han desarrollado una actividad económica creciente debido a las propiedades medicinales que presentan diferentes especies de tejocote. Los estudios químicos existentes se han enfocado principalmente en especies nativas de Asia, Europa y América del Norte donde se han localizado una gran cantidad de componentes como: flavonoides, ácidos hidroxinámicos, azúcares, ácidos orgánicos o fenólicos, terpenos y aceites esenciales (Edwards *et al.*, 2012). Sin embargo, aunque en México existe amplia diversidad y variabilidad genotípica de este frutal, pocos estudios se han realizado sobre su calidad nutracéutica y presencia de bioactivos responsables de las propiedades medicinales que se le atribuyen. Algunos autores (Chang *et al.*, 2002; Cui *et al.*, 2006; Dinesh *et al.*, 2012; García *et al.*, 2013a; 2013b) consideran que las

propiedades medicinales son atribuidas a la presencia de fenoles y flavonoides, sin embargo no se puede pasar por alto la sinergia de los diversos compuestos presentes en el tejocote, incluidos los aceites esenciales.

Los aceites esenciales son sustancias responsables del aroma de las plantas, generan diversos aromas agradables y perceptibles al ser humano, tienen importantes funciones ecológicas como atrayentes de polinizadores y dispersores de semillas y polen, protección contra herbívoros y alelopatía (Marín-Loaiza y Céspedes, 2007). En la actualidad, se conocen aproximadamente 3 000 aceites esenciales, 300 de las cuales son comercialmente importantes, especialmente para la industria farmacéutica, agronómica, alimentaria, sanitaria, cosmética y perfumería, por ello, se requieren más estudios que permitan la identificación nuevos compuestos que sustenten los efectos farmacológicos atribuidos (Martínez, 1967 y Ody, 1993).

La presente investigación tuvo como finalidad extraer el aceite esencial y conocer el perfil de aceites esenciales del fruto de 11 accesiones (ACC) de tejocote, seleccionadas de 93 accesiones que han sido caracterizadas morfológica y morfométricamente en un dendrograma de cinco grupos (Nieto, 2007), las cuales se encuentran en el Banco de Germoplasma de Tejocote de la Universidad Autónoma Chapingo.

II. OBJETIVOS

2.1. GENERAL

Identificar y cuantificar los componentes presentes en el aceite esencial obtenido del fruto tejocote de once accesiones seleccionadas de los grupos del dendograma, resultado de la caracterización morfológica y morfométrica de 93 accesiones.

2.2. PARTICULAR

Cuantificar el contenido de aceites esenciales o volátiles de las once accesiones de frutos de tejocote.

Identificar el perfil de componentes en el aceite esencial por Cromatografía de Gases y Espectrometría de Masas (CG-EM) en los frutos de once accesiones de tejocote del Banco de Germoplasma de Tejocote de la Universidad Autónoma Chapingo.

III. HIPÓTESIS

HIPÓTESIS NULA

El perfil fitoquímico obtenido del aceite esencial de tejocote (*Crataegus* spp.) será diferente para cada una de las accesiones de estudio en rendimiento total, rendimiento por componente y número de componentes principales.

HIPÓTESIS ALTERNATIVA

El perfil fitoquímico obtenido del aceite esencial de tejocote (*Crataegus* spp.) será similar para cada una de las accesiones de estudio en rendimiento total, rendimiento por componente y número de componentes principales.

IV. REVISIÓN DE LITERATURA

3.1 *Crataegus* spp.

Familia: Rosacea

Subtribu: *Pyrinae*

Subfamilia: Maloideae

Género: *Crataegus*

Nombre común: tejocote, manzanita.

En México, el nombre más común con el que se les conoce a las especies del género *Crataegus* es el de “Tejocote” que se deriva del vocablo náhuatl “*Texocotl*” que significa fruta ácida y dura (Patrick Barry, citado por Tukey, 1964), sin embargo en los diferentes estados donde se produce recibe nombres como: Beloui (lengua zapoteca) - Oaxaca; caiasa, carasu (lengua tarasca) - Michoacán; el-pate-shima-lo (lengua chontal) - Oaxaca; manzanilla, manzanita - Ario de Rosales, Mich.; pedyi (lengua mazahua) - México; tejocote - mesa central; pelo-uij, yaga-be-lohui (lengua zapoteca) – Oaxaca (Martínez, 1979).

Desde épocas prehispánicas el tejocote ha sido utilizado por distintos grupos indígenas en México los cuales recolectaban sus frutos y árboles de este tipo fueron plantados en solares de los pueblos indígenas, el fruto era utilizado como alimento humano; posteriormente fue objeto de una actividad frutícola organizada

(Patrick Barry, citado por Tukey, 1964). En la actualidad, el tejocote está fuertemente ligado a la cultura tradicional mexicana; es usado principalmente en festividades como el día de muertos donde lo utilizan en la decoración de los altares y en las fiestas navideñas en la elaboración del tradicional ponche de navidad y dentro de las piñatas (Nieto y Borys, 1991).

La importancia del tejocote radica en su uso potencial como fruta fresca, portainjerto de otros frutales, forraje, fuente de pectina, ornamental, medicinal (Nieto y Borys, 1993), y su uso en la preparación de licores tradicionales y conservas.

3.1.1. Descripción botánica

- Forma. Árbol o arbusto caducifolio, a menudo provisto de espinas. Se desarrolla dependiendo de las condiciones en donde se encuentra (Figura 1). Existen árboles muy desarrollados que tienen un solo tronco, pero también existen árboles en forma de arbustos que presentan varias ramas desde el suelo (Nieto, 2007).



Figura 1. Árbol de tejocote

- Copa / Hojas. Copa ovoide extendida, sombra densa. El género *Crataegus* presenta una gran diversidad de formas, en el borde, largo y ancho de la

lámina, así como el tipo de ápice (Sánchez, 1974). Hojas simples, alternas, romboides-elípticas u ovadolanceoladas, agudas, margen aserrado, en forma irregular; haz verde oscuro y glabro; envés más pálido, y a veces pubescente. Las hojas del tejocote presentan una gran particularidad, las hojas de los brotes vegetativos son diferentes a la de los brotes reproductivos. En el caso de brotes fructíferos largos, la superficie de cada una de las hojas disminuye conforme estas se distancian de los frutos (Delgado *et al.*, 1984).

- Corteza. Corteza color gris rojiza, se desprende en tiras (Nieto y Borys, 1992).

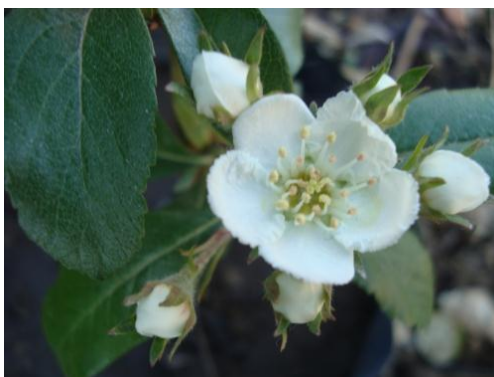


Figura 2. Flor del árbol de tejocote.

- Flor(es). Se producen en racimos terminales de forma corimbosa o cimosa. Hipantio en forma de copa o campanulado, adherido al ovario (Figura 2). Cinco sépalos enteros o dentados. Cinco pétalos, blancos o rosados, expandidos, insertados sobre el margen del disco en el cuello del hipantio. Estambres que varían en número de 5 a 25, en series de una a tres, insertados sobre el margen del hipantio, con los filamentos dilatados en la base y las anteras dorsifijas y acorazonados, oblongas, subglobosas, blancas, rosas o púrpuras.

Ovario ínfero, de uno a cinco carpelos unidos al eje floral, formando un cuerpo algo hundido en el ápice. Presenta cinco cavidades, con dos óvulos ascendentes en cada una y cinco estilos terminados en cabezuela (Sánchez, 1974).

- Fruto(s). La forma del fruto es redonda, aunque existen otras variantes, periforme, elipsoide, pentagonal y oval (Borys y Vega-Cuen, 1984). Diámetro ecuatorial de 5 a 59mm y diámetro polar de 5 a 48 mm. La epidermis es homogénea, de color amarillo, anaranjado a rojo oscuro o chapeado con rojo de variable tonalidad e intensidad (Nieto y borys, 1992).



Figura 3. Fruto del árbol de tejocote

- Semilla(s). Las semillas están rodeadas por un endocarpo o hueso leñoso; son de color café, lisas. El valor máximo de semillas por fruto es 4.40 semillas y el mínimo de 2.10 semillas (Nieto *et al.*, 2009).

- Raíz. Predomina el sistema radical de tipo pivotante y profundo, aunque también hay sistemas radicales con crecimiento horizontal (Nieto y Borys, 1992).
- Sexualidad. Hermafrodita.

3.1.2. Origen y distribución

El tejocote pertenece al género *Crataegus*, el cual agrupa alrededor de 150 especies en todo el mundo, de las cuales 95 de ellas se encuentran en el continente Americano, 13 de las cuales se reconocen que existen en México, algunas endémicas (Phipps, 1997). Especies de *Crataegus* se distribuyen en todo el mundo, incluyendo Europa, Medio Oriente, el Este Asia, América del Norte, pero sólo en el Hemisferio Norte con los puntos atípicos en Perú y Ecuador (Phipps, 1997; Phipps *et al.*, 2003).

En México, el tejocote se encuentra distribuido en las zonas montañosas de la Sierra Madre Oriental (Coahuila, Nuevo León, Tamaulipas, San Luis Potosí e Hidalgo), Sierra Madre Occidental (Durango y Chihuahua), la Sierra Madre del Sur (Oaxaca y los Altos de Chiapas), y el Eje Neo volcánico (Veracruz, Puebla, Estado de México, Morelos, Jalisco y Michoacán) (Phipps, 1997; Pérez *et al.*, 2004).

3.1.3. Hábitat

A menudo se cultiva en huertos familiares o a las orillas de terrenos de cultivo, en laderas de cerros con topografía escarpada (60 % de pendiente) en barrancas, y en las zonas de cultivo. Habita en bosques de encino, pino, pino-encino y abies; frecuentemente en comunidades secundarias. Le favorecen los suelos ácidos y francos. Suelos: negro, arcilloso, pedregoso de origen sedimentario y volcánico. Se localiza a altitudes que van de los 400 hasta 3 000 m; en general se clasifican en tipos criollos y cultivados; los primeros se localizan entre los 14 y 32° de latitud norte, y los segundos entre los 19 y 20° de latitud norte (Nieto y Borys, 1993).

3.1.4. Usos

Al tejocote se le ha dado múltiples usos, entre ellos como alimento pecuario, planta de ornato y en la industria alimentaria (Nieto y Borys, 1993; Barrientos y López, 1995). El tejocote es apreciado preferentemente en épocas navideñas debido a su empleo en la elaboración del ponche, bebida tradicional asociada a las posadas mexicanas.

Los frutos pueden comerse crudos y utilizarse secos o cocidos, en conservas, jaleas y mermeladas. Varias especies de tejocote se reconocen por sus propiedades medicinales; los frutos y flores de muchos espinos son bien conocidos en la medicina popular como tónico cardíaco, propiedades que se encuentran documentadas (Hadjimitsi y Zabetakis, 2005; Dinesh *et al.*, 2012). En

nuestro país, las flores, hojas y frutos se usan para aliviar la tos y también se emplea como sedante; la corteza de la raíz, como diurético para enfermedades del riñón, para el control de la formación de venas varicosas, de peso y colesterol; y la raíz y frutos para la diabetes (Martínez, 1967). Adicionalmente, se usa como tónico cardíaco, para mejorar la circulación, el dolor de angina de pecho y dolores abdominales y para controlar la hipertensión (Ody, 1993).

3.1.5. Composición química

Edwards *et al.* (2012) en su revisión sobre la química del género *Crataegus* mencionan algunos azúcares cuantificados en frutos de diferentes especies de *Crataegus*, siendo la fructuosa el azúcar más abundante, (Urbonaviciute *et al.* 2006 citado por Edwards *et al.*, 2012). Otros componentes mencionados en el mencionado trabajo son ácidos, entre ellos y de mayor abundancia destacan el cítrico y málico, los cuales se han demostrado tener un número de funciones fuera de su papel en el metabolismo primario de la planta, incluyendo la tolerancia al aluminio y la regulación de absorción de fósforo; así mismo se reporta la presencia de terpenos, ácidos hidroxicinámicos, flavonoides y una gran cantidad de compuestos químicos identificados en al menos 27 diferentes especies y dos híbridos nativos de Europa, Asia, y América del Norte. Es un fruto rico en vitamina C, carotenos y sales minerales, entre ellas, calcio, fósforo, hierro y presenta un alto contenido de pectina. Algunos de los principales compuestos se mencionan a continuación (Cuadro 1).

Cuadro 1. Principales componentes fitoquímicos mencionados por Edwards *et al.* (2012).

Grupo	Componentes
Azúcares	glucosa, sacarosa, fructosa, y xilosa.
Ácidos	Cítrico, málico, succínico, ascórbico, tartárico, quínico, protocatéquico, salicílico, 3- y 4-hidroxibenzoico y siríngico.
Terpenos	linarionosidos A y B; 3b-glucopiranosiloxi- β -ionona; (6S,7E,9R)-roseoside (6S,7E,9R-vomifoliol-9-OBd-glucopiranosido); (6R, 9R)-3-oxo-a-ionol-9-OBd-glucopiranosido; (5Z)-6-[5-(2-hidroxipropan-2-il)-2-metiltetrahidrofuran-2-il]-3-metilhexa-,5-dien-3-ol; (5Z)-6-[5-(2-O- β -D-glucopiranosil-propan-2-il)-2-metiltetrahidrofuran-2-il]-3-metilhexa-1,5-dien-3-ol; 4-[4 β -O- β -D-xilopiranosil-(1'' $\rightarrow$ 6')- β -D-glucopiranosil-2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il]-butan-2-ona; (Z)-3-hexenilo O- β -D-glucopiranosil-(1'' $\rightarrow$ 6')- β -D-glucopiranosido; (Z)-3-hexenilo O- β -D-xilopiranosil-(1'' $\rightarrow$ 6')- β -D-glucopiranosido; linarionosido C; y (3S,9R)-3,9-dihidroxi megastigman-5-eno 3-O- primeverósido).
Ácidos hidroxicinámicos	ácido cumárico, ácido cafeico, el ácido sinápico, ácido clorogénico, ácido ferúlico.
Flavonoides	flavonol-O-glucósido, quercetina-3-O-galactósido, flavona-C-glucósidos, vitexina-2''-O-ramnósido y acetilvitexin-2''-O-ramnósido.

En México, los estudios químicos de *Cratogeomys* han sido direccionados al estudio de flavonoides y fenoles principalmente. Compuestos de naturaleza fenólica como proantocianidinas, catequinas, flavonoides (Nuñez *et al.*, 2007; García *et al.*, 2012) y ácidos fenólicos (ácido clorogénico) se han identificado en tejocote asociados con su actividad antioxidante (Bahorum *et al.*, 1994). García *et al.* (2013)

identificaron por HPLC la presencia de cuatro flavonoides (glicósidos de quercetina) en las flores de *C. stipulosa*, *C. mexicana* y *C. nelsoni*. Cui *et al.* (2006) señalan un alto contenido de polifenoles en frutos de *Crataegus pinnatifida* debido a la presencia procianidinas (19.7 %), de fenoles (1.27 %; ácido clorogénico) y de flavonoides (0.48 %). Al respecto, Svedström *et al.* (2002) describen la presencia de procianidinas oligoméricas (taninos condensados) en hojas (1.58 % peso seco), flores (1.1.5 %) y la menor concentración detectada fue en frutos (0.15% peso seco) de *Crataegus laevigata*. García *et al.* (2012; 2013) mencionan el contenido de compuestos fenólicos, flavonoides y vitamina C asociados a la actividad antioxidante en los frutos de 20 accesiones que se localizan en México.

En relación al contenido de aceites esenciales o volátiles se han realizado pocos estudios, el estudio más extenso hasta la fecha se llevó a cabo por Kovaleva *et al.* (2009), quienes estudiaron tres especies de *Crataegus* nativo de Norteamérica: *C. jackii* Sarg., *C. robesoniana* Sarg. y *C. flabellata* Rydb.; los autores evaluaron el contenido de aceites esenciales en las flores y encontraron rendimientos de 0.03, 0.04 y 0.08 %, respectivamente. También identificaron 46 componentes, de los cuales sólo 19 fueron homólogos en las tres especies, entre los cuales destacan los más abundantes: tricosano, heneicosano, nonacosano, escualeno y ftalato. Los compuestos incluyen una serie de monoterpenoides, sesquiterpenoides, norterpenoides y triterpenoides.

Los compuestos volátiles se midieron también en los frutos de *C. aestivalis*, *C. opaca*, y *C. rufula*, en la que los compuestos más abundantes fueron identificados como butirato de butilo, hexanoato de butilo, y hexanoato de hexilo (Horvat *et al.*, 1991).

Hadjimitsi y Zabetakis (2005) estudiaron los compuestos volátiles de mermelada de *Crataegus azarolus* L., en la cual identificaron 44 compuestos, y reportaron al 2-furaldehído como el principal constituyente.

Los estudios enfocados a la identificación de los componentes volátiles de las especies de *Crataegus* existentes en México son relativamente nulos, la investigación en estas especies ha sido dirigida principalmente al contenido de fenoles y flavonoides, principalmente (Cuit *et al.*, 2006; Nuñez *et al.*, 2007; García *et al.*, 2012).

3.2 ACEITES ESENCIALES

En la naturaleza, los aceites esenciales desempeñan un papel importante en la protección de las plantas como agentes antibacterianos, antivirales, antifúngicos, insecticidas y actúan contra los herbívoros, reduciendo su apetito por estas plantas. También pueden atraer algunos insectos para favorecer la dispersión de polen y semillas, algunas de estas propiedades se muestran en la Figura 4 (Bakkali *et al.*, 2008). Los aceites esenciales o algunos de sus componentes se utilizan en la producción de perfumes y productos de maquillaje, de productos

sanitarios, en odontología, en la agricultura, como conservantes y aditivos de alimentos, y como remedios naturales. Por ejemplo, d-limoneno, acetato de geranilo o d-carvona se emplean en perfumes, cremas, jabones, como aditivos de sabor de los alimentos, como fragancias para los productos de limpieza del hogar, como disolventes industriales y cada vez con mayor frecuencia en aromaterapia. Algunos aceites esenciales parecen mostrar propiedades medicinales muy particulares para curar la disfunción de órganos o trastornos sistémicos (Bakkali *et al.*, 2008).

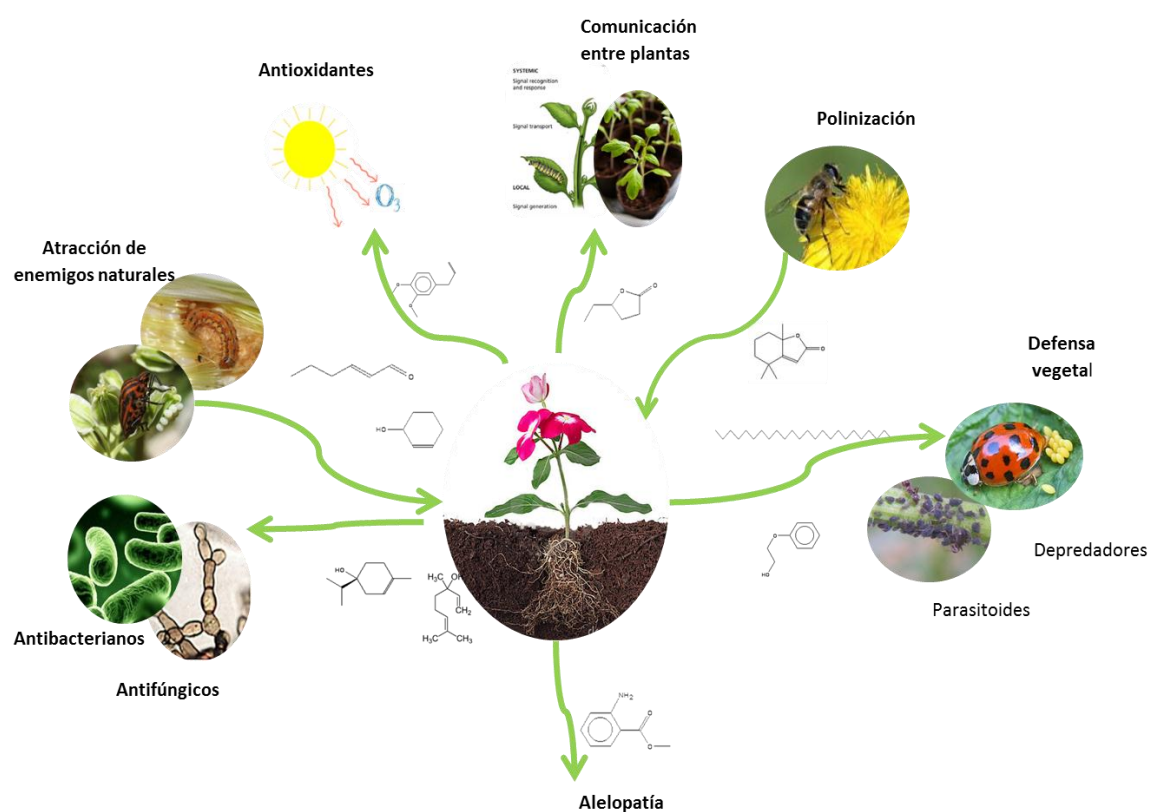


Figura 4. Algunas propiedades de los aceites esenciales.

La Farmacopea Herbolaria de los Estados Unidos Mexicanos (FHEU, 2001), define como aceite esencial al material formado por compuestos volátiles en las plantas, obtenidos por destilación (arrastre por vapor, hidrodestilación), por maceración, maceración en frío con aceites fijos, extracción con disolventes volátiles o por medios mecánicos (expresión), entre otros. Los aceites esenciales para uso interno pueden extraerse por destilación o por compresión de los tejidos frescos. Las esencias obtenidas de plantas son líquidos volátiles, refrigerantes, ópticamente activos, próximos a los aceites, con olor esencialmente característico, y que se forman como subproducto del metabolismo secundario de las plantas (Hernández, 2005).

De acuerdo a Cadby *et al.* (2002) los aceites esenciales son compuestos volátiles, naturales y complejos, caracterizados por un olor fuerte y biosintetizados en las plantas aromáticas, principalmente, como metabolitos secundarios, producidos al momento de activarse algunos mecanismos de defensa como respuesta a factores ambientales y ecológicos, estos presentan roles de defensa, atracción de polinizadores, entre otros.

3.2.1. Clasificación de aceites esenciales

Son sustancias volátiles de naturaleza orgánica, responsables del aroma de las plantas; el término aceite no se relaciona con las grasas, se llaman así porque son insolubles en agua y solubles en disolventes orgánicos. Aunque son mezclas de sustancias orgánicas no todos contribuyen al aroma. Generalmente son obtenidos

directamente por destilación del material vegetal, en el proceso sus características terapéuticas no cambian, sino se concentran. Su composición química es bastante compleja y en un tipo de aceite esencial por su fuente natural, pueden reunirse cientos de sustancias activas distintas (Martínez, 2003).

Se clasifican con base en diferentes criterios. De acuerdo con su consistencia los aceites esenciales se clasifican en:

Esencias fluidas: son líquidos volátiles a temperatura ambiente.

Bálsamos: son de consistencia más espesa, son poco volátiles y propensos a sufrir reacciones de polimerización, son ejemplos el bálsamo de copaiba, el bálsamo del Perú, bálsamo de Tolú, Estoraque, etc.

Oleorresinas: tienen el aroma de las plantas en forma concentrada y son típicamente líquidos muy viscosos o sustancias semisólidas (caucho, gutapercha, chicle, oleorresina de paprika, de pimienta negra, de clavel, etc.), (Martínez, 2003).

De acuerdo a su origen los aceites esenciales se clasifican como:

Naturales: se obtienen directamente de la planta y no sufren modificaciones físicas ni químicas posteriores, debido a su rendimiento tan bajo son muy costosos.

Artificiales: se obtienen a través de procesos de enriquecimiento de la misma esencia con uno o varios de sus componentes, por ejemplo, la mezcla de esencias de rosa, geranio y jazmín enriquecida con linalol.

Sintéticos: como su nombre lo indica son los producidos por procesos de síntesis química. Estos son más económicos y por lo tanto son mucho más utilizados como aromatizantes y saborizantes (Martínez, 2003).

3.2.2. Distribución y estado natural

Los aceites esenciales son sustancias naturales contenidas en glándulas microscópicas de las plantas, se les puede encontrar en diferentes partes de la planta: hojas, raíces, pericarpio del fruto, semillas, tallo, flores y frutos. Se encuentran ampliamente distribuidos en unas 60 familias de plantas: Compuestas, Lauráceas, Mirtáceas, Pináceas, Rosáceas, Rutáceas, Umbelíferas, etc. (Martínez, 2003)

La producción y la acumulación de aceites esenciales están relacionadas con estructuras especializadas ya que son muy tóxicos a las células. Los aceites volátiles de plantas se sintetizan, almacenan y liberan al ambiente por una variedad de estructuras secretoras especializadas como, por ejemplo, tricomas glandulares, cavidades secretoras, idioblastos y otros; morfología de dichas estructuras tiende a ser característica del grupo taxonómico; glándulas secretoras de aceite (eucalipto) y pelos o tricomas glandulares (labiadas). (Gershenzon, 1994). En el Cuadro 2 se presenta la diversidad de estructuras vegetales que pueden ser utilizadas para la obtención de aceites comerciales.

Cuadro 2. Partes de la planta utilizadas en la obtención de aceite esencial.

Aceite esencial	Parte de la planta utilizada
Ciprés, jara	Ramas
Lavanda, lavandín	Sumidades floridas
Menta, hierba limón, eneldo	Planta entera
Geranio	Hojas
Neroli, rosa	Flor
Limón, naranja, mandarina	Flavedo (capa externa del fruto)
Romero, tomillo, ajedrea, mejorana	Planta entera con flor
Melisa	Planta fresca
Abeto de Siberia	Acículas
Manzanilla	Flor seca
Canela	Corteza
Cedro	Madera
Lima	Fruto entero
Clavo	Botones florales

Martínez, 2003; Rodríguez *et al.*, 2012.

Factores endógenos como la etapa de desarrollo de toda la planta y órganos específicos, y factores exógenos (bióticos y abióticos) pueden alterar la producción del aceite esencial (Sangwan *et al.*, 2001). En una revisión exhaustiva sobre la regulación de la producción de aceites esenciales, Sangwan *et al.* (2001), indican que la ontogenia, la tasa fotosintética, fotoperiodo, calidad de la luz, los cambios climáticos y estacionales, la nutrición, la humedad, la salinidad, temperatura, estructuras de almacenamiento y reguladores del crecimiento son factores que alteran cualitativa y cuantitativamente la producción de esta clase de compuestos.

La producción de aceites esenciales y aromáticos de plantas está bajo regulación fisiológica, bioquímica, metabólica y genética (Figura 5). La regulación fisiológica,

además de ser ejercida en una etapa del desarrollo específico, es altamente susceptible a modulación a través de la regulación ambiental (Sangwan *et al.*, 2001).

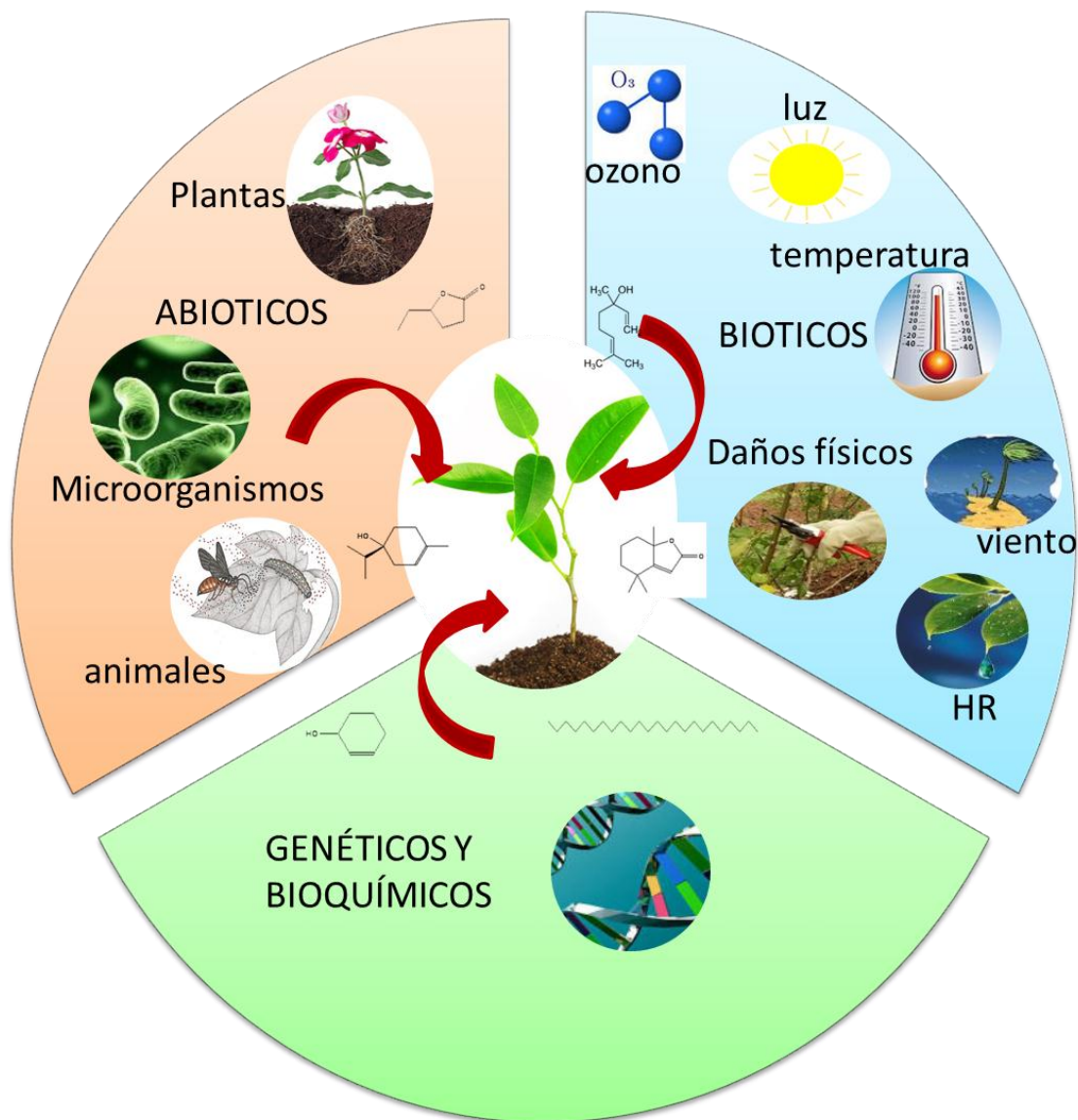


Figura 5. Factores que intervienen en la emisión de los aceites esenciales.

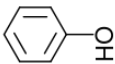
3.2.3. Propiedades físico-químicas

Las propiedades físicas de los aceites esenciales son su volatilidad y su difusión a temperatura ambiente. En general, si se dejan en contacto con el aire, se evaporan completamente. Recién destilados son incoloros o ligeramente amarillos. Su densidad es inferior a la del agua (la esencia de sasafrás o de clavo constituyen excepciones). Casi siempre dotados de poder rotatorio (rotación específica: por tener en su estructura centros quirales), tienen un índice de refracción elevado. Son solubles en alcoholes y en disolventes orgánicos como éter o cloroformo y alcohol de alta gradación. Son liposolubles y muy poco solubles en agua, pero son extraídos de los tejidos vegetales por el vapor de agua (Rodríguez *et al.*, 2012).

Las propiedades químicas de los aceites esenciales, se relacionan con la presencia de los grupos funcionales presentes como: alcoholes, aldehídos, ésteres, cetonas, terpenos, etc., responsables de los principios activos de un aceite esencial y de las propiedades terapéuticas: antisépticas, antibacterianas, diuréticas, antiespasmódicas, sedantes, tonificantes, reequilibrantes, depurativas, antirreumáticas, entre otras. Estas propiedades terapéuticas se deben a la presencia de activos fitoquímicos, incluyendo flavonoides, terpenoides, carotenoides, cumarinas y curcuminas (Tepe *et al.*, 2005).

En el Cuadro 3 se presentan las propiedades de algunos compuestos de acuerdo a su grupo funcional (Martínez, 2003 y <http://ocw.upm.es/29012014>).

Cuadro 3. Propiedades de compuestos de los aceites esenciales de acuerdo a su grupo funcional.

Compuesto	Grupo Funcional	Ejemplo	Propiedades
Alcohol	$R-O-H$	Mentol, geraniol	Antimicrobiano, antiséptico, tonificante, espasmolítico
Aldehído	$R-C(=O)-H$	Citral, citronelal	Espasmolítico, sedante, antiviral
Cetona	$R^1-C(=O)-R^2$	Alcanfor, tuyona	Mucolítico, regenerador, celular, neurotóxico
Éster	$R-C(=O)-OR'$	Salicilato de metilo	Espasmolítico, sedativo, antifúngico
Éteres	$R-O-R'$	Cineol, ascaridol	Expectorante, estimulante
Fenol		Timol, eugenol, carvacrol	Antimicrobiano, irritante, estimulante inmunológico
Monoterpeno	Ciclíco insaturado	Pineno, limoneno	Estimulante, descongestionante, antivírico, antitumoral.

<http://ocw.upm.es/29012014>.

3.2.4. Composición química

Los aceites esenciales naturales son mezclas muy complejas que pueden contener aproximadamente de 20 a 60 componentes en concentraciones bastante diferentes. Se caracterizan por dos o tres grandes componentes a altas concentraciones (20-70 %) en comparación a los demás componentes presentes

en cantidades traza. Por ejemplo, carvacrol (30 %) y timol (27 %) son los componentes principales del aceite esencial de *Origanum compactum*, linalol (68 %) del aceite esencial de *Coriandrum sativum* (Bakkali *et al.*, 2008; Salam, 2008).

Los componentes principales y/o mayoritarios de un aceite esencial pueden poner de manifiesto que, para ciertas especies, individuos indistinguibles desde un punto de vista botánico y que crecen en similares condiciones atmosféricas y edáficas presentan una composición química diferente. A partir de este hecho, se ha propuesto el término “quimiotipo” para calificar a un grupo infraespecífico de individuos que se caracterizan y distinguen de modo significativo de los demás miembros de su especie por la presencia o concentración de uno o varios compuestos y “quimiotaxonomía” para los estudios que utilizan la diversidad química de las plantas para complementar los resultados obtenidos del conocimiento de su diversidad botánica (Soria *et al.*, 2008). Carvacrol y el timol son los quimiotipos de la especie *O. vulgare*, cada uno con enzimas específicas que dirigen su biosíntesis (D'antuono *et al.*, 2000). Cinamato de metilo es el quimiotipo de los volátiles de *Ocimum americanum* (Albahaca morada) de Chapetón-Ibagué (Murillo *et al.*, 2004).

El estudio de la existencia de quimiotipos presenta un interés aplicado cuando el interés científico por la utilidad de una especie deriva fundamentalmente de la posibilidad de emplear la composición química como indicadora de la existencia de una diversidad genética que se pone de manifiesto no en diferencias morfológicas sino en características metabólicas (Soria *et al.*, 2008).

Generalmente, los componentes principales determinan las propiedades biológicas de los aceites esenciales (Bakkali *et al.*, 2008).

3.2.5. Biosíntesis de componentes volátiles del aroma en frutos

Los componentes volátiles incluyen dos grupos principales de distinto origen biosintético, el grupo principal está compuesto de terpenos y terpenoides y el otro por constituyentes alifáticos y aromáticos, en particular por fenilpropanoides, los componentes de ambos grupos se caracterizan por un bajo peso molecular (Bakkali *et al.*, 2008).

Los terpenos son los compuestos volátiles más relevantes, seguidos de los derivados de ácidos grasos (hidrocarburos saturados e insaturados), bencenoides y fenilpropanoides, aunque también se han reportado sustancias azufradas y nitrogenadas (Berger, 2007; Dudareva *et al.*, 2004; Lalel *et al.*, 2003).

Los volátiles de origen vegetal son producidos principalmente por tres rutas biosintéticas (Figura 6). La primera, conocida como la vía de los ácidos grasos/lipooxigenasa o vía de los volátiles de hojas verdes (VHV), dan el olor característico a éstas. En general, los VHV son liberados cuando las hojas son dañadas mecánicamente (Paré y Tumlinson, 1996).

Las enzimas lipoxigenasa (LOX) e hidroperóxido liasa (HL) son claves en la formación de los VHV. Este sistema enzimático (LOX y HL) se ha encontrado en té

(*Thea sinensis*), unido a la membrana lamelar de los tilacoides en los cloroplastos. La actividad de estas enzimas cambia durante la estación de crecimiento y parece estar relacionada con la temperatura y la radiación solar (Hatanaka *et al.*, 1987; Hatanaka, 1993, citados por Marín-Loaiza y Céspedes, 2007).

La segunda ruta biosintética para la síntesis de volátiles es la que da origen a los terpenos y se lleva a cabo a través de dos vías, la del mevalonato y la del no mevalonato (Deoxi-xilulosa-4-fosfato (DOXP)). La mayoría de terpenos conocidos se deriva de estas vías. Ambas vías tienen como compuesto intermediario al isopentenil pirofosfato (IPP), y según el sitio de síntesis dan origen a monoterpenos o a sesquiterpenos. Así, si el IPP proviene del ácido mevalónico, su síntesis ocurre principalmente en el citosol, para que luego dos moléculas de IPP se condensan con una de dimetil-alil-pirofosfato (DMAPP) y formen el farnesil pirofosfato (FPP), el cual es precursor de todos los sesquiterpenos. Caso diferente ocurre con los monoterpenos, en el cual el IPP es sintetizado a través de la DOXP en los compartimentos plasmídicos, donde se transforma en su isómero DMAPP, y por la condensación de una molécula de IPP con una de DMAPP se genera el geranil pirofosfato (GPP), precursor universal de los monoterpenos (McGarvey y Croteau 1995; McCaskill y Croteau, 1998, citados por Marín-Loaiza y Céspedes, (2007).

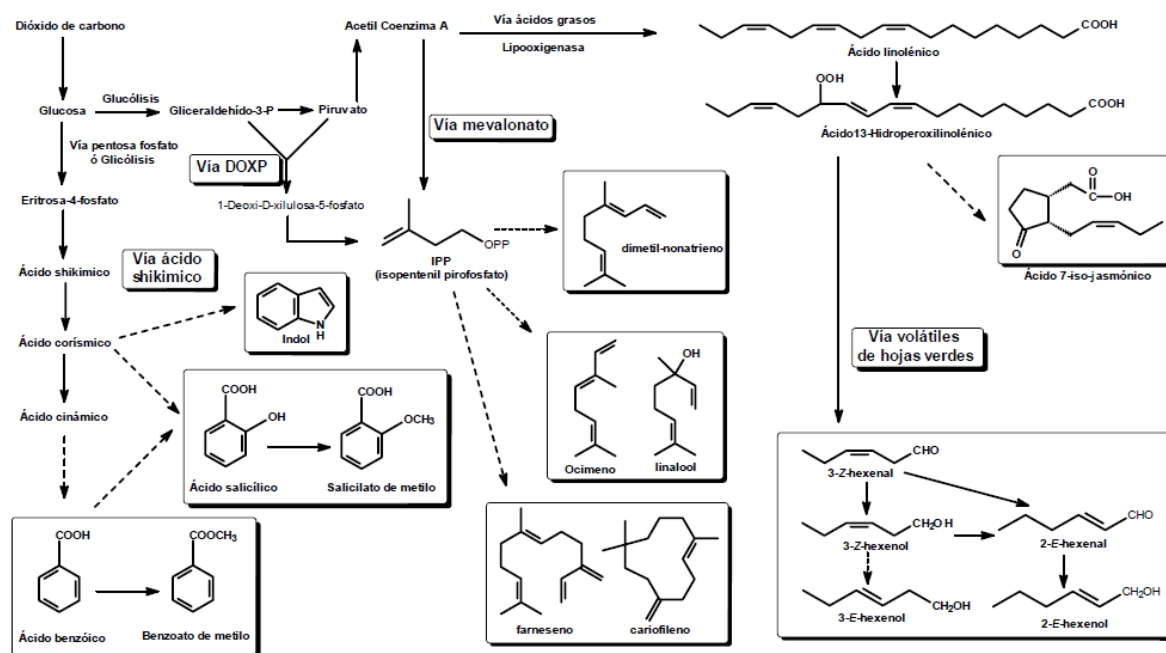


Figura 6. Rutas biosintéticas para la síntesis de compuestos volátiles en plantas (--- varios pasos). Fuente: Marín-Loaiza y Céspedes (2007).

3.2.6. Algunos efectos biológicos en organismos

Aceites esenciales de orégano y tomillo ($100 \mu\text{g mL}^{-1}$) aplicados en condiciones *in vitro* inhibieron completamente el crecimiento de *Botrytis cinerea* (Salam *et al.*, 2011). Los principales componentes activos de esos aceites fueron carvacrol y timol, respectivamente. El aceite esencial de la menta (*Mentha piperita*), también puede inhibir en forma moderada el crecimiento de *Botrytis cinerea* (Bouchra *et al.*, 2003).

Un trabajo en la levadura *Saccharomyces cerevisiae*, ha demostrado que la citotoxicidad de algunos aceites esenciales, basados en la capacidad de formación de colonias, difieren considerablemente en función de su composición química; las

células tratadas con aceite esencial en la fase estacionaria de crecimiento mostraron 50 % de letalidad del 0.45 IL mL^{-1} de aceite esencial de *Origanum compactum*, 1.6 LI mL^{-1} de aceite esencial de *Coriandrum sativum* (Bakkali *et al.*, 2005).

El Carvacrol, principal compuesto fenólico encontrado en el aceite esencial de tomillo, puede penetrar la membrana del citoplasma, causando una desestabilización y, además, podría actuar como intercambiador de protones, reduciendo el gradiente de pH a lo largo de la membrana. (Guynot *et al.*, 2005).

La inducción de daños en la membrana, ha sido también confirmada por un análisis de microarreglos que muestra que los genes de *Saccharomyces cerevisiae* que participan en la biosíntesis de ergosterol y la absorción de esterol, metabolismo de los lípidos, estructura y función de la pared celular, la desintoxicación y transporte celular se ven afectados por un tratamiento con α -terpineno, un monoterpeno monocíclico (Parveen *et al.*, 2004).

3.2.7. Modo de acción

Los aceites esenciales comprenden un gran número de componentes y es probable que su modo de acción implique varios objetivos en la célula (Bakkali *et al.*, 2008). Debido al gran número de componentes, los aceites esenciales parecen no tener objetivos celulares específicos. Como típicos lipófilos, que pasan a través de la pared celular y la membrana citoplasmática, alteran la estructura de sus diferentes capas de polisacáridos, ácidos grasos y fosfolípidos,

permeabilizándolas, su citotoxicidad parece incluir tales daños en la membrana (Bakkali *et al.*, 2008).

Una característica importante de los aceites esenciales y sus componentes es su hidrofobicidad, que les permite la partición en los lípidos de la membrana celular bacteriana, haciéndolas permeables y promoviendo la pérdida de los contenidos celulares. Las condiciones físicas que mejoran la acción de los aceites esenciales son bajo pH, baja temperatura y baja concentración de oxígeno (Burt, 2007).

En las células eucariotas, los aceites esenciales pueden provocar la depolarización de las membranas mitocondriales por la disminución del potencial de membrana, afecta el ciclo iónico de Ca^{+2} y otros canales iónicos y pueden reducir el gradiente de pH, que afecta (como en las bacterias) la bomba de protones y el pool de ATP (Taiz y Zeiger, 2002). Ellos cambian la fluidez de las membranas, que se vuelven anormalmente permeable dando lugar a fugas de radicales, citocromo C, iones de calcio y proteínas, como en el caso de estrés oxidativo y la insuficiencia bioenergética. La permeabilización de las membranas mitocondriales interna y externa conduce a la muerte celular por apoptosis y necrosis. La actividad citotóxica de los aceites esenciales es sobre todo debido a la presencia de fenoles (carvacrol, eugenol (2-metoxi-4-2-propenil-fenol) y timol), aldehídos y alcoholes (Armstrong, 2006).

Esta propiedad citotóxica es de gran importancia en las aplicaciones de los aceites esenciales no sólo contra ciertos patógenos o parásitos humanos o animales, sino

también para la conservación de los productos agrícolas o marinos. Los aceites esenciales o algunos de sus componentes son realmente eficaces contra una gran variedad de organismos incluyendo bacterias, ácaros, hongos, nematodos e insectos (Bakkali *et al.*, 2008).

La capacidad citotóxica de los aceites esenciales sobre la base de una actividad prooxidante puede hacerlos excelentes antisépticos, agentes antimicrobianos, para la purificación de aire, la higiene personal, o incluso el uso interno mediante el consumo oral, y para su uso insecticida en la preservación de cultivos o en las reservas de alimentos. Por otra parte, algunos de ellos muestran una clara capacidad antimutagénica que bien podría estar vinculado a una actividad anticancerígena. Estudios recientes han demostrado que la actividad prooxidante de los aceites esenciales o de algunos de sus componentes, como también que algunos de los polifenoles, es muy eficiente en la reducción del volumen de tumores locales o proliferación de células tumorales por apoptosis y / o efectos necróticos (Bakkali *et al.*, 2008).

3.2.8. Extracción de los aceites esenciales

Los aceites esenciales se pueden extraer de las muestras vegetales mediante varios métodos como son: expresión, destilación con vapor de agua, extracción con solventes volátiles, enfleurage y con fluidos supercríticos (Rodríguez *et al.*, 2012). La Farmacopea Española clasifica a estos métodos en oficiales y no oficiales, los cuales se presentan en el Cuadro 4. Los métodos considerados como

oficiales son aquellos destinados a la obtención de aceites esenciales de uso farmacéutico. Los métodos no oficiales se utilizan para la obtención de esencias, principalmente de uso en perfumería o alimentación, aunque hay esencias que no tienen uso farmacológico pero se obtienen de manera oficial (Kuklingski, 2000).

Cuadro 4. Métodos para la extracción de aceites esenciales.

Métodos oficiales	Métodos no oficiales
A. Destilación por arrastre de vapor:	C. Extracción con disolventes orgánicos
– Destilación por arrastre de vapor	
– Hidrodestilación	D. Extracción con grasas:
– Destilación mixta	– Enflorado
B. Métodos mecánicos (expresión)	– Digestión
	– Método neumático
	E. Extracción gases supercríticos

A. Destilación por arrastre con vapor

Existen tres posibilidades que se aplican según las características de la droga:

- Método de inyección de vapor de agua: en este método, la droga y el agua no están inicialmente en contacto. La droga se coloca sobre unas rejillas a través de las cuales se hace pasar una corriente de vapor que arrastra los aceites esenciales, el vapor de agua es condensado y recolectado en un recipiente. Posteriormente, se separan los aceites esenciales del agua (Kuklingski, 2000).
- Hidrodestilación: el agua y la muestra vegetal se ponen en contacto y son llevados a ebullición. Generalmente es necesaria una maceración previa, al

evaporarse el agua se transforma en vapor de agua, el cual arrastra la esencia, se condensa, se colecta en un recipiente y después se separan los aceites esenciales del agua. Esta técnica es muy utilizada especialmente para esencias fluidas, especialmente las utilizadas para perfumería. Se utiliza a nivel industrial debido a su alto rendimiento, la pureza del aceite obtenido y porque no requiere tecnología sofisticada (Kuklingski, 2000).

- Destilación mixta: la muestra vegetal y el agua son colocados en el mismo recipiente pero sin que entren en contacto, ya que la droga está en una rejilla y el agua está en el fondo del recipiente. Se hace hervir el agua y el vapor atraviesa la rejilla con la droga arrastrando consigo los aceites esenciales. Después se condensa, se colecta y se separan los aceites esenciales del agua (Kuklingski, 2000).

B. Expresión

El material vegetal es exprimido para liberar el aceite y este es recolectado y filtrado. Este método es utilizado para el caso de las esencia de cítricos (Rodríguez *et al.*, 2012). Mecánicamente se ralla la corteza del fruto y se pasa una corriente de agua que arrastra el zumo. Posteriormente los aceites esenciales se separan por decantación (Kuklingski, 2000).

C. Extracción con disolventes orgánicos

En este método, la muestra seca o fresca y molida se pone en contacto con solventes tales como alcohol, diclorometano, etc. Estos solventes solubilizan la esencia pero también solubilizan y extraen otras sustancias tales como grasas y

ceras, obteniéndose al final una esencia impura, por lo que es necesaria la purificación del extracto obtenido. Se utiliza a escala de laboratorio pues a nivel industrial resulta costoso por el valor comercial de los solventes (Kuklingski, 2000; Martínez, 2003; Rodríguez *et al.*, 2012).

D. Extracción con grasas

Este procedimiento consiste en transferir los aceites esenciales del material vegetal a una sustancia grasa, generalmente de origen animal. De este procedimiento se pueden destacar varios métodos:

- **Enfleurage:** se aplica para la extracción de esencias, sobre todo de los pétalos de las flores, consiste en colocar una película de grasa sobre una placa de vidrio, encima de ella pétalos de la flor, sobre estos otra película de grasa y así sucesivamente. Se dispone grasa y pétalos en capas y se realiza una presión de forma que la esencia se transfiere del pétalo a la grasa debido a su solubilidad. Con la misma grasa se hacen varias extracciones renovando los pétalos (Kuklingski, 2000; Bruneton, 2001). Este procedimiento es clásico y muy antiguo, por lo que ha sufrido algunas modificaciones, donde el material vegetal (generalmente flores) es puesto en contacto con un aceite vegetal. La esencia es solubilizada en el aceite vegetal que actúa como vehículo extractor. Se obtiene inicialmente una mezcla de aceite esencial y aceite vegetal la cual es separada posteriormente por otros medios físico-químicos. Esta técnica es empleada para la obtención de esencias florales (rosa, jazmín, azahar, etc.), pero su bajo rendimiento y la difícil separación del aceite extractor la hacen costosa (Martinez, 2003).

- Digestión: esta extracción se realiza en caliente, poniendo en contacto el material vegetal con grasa fundida y calentándolo, con lo cual la esencia se transfiere a la grasa (Kuklingski, 2000). El producto obtenido es una pomada floral (Bruneton, 2001).
- Método neumático: consiste en hacer pasar aire caliente a través del material vegetal de forma que arrastra las esencias y, este aire cargado de esencias se hace pasar a través de un nebulizado de grasa fundida que extrae las esencias (Kuklingski, 2000).

E. Extracción con gases supercríticos

Se trabaja con gases a elevada presión y muy baja temperatura para que estén en estado líquido. El material vegetal cortado en trozos pequeños, licuado o molido, se empaca en una cámara de acero inoxidable y se hace circular a través de la muestra un gas supercrítico (butano, propano, dióxido de carbono), las esencias son así solubilizadas y arrastradas y el gas supercrítico que actúa como solvente extractor se elimina por descompresión progresiva hasta alcanzar la presión y temperatura ambiente, y finalmente se obtiene una esencia pura. Aunque presenta varias ventajas como rendimiento alto, es ecológicamente compatible, el solvente se elimina fácilmente e inclusive se puede reciclar, el equipo requerido es relativamente costoso, ya que se requieren bombas de alta presión y sistemas de extracción también resistentes a las altas presiones (Kuklingski, 2000; Martínez, 2003).

V. MATERIALES Y MÉTODOS

4.1 MATERIAL VEGETAL

El material vegetal fue colectado en el campo experimental SJ-11, lotes 40,41; perteneciente a la Universidad Autónoma Chapingo, ubicado en Lomas de San Juan, a los 19° 29' de LN y a 98° 53' de LO y a 2 250 m. El clima es C (Wo) (w)b (i')g, templado moderado lluvioso y el más seco de los subhúmedos, con lluvias en verano; la temperatura media anual es de 17.8 °C y la precipitación es del orden de los 644.8 mm anuales (García, 1988).

El material vegetal utilizado consta de 11 accesiones de tejocote (Cuadro 5), de las cuales ocho ya han sido caracterizadas morfológicamente y agrupadas en un dendrograma de cinco grupos (Nieto, 2007) resultado de la caracterización morfológica y morfométrica de 93 accesiones que se localizan en el Banco de Germoplasma, las tres accesiones restantes son de importancia económica pero son objeto de estudio para su caracterización y agrupación.

La cantidad de material utilizado fue de 1.2 kg para cada accesión, este fue cosechado, lavado, secado y resguardado en un congelador horizontal marca Frigidaire a -20 °C, para evitar la oxidación de la pulpa y lograr la extracción óptima de los fitoquímicos. El rendimiento del aceite esencial del fruto de tejocote

fue evaluado en porcentaje con respecto al peso fresco. Para la realización de la metodología, el fruto fue utilizado sin semillas.

Previo a la congelación del material vegetal, el diámetro ecuatorial de 10 frutos fueron medidos con un vernier, de las medidas se obtuvo un intervalo y con base en ello se agruparon por tamaño de la siguiente manera: chico (13.20 mm-17.90 mm), mediano (17.90 mm-22.60 mm) y grande (22.70 mm-26.50 mm).

Cuadro 5. Identificación del material vegetal utilizado.

Material	Grupo	Especie	Origen
ACC86	1	C. mexicana & Moc Sessé	Puebla
ACC100	1	C. mexicana & Moc Sessé	Puebla
ACC15	2	C. aurescens Phipps	Chiapas
ACC72	5	C. baroussana Eggl	Chiapas
ACC04	3	C. sulfured Phipps	Chiapas
ACC55	4	C. mexicana & Moc Sessé	Puebla
ACC50	3	C. greggiana Eggl	Estado de México
ACC26	4	C. gracillior Phipps	Puebla
ATEX02	-	C. aurescens Phipps	Puebla
ATEX05	-	C. rosei Eggl rosei	Puebla
ATEX06	-	-	Puebla

López *et al.*, 2008.

4.2 EXTRACCIÓN DEL ACEITE

Los aceites esenciales se extrajeron con el método de hidrodestilación, para esto, se pesaron 150 g de fruto de tejocote congelado a -20 °C, el fruto fue lavado y cortado en pequeños trozos eliminando la semilla del fruto e inmediatamente colocado en un matraz redondo de capacidad de 1 L al que se le agregaron 300

mL de agua destilada. Posteriormente, el matraz se colocó en una canastilla de calentamiento a ebullición por una hora promoviendo la extracción de la esencia. El matraz fue unido a un microdestilador tipo Clevenger, en la trampa del equipo se capturo la mezcla de aceite esencial más agua, producto de la condensación en el refrigerante conectado al equipo Clevenger como se puede observar en la Figura 7.



Figura 7. Equipo de hidrodestilación.

El producto obtenido (mezcla de aceite esencial más agua) fue colectado y guardado en refrigeración hasta su posterior secado a $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$, este procedimiento se repitió ocho veces para cada una de las accesiones; es decir, para cada muestra de 1.2 kg se realizaron ocho extracciones (destilaciones).

La separación del aceite esencial de la fase acuosa se realizó mediante un triple lavado utilizando diclorometano como Disolvente en proporción 2:1 (agua-diclorometano), respectivamente. Posteriormente se eliminó los restos de agua con sulfato de sodio anhidro. El disolvente diclorometano se eliminó a $38\text{ }^{\circ}\text{C}$ en un

rotoevaporador marca Buchi R-210, obteniendo así el aceite esencial, el cual fue recuperado en un vial color ámbar y conservado bajo refrigeración a -20 °C hasta el día que se realizó el análisis de cromatografía.

4.3 IDENTIFICACIÓN PREELIMINAR DEL ACEITE ESENCIAL

La identificación previa del perfil del aceite esencial de cada accesión se realizó a través de cromatografía en capa fina. Para ello se aplicó con un capilar una muestra de aceite esencial de cada una de las accesiones sobre la placa de sílica gel 60 GF₂₅₄ (Merck), la placa fue introducida en una cámara de elución, como eluyente se utilizó tolueno – acetato de etilo en proporción 93:7, respectivamente. Posteriormente, ésta fue revelada con los agentes cromogénicos de una mezcla de vainillina 1 % y etanol, se dejó secar y posteriormente se asperjó con una solución etanólica de H₂SO₄ al 10 % v/v, por último se colocó en una estufa a 110° C durante cinco minutos para su observación.

4.4 CUANTIFICACIÓN E IDENTIFICACIÓN DEL ACEITE ESENCIAL

La composición química de cada uno de los aceites esenciales se realizó mediante la técnica cromatografía de gases (CG) acoplado a un espectrómetro de masas (EM). El aceite esencial disuelto en diclorometano se inyectó directamente al cromatógrafo sin algún tratamiento previo, el volumen inyectado fue de 1 µL.

Para este análisis se utilizó un cromatógrafo de gases Hewlett Packard GC System HP 6890 acoplado a un detector selectivo de masa HP 5973 (EM). La muestra de los diferentes aceites correspondientes a cada una de las accesiones se diluyeron en 200 μL de diclorometano y se inyectó 1 μL manualmente en el cromatógrafo; se utilizó una columna capilar HP-5MS (30 m x 0.25 mm x 0.25 μm) usando helio como gas de arrastre ($1 \text{ ml}\cdot\text{m}^{-1}$). La temperatura del inyector fue de 230 $^{\circ}\text{C}$ y el programa de temperatura del horno fue: de 50 $^{\circ}\text{C}$, hasta los 250 $^{\circ}\text{C}$, aumentando 10 $^{\circ}\text{C}$ por minuto. El método utilizado fue spittless para trabajar con toda la muestra. En la Figura 8 se muestra el equipo que se utilizó para el análisis de la composición química de los aceites esenciales.



Figura 8. Cromatógrafo de gases acoplado a detector de masas (CG-EM).

La presente investigación se realizó en los Laboratorios de Bioquímica Vegetal del Área de Química en el Departamento de Preparatoria Agrícola en la Universidad Autónoma Chapingo; en el Laboratorio de Fitoquímica del Programa de Botánica del Colegio de Postgraduados, Campus Montecillo y el Laboratorio del programa de Fitosanidad del Colegio de Postgraduados, Campus Montecillo.

La cuantificación de los componentes (CR) se realizó por el método del área de cada pico, relativas a la suma de las áreas de todos los picos. La identificación (%) de los componentes de la mezcla, se realizó mediante la comparación de los espectros de masas extraídos en el presente trabajo, con los de la biblioteca del NIST (National Institute for Standards and Technology, USA), utilizando los algoritmos propios del espectrómetro. También se obtuvieron los índices de retención o índice Kovats (IK) de cada compuesto, para facilitar la identificación del compuesto, fue necesaria la inyección de una mezcla de alcanos como estándares que proporcionó los datos necesarios para su cálculo mediante la siguiente ecuación:

$$IR = (100 \times Ca) + \left(\frac{tr' - trCa}{trCa + 1 - trCa} \right)$$

dónde:

IR= índice de retención.

Ca= número de átomos de carbono en el n-alcano a la izquierda del pico del analito.

tr'= tiempo de retención corregido

trCa= tiempo de retención del n-alcano a la izquierda del pico del analito.

trCa+1= tiempo de retención del n-alcano a la derecha del pico del analito.

VI. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

5.1 RENDIMIENTO DEL ACEITE ESENCIAL EN CADA ACCESIÓN

Se obtuvieron 11 mezclas de aceites esenciales, cada una correspondió a cada accesión estudiada, para ello se utilizaron 1 200 g de fruto de tejocote, el cual fue despepitado previo a la hidrodestilación. El rendimiento fue evaluado con respecto al peso fresco del fruto. En el Cuadro 6 se presenta el rendimiento obtenido en miligramos y en porcentaje para cada una de las accesiones de estudio.

Cuadro 6. Rendimiento del aceite esencial de 11 accesiones de *Crataegus* spp.

Material	Grupo	Origen	mg 1.2 kg ⁻¹ de fruto	Rend. (%)
ACC86	1	Puebla	0.0099	0.000825
ACC100	1	Puebla	0.0053	0.000441
ACC15	2	Chiapas	0.0083	0.000691
ACC72	5	Chiapas	0.0096	0.000800
ACC04	3	Chiapas	0.0102	0.000850
ACC55	4	Puebla	0.0108	0.000900
ACC50	3	México	0.0118	0.000983
ACC26	4	Puebla	0.0100	0.000833
ATEX02	-	Puebla	0.0058	0.000483
ATEX05	-	Puebla	0.0050	0.000416
ATEX06	-	Puebla	0.0098	0.000816

Los resultados obtenidos manifiestan un rendimiento promedio de 0.000730 %; la accesión 50 presentó el rendimiento más alto con 0.000983 % y la accesión ATEX05 el rendimiento más bajo con 0.000416 %. Se puede inferir que el rendimiento obtenido no está asociado al tamaño de fruto ya que las accesiones mencionadas (50 y ATEX05) se caracterizan por un fruto de tamaño grande, siendo que sus rendimientos son contrastantes. Asimismo, se presenta la accesión 72, de frutos de tamaño pequeño, la cual presentó un rendimiento de 0.000800 %, opuesto al rendimiento presentado por la accesión 100 de 0.000441%, esta última caracterizada por frutos grandes. Así mismo, no se encuentra similitud de los rendimientos en relación al origen, al comparar los rendimientos entre las accesiones originarias del Estado de Chiapas (15, 72 y 04) se puede apreciar que sus rendimientos son variables, a pesar de que las tres tienen fruto de tamaño pequeño. De manera similar, las accesiones originarias del estado de Puebla (86, 100, 55, 26, ATEX02, ATEX05 y ATEX06), todas de fruto de tamaño de fruto entre mediano y grande, difieren ampliamente en los rendimientos obtenidos.

En la Figura 9 se puede apreciar el tamaño y color de fruto de cada uno de los materiales de estudio.



Figura 9. Material de estudio.

5.2 IDENTIFICACIÓN PREELIMINAR DE ACEITES ESENCIALES

Para la identificación preliminar de los compuestos presentes en los diferentes aceites esenciales, se realizó un análisis de cromatografía en capa fina (Figura 10).

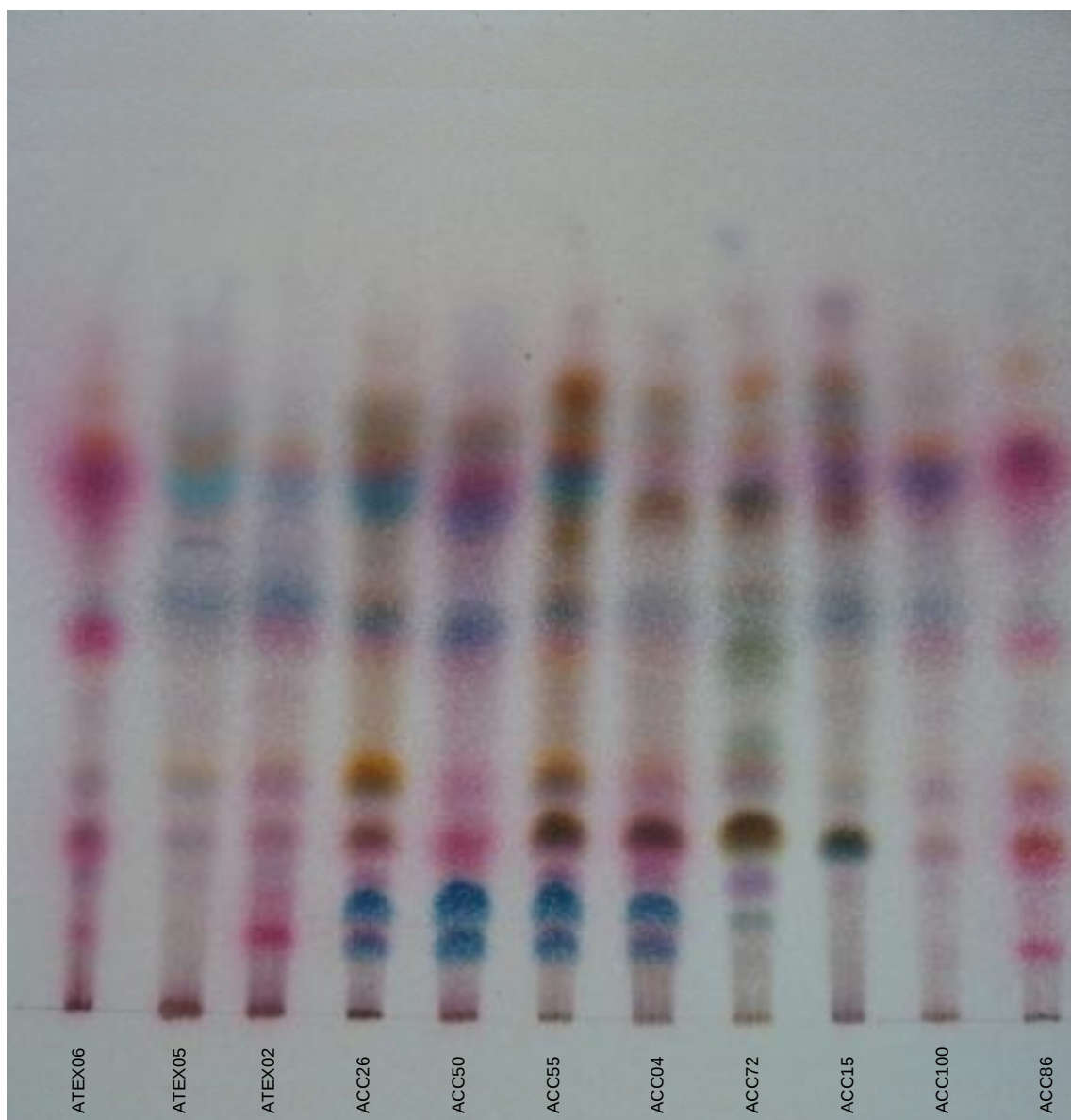


Figura 10. Aceites esenciales en Cromatografía en Capa Fina.

En la placa cromatográfica se observa el bandeo correspondiente a cada muestra de aceite; el agente cromogénico para el revelado de la misma permitió determinar la riqueza de los componentes en los aceites esenciales extraídos; así mismo, se puede inferir que varias de las accesiones presentan compuestos en común, como es el caso de las accesiones 26, 55, 50 y 04 que manifiestan una coloración azul muy similar y un Rf similar. Por otro lado, las accesiones 55, 04, 72 y 15 presentan en común una coloración café. Las accesiones ATEX06 y ACC86 también presentaron algunas semejanzas en coloración, por lo que puede deducirse que también comparten compuestos o en su caso, grupos químicos en común.

5.3 IDENTIFICACIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE ACEITES ESENCIALES POR CROMATOGRFÍA DE GASES

Los aceites esenciales obtenidos del fruto de tejocote de 11 accesiones fueron analizados por cromatografía de gases y espectrometría de masas; cada perfil se muestra en los cromatogramas ubicados en los ANEXOS 1,4,7,10,13,16,19,22, 25,28,31 al final del presente documento. Del estudio realizado se obtuvo en conjunto un total de 139 componentes, de ellos se seleccionaron los compuestos con una un porcentaje de Identidad (I %) mayor al 80 %; por lo que, 54 compuestos fueron descartados debido a su baja cantidad relativa y bajo porcentaje de identidad, así mismo como aquéllos compuestos derivados de la columna utilizada y disolventes (posibles contaminantes). Cabe mencionar que el mínimo porcentaje de identidad considerado aceptable fue de 80 %, esto debido a

la concordancia de los espectros de masa de la muestra con los de la biblioteca (NIST02); los compuestos que presentaron una Cantidad Relativa (CR) mayor al 2 % pero que presentaron un bajo porcentaje de identidad se reportan como No identificados.

En el Cuadro 7 se presentan las características de los 85 compuestos seleccionados de las diferentes muestras del aceite esencial de tejocote, se enlistan los nombres de acuerdo a la International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) y entre paréntesis el nombre común o trivial; de ellos 33 componentes no fueron identificados debido a la carencia de información en la biblioteca de CG-EM, en la base de datos NIST02 y/o a su bajo porcentaje de identidad; los 52 componentes restantes fueron identificados y agrupados de acuerdo a su grupo funcional, sus datos químicos se presentan en el Cuadro 8.

Cuadro 7. Componentes del aceite esencial de *Crataegus* spp.

NO.	COMPUESTO	TR	IK	CAS
1	(E)-2-Hexenal	3.62	876.195	006728-26-3
2	2-Hexenal	3.63	896.923	000505-57-7
3	3-hidroxibutanoato de metilo	3.71	897.158	001487-49-6
4	No identifico	3.82	896	000629-33-4
5	1-Hexanol (Hexanol)	3.87	897.229	000111-27-3
6	Acido 2-metil- butírico	4.01	836.396	000116-53-0
7	2-metil-ciclopenten-2-ona	4.11	897.375	001120-73-6
8	2-Ciclohexenol	4.13	897.430	000822-67-3
9	No identificado	4.13	846.6991	021020-27-9
10	2-Cyclohexenona	4.71	897.805	000930-68-7
11	Ácido 2-hidroxi-metil-pentanoato de metilo	5.57	942.432	041654-19-7
12	No identificado	5.81	998	005926-95-4
13	2-Cloro- ciclohexanol,	6.13	997.986	001561-86-0
14	Ácido hexanoico (Ácido caprico)	6.33	998.355	000142-62-1
15	Trans-3-ácido hexenoico	6.63	1102.931	001577-18-0
16	2(3H)-Furanone, 5-etildihidro- (γ -Caprolactona)	6.57	998.217	000695-06-7
17	No identificado	6.73	1105	001191-04-4
18	No identificado	6.89	998.282	003393-45-1
19	6-Metil-2-(2-oxiranil)-5-hepten-2-ol	6.99	1053.124	1000132-13-0
20	2,6-Dimetil-2,7-octadien-6-ol (Linalol)	7.14	1097.604	000078-70-6
21	Ácido heptanoico (Ácido enántico)	7.23	1097.892	000111-14-8
22	Ciclohepteno	7.84	1098.040	000628-92-2
23	2-Metil-2-vinil-(α -hidroxi-isopropil)-tetrahidrofurano (Óxido de linalool)	8.3	1175.312	014049-11-7
24	(R)-4-Isopropil-1-metil-1-cyclohexen-3-ol (R) 4-Terpinenol)	8.35	1197.354	020126-76-5
25	(S)-4-Isopropil-1-metil-1-cyclohexen-3-ol (S) 4-Terpineol)	8.37	1180.377	000562-74-3
26	Ácid Octanoico (Ácido caprílico)	8.51	1197.722	000124-07-2
27	(R) 2-(4-Metilciclohexen-3-en-1-il)-propan-2-ol (R- α -terpineol)	8.57	1197.534	000098-55-5
28	(S)- 2-(4-Metilciclohexen-3-en-1-il)-propan-2-ol (α -terpineol)	8.62	1206.092	010482-56-1
29	(Nicotinato de etilo)	8.86	1197.708	000614-18-6
30	2-fenoxi-etanol (Fenoxietanol)	9.08	1197	000122-99-6
31	No identificado	9.08	1261.748	1000190-19-0
32	No identificado	9.39	1265.942	001587-15-1
33	5-Butildihidro-furan-2(3H)-ona (γ -Octalactona)	9.62	1261.886	000104-50-7
34	Ácido nonanoico Ácido pelargónico	9.87	1297.496	000112-05-0
35	No identificado	10.21	1299	031642-67-8
36	No identificado	10.26	1276.480	004314-66-3
37	No identificado	10.27	1270.784	002363-88-4
38	Ciclonon-4-inona	10.64	1297.861	037079-60-0
39	Antranilato de metilo	10.78	1298.007	000134-20-3
40	2-Metoxi-3-(2-propenil)-fenol	10.9	1298.087	001941-12-4
41	Benzoato de butilo	11.06	1298.145	000136-60-7
42	4-Metil-bencidrazida	11.12	1387.619	003290-99-1
43	Hexanoato de hexilo	11.12	1298.109	006378-65-0
44	(Z,E)-2,4-decadienoato de metilo	11.25	1397.077	108965-84-0
45	(E,Z)- 2,4-decadienoato de metilo	11.25	1397	004493-42-9
46	No identificado	11.36	1397.248	007766-37-2

Cuadro 7. Continuación. Componentes del aceite esencial de *Crataegus* spp.

NO.	COMPUESTO	TR	IK	CAS
47	No identificado	11.4	1366.746	013603-44-6
48	Metileugenol	11.42	1363.490	000093-15-2
49	Nicotinato de butilo	11.67	1397.449	006938-06-3
50	No identificado	11.76	1397.449	183311-94-6
51	No identificado	11.79	1397	001931-63-1
52	4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)-2-butanona (Dihidro β -ionona)	11.91	1414.808	017283-81-7
53	No identificado	12	1419.644	003201-26-1
54	No identificado	12.03	1428.696	002368-80-1
55	No identificado	12.03	1397.808	000823-85-8
56	No identificado	12.19	1398.585	000108-52-1
57	4-(2,2,6-Trimetil-7-oxabíclico-[4.1.0]-hept-1-il)-3-buten-2-ona (β -ionona epóxido)	12.53	1496	023267-57-4
58	4-(2,2,6-Trimetil-1-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ol (β -ionol)	12.53	1496.975	022029-76-1
59	No identificado	12.64	1458.778	062338-00-5
60	No identificado	12.64	1497.043	004601-85-8
61	No identificado	12.65	1497.090	013837-12-2
62	No identificado	12.66	1497.094	022516-10-5
63	No identificado	12.94	1479.233	1000146-69-5
64	5,6,7,7a-Tetrahidro-4,4,7a-trimetil-2(4H)-benzofuranona (Dihidroactinidiolide)	13.27	1497.682	015356-74-8
65	No identificado	13.56	1518.537	000102-29-4
66	No identificado	13.57	1519.017	067589-48-4
67	No identificado	13.59	1569.807	067589-48-4
68	No identificado	13.68	1526.144	018979-50-5
69	No identificado	13.71	1596.854	000499-74-1
70	No identificado	14.59	1684.081	103129-99-3
71	No identificado	14.58	1646.996	004413-21-2
72	4-Ciclohexilideno-1-butanol	14.75	1698.837	004441-58-1
73	2,4,4-Trimetil-3-(3-oxobutil)-ciclohex-2-enona (3-oxo-7,8-dihidro- β -ionol)	15.02	1696.819	072008-46-9
74	No identificado	15.75	1660.022	010407-42-8
75	Tetracosano	16.48	1796.533	000646-31-1
76	No identificado	16.89	1908.424	1000298-47-5
77	No identificado	17.06	1896.522	074685-76-0
78	17-Octadecenal	17.56	1797.561	056554-86-0
79	Etalato de dibutilo	17.78	1897.117	000084-74-2
80	n-ácido hexadecanoico Ácido palmítico	17.84	1797.828	000057-10-3
81	Heneicosano	18.95	1898.112	000629-94-7
82	(E) -15-Heptadecenal	19.21	1799.133	1000130-97-9
83	3-Etenil-ciclocteno	19.62	1898.682	002213-60-7
84	Ácido hexadecanoico, butil ester Palmitato de butilo	19.75	1898.793	000111-06-8
85	Hexadecano, 2,6,10,14-tetrametil- Fitano	19.85	1898.878	000638-36-8

TR: Tiempo de Retención; IK: Índice de Kovats.

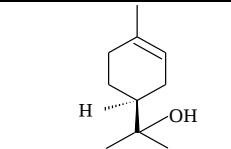
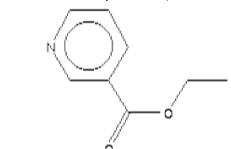
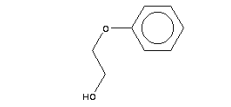
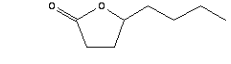
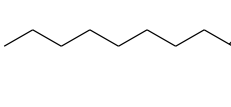
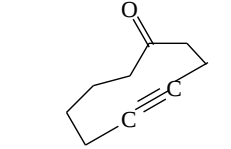
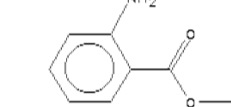
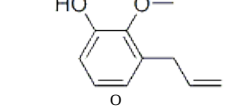
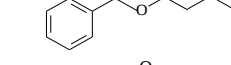
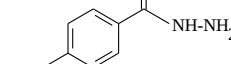
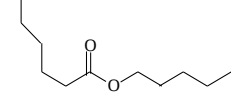
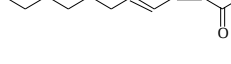
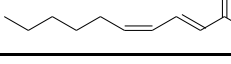
Cuadro 8: Características químicas de los componentes identificados en el aceite esencial de *Crataegus* spp.

NO.	COMPUESTO	GRUPO	FÓRMULA	PM	ACCESIÓN	ESTRUCTURA
1	(E)-2-Hexenal	Aldehído	C ₆ H ₁₀ O	98.14	ACC72	
2	2-Hexenal	Aldehído	C ₆ H ₁₀ O	98.14	ACC55, ATEX06	
3	3-hidroxi-butanoato de metilo	Éster	C ₅ H ₁₀ O ₃	118.13	ATEX05, ATEX02	
5	1-Hexanol (Hexanol)	Alcohol	C ₆ H ₁₄ O	102.17	ACC04, ACC26	
6	Acido 2-metil- butírico	Ácido	C ₅ H ₁₀ O ₂	102.13	ATEX02	
7	2-metil-ciclopenten-2-ona	Cetona	C ₆ H ₈ O	96.13	ACC86	
8	2-Ciclohexenol	Alcohol	C ₆ H ₁₀ O	98.14	ATEX05, ATEX06, ACC100, ACC15, ACC72, ACC04, ACC50	
10	2-Cyclohexenona	Cetona	C ₆ H ₈ O	96.13	ATEX05, ATEX06, ACC86, ACC100, ACC15, ACC04, ACC50, ATEX02	
11	Ácido 2-hidroxi-metil-pentanoato de metilo	Éster	C ₇ H ₁₄ O ₃	146.18	ACC04	
13	2-Cloro- ciclohexanol,	Alcohol	C ₆ H ₁₁ ClO	134.60	ACC50, ATEX06, ACC86, ACC100, ACC50, ACC26, ATEX02	
14	Ácido hexanoico (Ácido caprico)	Ácido	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16	ACC55, ATEX05, ATEX06, ACC86, ACC100, ACC15, ACC72, ACC04, ATEX02	
15	Trans-3-ácido hexenoico	Ácido	C ₆ H ₁₀ O ₂	114.14	ACC100, ACC72, ATEX02	

Cuadro 8: Continuación. Características químicas de los componentes identificados en el aceite esencial de *Crataegus* spp.

NO.	COMPUESTO	GRUPO	FÓRMULA	PM	ACCESIÓN	ESTRUCTURA
16	5-etildihidro-2(3H)-Furanona, (γ -Caprolactona)	Lactona	$C_6H_{10}O_2$	114.14	ATEX05, ACC86, ACC04, ATEX02	
19	6-Metil-2-(2-oxiranil)-5-hepten-2-ol	Oxirano	$C_{10}H_{18}O_2$	170.24	ACC72	
20	2,6-Dimetil-2,7-octadien-6-ol (Linalol)	monoterpeno	$C_{10}H_{18}O$	154.24	ACC50, ACC26	
21	Ácido heptanoico (Ácido enántico)	Ácido	$C_7H_{14}O_2$	130.19	ACC100, ACC15, ACC72, ACC04, ATEX02	
22	Ciclohepteno	Hidrocarburo	C_7H_{12}	96.17	ATEX06	
23	2-Metil-2-vinil-(α -hidroxi-isopropil)-tetrahidrofurano (Óxido de linalool)	monoterpeno	$C_{10}H_{18}O_2$	170.24	ACC72	
24	(R)-4-Isopropil-1-metil-1-ciclohexen-3-ol ((R) 4-Terpinenol)	Monoterpeno	$C_{10}H_{18}O$	154.24	ACC55	
25	(S)-4-Isopropil-1-metil-1-ciclohexen-3-ol (S) 4-Terpineol)	Monoterpeno	$C_{10}H_{18}O$	154.25	ACC72	
26	Ácido Octanoico (Ácido caprílico)	Ácido	$C_8H_{16}O_2$	144.21	ATEX05, ACC100, ACC15, ACC72, ACC04, ATEX02	
27	(R) 2-(4-Metilciclohexen-3-en-1-il)-propan-2-ol (R- α -terpineol)	Monoterpeno	$C_{10}H_{18}O$	154.24	ACC55, ATEX05, ACC50, ACC26, ATEX02	

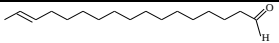
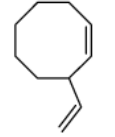
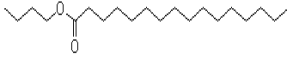
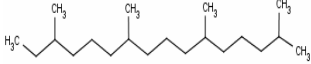
Cuadro 8: Continuación. Características químicas de los componentes identificados en el aceite esencial de *Crataegus* spp.

NO.	COMPUESTO	GRUPO	FÓRMULA	PM	ACCESIÓN	ESTRUCTURA
28	(S)- 2-(4-Metilciclohexen-3-en-1-il)-propan-2-ol (α -terpineol)	Monoterpeno	C ₁₀ H ₁₈ O	154.25	ACC100,	
29	(Nicotinato de etilo)	Éster	C ₈ H ₉ NO ₂	151.16	ATEX06	
30	2-fenoxi-etanol (Fenoxietanol)	Alcohol	C ₈ H ₁₀ O ₂	138.16	ACC15, ATEX02	
33	5-Butildihidro-furan-2(3H)-ona (γ -Octalactona)	lactona	C ₈ H ₁₄ O ₂	142.19	ATEX02	
34	Ácido nonanoico Ácido pelargónico	Ácido	C ₉ H ₁₈ O ₂	158.24	ACC55, ACC100, ACC15, ACC04, ACC26, ATEX02	
38	Ciclonon-4-inona	cetona	C ₉ H ₁₂ O	136.19	ATEX06, ATEX02	
39	Antranilato de metilo	Éster	C ₈ H ₉ NO ₂	151.16	ACC55, ATEX06, ACC100	
40	2-Metoxi-3-(2-propenil)-fenol	Fenilpropeno	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	176.18	ACC50, ACC26	
41	Benzoato de butilo	Éster	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	178.22	ACC55	
42	4-Metil-bencidrazida	Azida	C ₈ H ₁₀ ON ₂	174.23	ATEX05	
43	Hexanoato de hexilo	Éster	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	200.32	ACC04	
44	(Z,E)-2,4-decadienoato de metilo	Éster	C ₁₁ H ₁₈ O ₂	182.26	ATEX05	
45	(E,Z)- 2,4-decadienoato de metilo	Éster	C ₁₁ H ₁₈ O ₂	182.26	ACC100, ATEX02	

Cuadro 8: Continuación. Características químicas de los componentes identificados en el aceite esencial de *Crataegus* spp.

NO.	COMPUESTO	GRUPO	FÓRMULA	PM	ACCESIÓN	ESTRUCTURA
48	Metileugenol	Fenilpropeno	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	178.22	ACC50	
49	Nicotinato de butilo	Éster	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	179.21	ACC55, ATEX06, ACC50, ACC26	
52	4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)-2-butanona (Dihidro β-ionona)	Cetona	C ₁₃ H ₂₂ O	194.31	ACC55, ACC50, ACC26	
57	4-(2,2,6-Trimetil-7-oxabíclico-[4.1.0]-hept-1-il)-3-buten-2-ona (β-ionona epóxido)	Epóxido	C ₁₃ H ₂₀ O ₂	208.3	ACC15, ACC50	
58	4-(2,2,6-Trimetil-1-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ol (β-ionol)	Alcohol	C ₁₃ H ₂₂ O	194.31	ACC55, ACC26	
64	5,6,7,7a-Tetrahidro-4,4,7a-trimetil-2(4H)-benzofuranona (Dihidroactinidiolide)	Lactona	C ₁₁ H ₁₆ O ₂	180.24	ACC55, ATEX06, ACC15, ACC72, ACC04, ACC26	
72	4-Ciclohexilideno-1-butanol 2,4,4-Trimetil-3-(3-oxobutil)-ciclohex-2-enona	Alcohol	C ₁₀ H ₁₈ O	154.24	ACC04	
73	(3-oxo-7,8-dihidro-β-ionol)	Norisoprenoide	C ₁₃ H ₂₀ O	208.29	ACC55, ACC26	
75	Tetracosano	Hidrocarburo	C ₂₄ H ₅₀	338.65	ACC86	
78	17-Octadecenal	Aldehído	C ₁₈ H ₃₄ O	266.46	ACC86	
79	Ftalato de dibutilo	Éster	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	278.34	ACC50	
80	n-ácido hexadecanoico Ácido palmítico	Ácido	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	256.42	ACC86	
81	Heneicosano	Hidrocarburo	C ₂₁ H ₄₄	296.57	ACC50	

Cuadro 8: Continuación. Características químicas de los componentes identificados en el aceite esencial de *Crataegus* spp.

NO.	COMPUESTO	GRUPO	FÓRMULA	PM	ACCESIÓN	ESTRUCTURA
82	(E) -15-Heptadecenal	Aldehído	C ₁₇ H ₃₂ O	252.43	ACC86	
83	3-Etenil-cicloocteno	Hidrocarburo	C ₁₀ H ₁₆	136.23	ACC50	
84	Ácido hexadecanoico, butil ester Palmitato de butilo	Éster	C ₂₀ H ₄₀ O ₂	312.53	ACC50	
85	Hexadecano, 2,6,10,14-tetrametil-Fitano	diterpenoide	C ₂₀ H ₄₂	282.54	ACC50	

PM: Peso Molecular.

Entre los compuestos identificados destacan principalmente los ésteres (21 %), seguidos de terpenos (15 %) y ácidos orgánicos (13 %). Los ésteres constituyen uno de los grupos más grandes e importantes que constituyen los aromas, en general se consideran agradables al olfato. A los terpenos se les atribuye la capacidad de repeler insectos, como inhibidores de crecimiento e importantes productores de ATP (Adenosintrifosfato) en la respiración ya que son sustancias muy oxidables (Samejo *et al.*, 2010). Los ácidos carboxílicos (acético, hexanoico, octanoico y decanoico) son importantes a nivel aromático porque son las bases de los ésteres frutados generalmente juzgados como agradables (Fregoni, 1999). La presencia de las mezclas de metabolitos volátiles de los aceites esenciales obtenidos del fruto de tejocote, agrupados químicamente justifica en gran parte el aroma perceptible, penetrante y agradable al ser humano.

En el Cuadro 9 se presenta la agrupación por grupo funcional de los metabolitos identificados en los aceites esenciales en las accesiones de los frutos de tejocote. La diversidad estructural de grupos químicos presentes en los aceites esenciales de las accesiones de estudio, coincide con lo reportado por Hadjimitsi y Zabetakis

(2005), quienes encontraron metabolitos del tipo aldehído, cetona, alcohol, éster y monoterpenos, en su estudio con jalea de *Crataegus azarolus*, comercialmente importante en Chipre (unión europea).

Cuadro 9. Componentes del aceite esencial de tejocote agrupados por su funcionalidad química.

Grupo	No. de compuestos
Ésteres	11
Ácidos	7
Monoterpenos	6
Cetonas	4
Aldehídos	4
Alcoholes	6
Lactona	3
Hidrocarburos	4
Fenilpropeno	2
Epóxido	1
Norisopreno	1
Diterpeno	1
Azida	1
Oxirano	1

Como ejemplo del perfil de metabolitos presentes en las diversas accesiones de fruto, se presenta el cromatograma únicamente de la accesión 86 (Figura 11), se observa la ubicación (TR) de los componentes (10 picos) principales, los datos espectrales, su peso molecular y estructura se presentan en el Cuadro 10; así mismo, se presenta el espectro de masas correspondiente al ácido hexanoico, compuesto de mayor abundancia en la accesión mencionada (Figura 12). Los cromatogramas de las accesiones restantes se muestran en los ANEXOS 1,4,7,10,13,16,19,22, 25,28,31, así como y los espectros de masas, en donde se puede observar el patrón de fragmentación del compuesto mayoritario correspondiente a cada accesión (Anexos 3,6,9,12,15,18,21,24,27,30 y 31).

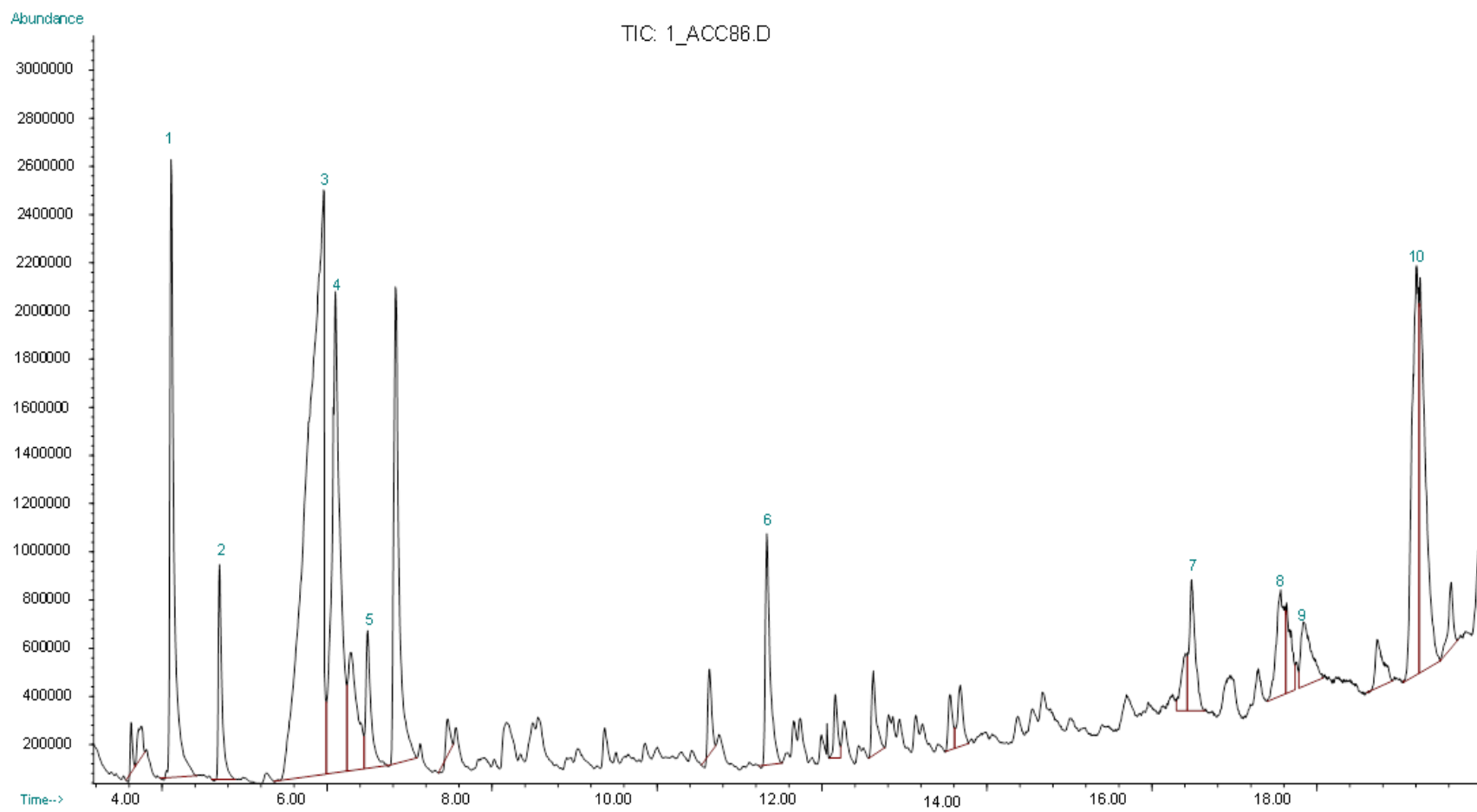


Figura 11: Cromatograma del aceite esencial de *Crataegus mexicana* (ACC86).

Cuadro 10. Componentes del aceite esencial de *Crataegus mexicana* (ACC86).

ACC86									
PK	TR	Compuesto	CAS	% I	CR (%)	IK	FORMULA	PM	ESTRUCTURA
1	4.11	2-metil-ciclopenten-2-ona	001120-73-6	80	7.52	897.3750	C ₆ H ₈ O	96.13	
2	4.69	2-Ciclohexenona	000930-68-7	91	9.9	897.805556	C ₆ H ₈ O	96.13	
3	5.96	Ácido hexanoico (Ácido caprico)	000142-62-1	83	28.98	997.848684	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16	
4	6.11	2-Cloro- ciclohexanol	001561-86-0	93	11.8	998.0000	C ₆ H ₁₁ ClO	134.604	
5	6.49	5-etildihidro-2(3H)-Furanona, (γ-Caprolactona)	000695-06-7	80	2.17	998.217105	C ₆ H ₁₀ O ₂	114.1424	
6	11.33	No identificado	007766-37-2	38	3.36	1397.217054			
7	16.48	Tetracosano	000646-31-1	95	2.39	1796.533334	C ₂₄ H ₅₀	338.6538	
8	17.56	17-Octadecenal	056554-86-0	94	4.55	1797.561904	C ₁₈ H ₃₄ O	266.4620	
9	17.84	n-ácido hexadecanoico	000057-10-3	99	2.25	1797.82857	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	256.4241	
10	19.21	E-15-Heptadecenal	1000130-97-9	95	14.99	1799.13333	C ₁₇ H ₃₂ O	252.43538	

%I: Porcentaje de identidad; CR: Cantidad Relativa en porcentaje; IK: Índice de Kovats; PM: Peso Molecular.

* El número de pico (PK) corresponde a cada componente del aceite esencial.

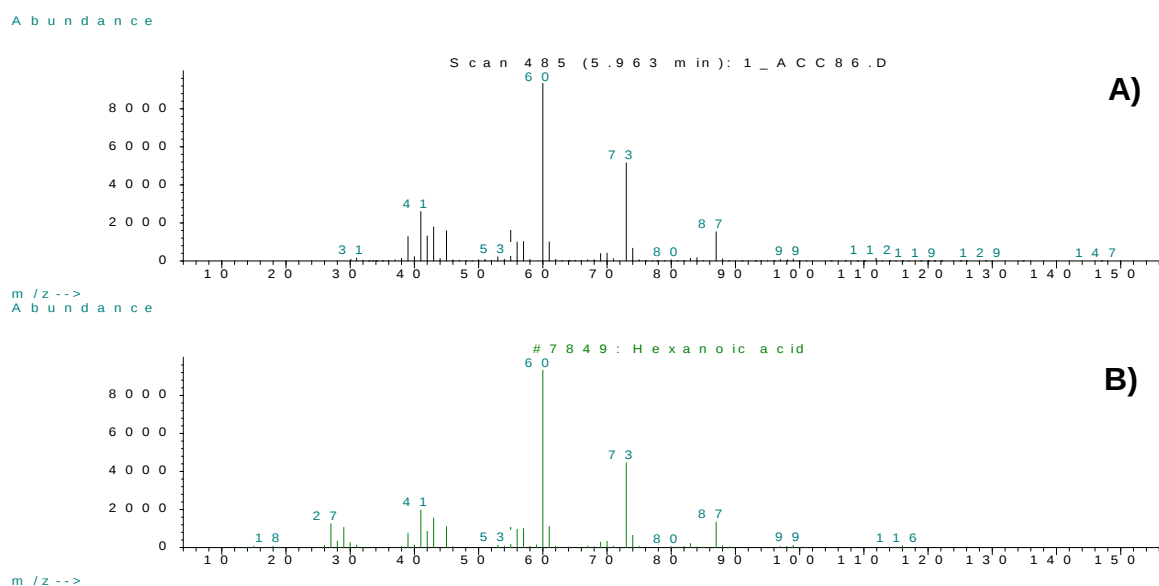


Figura 12: Comparación de espectros de masas del ácido hexanoico presente en la ACC86: A) espectro obtenido del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro obtenido de la biblioteca NIST02. Los resultados obtenidos por cromatografía de gases y espectrometría de masas

muestran cierta concordancia con el perfil del aceite esencial de las accesiones en la placa cromatográfica; las accesiones 26, 50 y 55 coinciden con la presencia de los compuestos R- α -Terpineol, nicotinato de butilo y dihidro- β -ionona, por otro lado las accesiones 100, 15, 72 y 04 tienen en común al 2-clorociclohexanol, ácido hexanoico, ácido heptanoico, ácido octanoico y ácido nonanoico. Cabe destacar que los ácidos (hexanoico, heptanoico, octanoico y nonanoico) son los de mayor presencia y abundancia en algunas accesiones: 86, 100, 15, 72, 04, ATEX02, ATEX05 y ATEX06; esto último, no está relacionado con el tamaño, ni con su origen, ya que son originarias de los estados de Puebla y Chiapas. En el Cuadro 11 se presenta la comparación de las accesiones de estudio de acuerdo con su especie, origen, tamaño de fruto y los componentes identificados en cada una de ellas.

Cuadro 11: Compuestos identificados en las accesiones de estudio.

Accesión	Especie	Origen	Componentes identificados	Tamaño de fruto
86	<i>C. mexicana</i>	Puebla	2-metil-ciclopenten-2-ona; 2-Ciclohexenona; 2-Cloro-ciclohexanol; Ácido hexanoico; 2(3H)-Furanone, 5-etilidihidro-; Tetracosano; 17-Octadecenal; Ácido palmítico; (E) -15-Heptadecenal;	Grande
100	<i>C. mexicana</i>	Puebla	2-Ciclohexenol; 2-Ciclohexenona; 2-Cloro- ciclohexanol; Ácido hexanoico; Trans-3-ácido hexenoico; Ácido enántico; Ácido caprílico; α -terpineol; Ácido pelargónico; Antranilato de metilo; (E,Z)- 2,4-decadienoato de metilo;	Grande
15	<i>C. aurescens</i>	Chiapas	2-Ciclohexenol; 2-Ciclohexenona; Ácido hexanoico; Ácido enántico; Ácido caprílico; Fenoxietanol; Ácido pelargónico; β -ionona epóxido; Dihidroactinidiolide;	Mediano
72	<i>C. baroussana</i>	Chiapas	(E)-2-Hexenal; 2-Ciclohexenol; Ácido hexanoico; Trans-3-ácido hexenoico; 6-Metil-2-(2-oxiranil)-5-hepten-2-ol; Ácido enántico; Óxido de linalool; (S) 4-Terpineol; Ácido caprílico; Dihidroactinidiolide;	Chico
04	<i>C. sulfured</i>	Chiapas	1-Hexanol; 2-Ciclohexenol; 2-Ciclohexenona; Ácido 2-hidroxi-metil-pentanoato de metilo; Ácido hexanoico; 2(3H)-Furanone, 5-etilidihidro-; Ácido enántico; Ácido caprílico, Ácido pelargónico; Hexanoato de hexilo; Dihidroactinidiolide; 4-Ciclohexilideno-1-butanol;	Mediano
55	<i>C. mexicana</i>	Puebla	2-Hexenal; Ácido hexanoico; (R) 4-Terpinenol; R- α -terpineol; Antranilato de metilo; Benzoato de butilo; Nicotinato de butilo; Dihidro β -ionona; β -ionol; Dihidroactinidiolide; 3-oxo-7,8-dihidro- β -ionol;	Grande

Cuadro 11: Continuación. Compuestos identificados en las accesiones de estudio.

Accesión	Especie	Origen	Componentes identificados	Tamaño de fruto
50	<i>C. greggiana</i>	México	2-Ciclohexenol; 2-Ciclohexenona; 2-Cloro- ciclohexanol; linalol; R- α -terpineol; 2-Metoxi-3-(2-propenil)-fenol; Metileugenol; Nicotinato de butilo; Dihidro β -ionona; β -ionona epóxido; Ftalato de dibutilo; Heneicosano; 3-Etenil-ciclocteno; Palmitato de butilo; Fitano.	grande
26	<i>C. gracillior</i>	Puebla	1-Hexanol; 2-Cloro- ciclohexanol; linalol; R- α -terpineol; Ácido pelargónico; 2-Metoxi-3-(2-propenil)-fenol; Nicotinato de butilo; Dihidro β -ionona; β -ionol; Dihidroactinidiolide; 3-oxo-7,8-dihidro- β -ionol;	Chico
ATEX02	<i>C. aurescens</i>	Puebla	3-hidroxi-butanoato de metilo; Acido 2-metil- butírico; 2-Ciclohexenona; 2-Cloro- ciclohexanol; Ácido hexanoico; 2(3H)-Furanone, 5-etilidihidro-; Ácido enántico; Ácido caprilico; R- α -terpineol; Fenoxietanol; γ -Octalactona; Ácido pelargónico; Ciclonon-4-inona; (E,Z)- 2,4-decadienoato de metilo;	grande
ATEX05	<i>C. rosei</i>	Puebla	3-hidroxi-butanoato de metilo; 2-Ciclohexenol; 2-Ciclohexenona; Ácido hexanoico; 2(3H)-Furanone, 5-etilidihidro-; Ácido caprilico; R- α -terpineol; 4-Metil-bencidrazida; (Z,E)-2,4-decadienoato de metilo;	grande
ATEX06	-	Puebla	2-Hexenal; 2-Ciclohexenol; 2-Ciclohexenona; 2-Cloro-ciclohexanol; Ácido hexanoico; Trans-3-ácido hexenoico; Ciclohepteno; Nicotinato de etilo; Ciclonon-4-inona; Antranilato de metilo; Nicotinato de butilo; Dihidroactinidiolide;	grande

No se encuentra documentado el perfil de aceites esenciales o volátiles en las flores y frutos de tejocote que se localizan en México. A nivel mundial el único estudio existente es el realizado por Kovaleva *et al.* (2009). Al respecto, los autores encontraron en su estudio realizado con flores de tres especies norteamericanas de *Crataegus* (*robersoniana*, *flabellata* y *jackii*) la presencia de óxido de linalool, (R)- α -terpineol, heneicosano y tetracosano; dichos compuestos coinciden con los detectados en el presente estudio, en las accesiones 72, 55, 50, 26, 86, ATEX05, ATEX02; lo cual resulta de gran interés si compara el origen de las especies estudiadas por Kovaleva *et al.* (2009), las cuales son norteamericanas, con las especies mexicanas del presente estudio; debido a lo anterior se puede inferir que el origen no influye en el perfil químico del aceite esencial de *Crataegus*. En el Cuadro 12, se presentan los componentes en común en las especies de estudio, así como sus respectivas cantidades relativas expresadas en porcentaje.

Cabe señalar la diferencia morfológica del fruto de las especies estudiadas por Kovaleva *et al.* (2009), *C. robersoniana*, *C. flabellata* y *C. jackii*, las cuales presentan fruto pequeño a mediano de color rojo a diferencia de las accesiones 55, 50, 26, 86, ATEX05, ATEX02 del presente estudio, las cuales presentan fruto de color amarillo y de tamaño de mediano a grande; por lo que puede inferirse que la síntesis de los compuesto coincidentes, no está relacionada con la morfología de la especie, pero sí con el ambiente donde se desarrollan estas. En algunos frutos la cantidad de terpenoles aumenta cuando están más expuestos al sol, como ejemplo, viñedos con poca insolación tienen un aroma menos perceptible (Reynolds y Wardle, 1997).

Cuadro 12. Componentes en común entre las especies de estudio y su cantidad relativa expresada en porcentaje.

		PUEBLA							CHIAPAS			EDO. MEX.
NO.	COMPUESTO	ACC86	ACC100	ACC55	ACC26	ATEX02	ATEX05	ATEX06	ACC15	ACC72	ACC04	ACC50
1	(E)-2-Hexenal	-	-	-	-	-	-	-	-	0.06	-	-
2	2-Hexenal	-	-	0.29	-	-	-	4.08	-	-	-	-
3	3-hidroxibutanoato de metilo	-	-	-	-	0.79	1.21	-	-	-	-	-
4	No identificado	-	-	-	-	-	-	-	1.62	2.62	-	-
5	1-Hexanol (Hexanol)	-	-	-	0.40	-	-	-	-	-	3.23	-
6	Acido 2-metil- butírico	-	-	-	-	0.50	-	-	-	-	-	-
7	2-metil-ciclopenten-2-ona	7.52	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
8	2-Ciclohexenol	-	2.42	-	-	-	4.35	8.31	2.19	1.62	1.46	2.60
9	No identificado	-	-	-	-	2.31	-	-	-	-	-	-
10	2-Cyclohexenona	9.90	0.74	-	-	1.22	2.28	5.08	1.07	-	0.44	1.08
11	Ácido 2-hidroxi-metil-pentanoato de metilo	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.77	-
12	No identificado	-	-	-	6.01	4.43	-	-	-	-	-	6.03
13	2-Cloro- ciclohexanol,	11.80	24.7	5.27	8.23	9.44	-	15.01	-	-	-	16.74
14	Ácido hexanoico (Ácido caprico)	28.98	16.44	0.51	-	37.45	64.49	9.14	10.21	41.22	23.04	-
15	Trans-3-ácido hexenoico	-	2.05	-	-	1.63	-	-	-	1.5	-	-
16	5-Etildihidro-2(3H)- furanona, (γ-Caprolactona)	2.17	-	-	-	17.59	8.62	-	-	-	6.82	-
17	No identificado	-	-	-	-	-	-	-	1.76	-	-	-
18	No identificado	-	-	3.47	-	-	2.31	1.39	-	-	-	-
19	6-Metil-2-(2-oxiranil)-5-hepten-2-ol	-	-	-	-	-	-	-	-	3.61	-	-
20	2,6-Dimetil-2,7-octadien-6-ol (Linalol)	-	-	-	1.15	-	-	-	-	-	-	1.52
21	Ácido heptanoico (Ácido enántico)	-	32.2	-	-	1.17	-	-	22.49	1.35	1.91	-
22	Ciclohepteno	-	-	-	-	-	-	1.16	-	-	-	-
23	2-Metil-2-vinil-(α-hidroxi-isopropil)-tetrahidrofurano (Óxido de linalool)	-	-	-	-	-	-	-	-	3.47	-	-
24	(R)-4-Isopropil-1-metil-1-cyclohexen-3-ol ((R) 4-Terpinenol)	-	-	0.67	-	-	-	-	-	-	-	-
25	(S)-4-Isopropil-1-metil-1-cyclohexen-3-ol ((S) 4-Terpineol)	-	-	-	-	-	-	-	-	1.71	-	-
26	Ácido Octanoico (Ácido caprílico)	-	2.18	-	-	1.96	2.90	-	15.26	4.21	10.97	-
27	(R) 2-(4-Metilciclohexen-3-en-1-il)-propan-2-ol (R-α-terpineol)	-	-	1.47	1.74	3.34	1.73	-	-	-	-	2.39

Cuadro 12. Continuación. Componentes en común entre las especies de estudio y su cantidad relativa expresada en porcentaje.

NO.	COMPUESTO	PUEBLA							CHIAPAS			EDO. MEX.
		ACC86	ACC100	ACC55	ACC26	ATEX02	ATEX05	ATEX06	ACC15	ACC72	ACC04	ACC50
28	(S)- 2-(4-Metilciclohexen-3-en-1-il)-propan-2-ol (α -terpineol)	-	1.28	-	-	-	-	-	-	-	-	-
29	(Nicotinato de etilo)	-	-	-	-	-	-	2.16	-	-	-	-
30	2-fenoxi-etanol (Fenoxietanol)	-	-	-	-	0.76	-	-	0.89	-	-	-
31	No identificado	-	-	-	-	-	2.31	-	-	-	-	-
32	No identificado	-	2.64	-	-	3.23	-	-	-	-	-	-
33	5-Butildihidro-furan-2(3H)-ona (γ -Octalactona)	-	-	-	-	0.26	-	-	-	-	-	-
34	Ácido nonanoico (Ácido pelargónico)	-	0.26	2.44	1.19	0.44	-	-	10.59	-	3.93	-
35	No identificado	-	-	-	-	-	-	-	1.28	-	-	-
36	No identificado	-	-	-	-	-	-	2.45	-	-	-	-
37	No identificado	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2.51
38	Ciclonon-4-inona	-	-	-	-	0.77	-	1.03	-	-	-	-
39	Antranilato de metilo	-	0.53	0.38	-	-	-	3.33	-	-	-	-
40	2-Metoxi-3-(2-propenil)-fenol	-	-	-	2.28	-	-	-	-	-	-	2.26
41	Benzoato de butilo	-	-	0.43	-	-	-	-	-	-	-	-
42	4-Metil-bencidrazida	-	-	-	-	-	1.13	-	-	-	-	-
43	Hexanoato de hexilo	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.60	-
44	(Z,E)-2,4-decadienoato de metilo	-	-	-	-	-	1.17	-	-	-	-	-
45	(E,Z)- 2,4-decadienoato de metilo	-	0.88	-	-	0.50	-	-	-	-	-	-
46	No identificado	3.36	-	6.53	7.97	-	-	-	-	-	-	-
47	No identificado	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.12	-
48	Metileugenol	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.67
49	Nicotinato de butilo	-	-	4.12	6.15	-	-	10.52	-	-	-	10.79
50	No identificado	-	-	2.17	-	-	-	-	-	-	-	-
51	No identificado	-	-	-	-	-	-	-	1.25	-	-	-
52	4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)-2-butanona (Dihidro β -ionona)	-	-	1.5	1.29	-	-	-	-	-	-	0.39
53	No identificado	-	-	-	-	-	-	2.58	-	-	-	-
54	No identificado	-	-	5.51	-	-	-	-	-	-	-	-
55	No identificado	-	-	-	2.75	-	-	-	-	-	-	-
56	No identificado	-	-	-	2.18	-	-	-	-	-	-	-
57	4-(2,2,6-Trimetil-7-oxabicyclo-[4.1.0]-hept-1-il)-3-buten-2-ona (β -ionona epóxido)	-	-	-	-	-	-	-	1.54	-	-	0.65

Cuadro 12. Continuación. Componentes en común entre las especies de estudio y su cantidad relativa expresada en porcentaje.

NO.	COMPUESTO	PUEBLA							CHIAPAS			EDO. MEX.
		ACC86	ACC100	ACC55	ACC26	ATEX02	ATEX05	ATEX06	ACC15	ACC72	ACC04	ACC50
58	4-(2,2,6-Trimetil-1-ciclohehexen-1-il)-3-buten-2-ol (β -ionol)	-	-	1.16	1.25	-	-	-	-	-	-	-
59	No identificado	-	-	-	-	-	-	-	-	4.82	2.57	-
60	No identificado	-	-	-	2.36	-	-	-	-	-	-	-
61	No identificado	-	-	2.91	-	-	-	-	-	-	-	-
62	No identificado	-	-	-	-	-	-	-	2.44	-	-	-
63	No identificado	-	-	-	-	-	-	2.16	-	-	-	-
64	5,6,7,7a-Tetrahidro-4,4,7a-trimetil-2(4H)-benzofuranona (Dihidroactinidiolide)	-	-	3.63	2.04	-	-	2.07	2.36	0.94	1.33	-
65	No identificado	-	-	-	-	-	-	3.31	-	-	-	-
66	No identificado	-	-	-	-	-	-	-	-	1.93	-	-
67	No identificado	-	-	3.99	-	-	-	-	-	-	-	-
68	No identificado	-	-	-	-	-	-	3.68	-	-	-	-
69	No identificado	-	-	5.43	-	-	-	-	-	-	-	-
70	No identificado	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2.27
71	No identificado	-	-	-	3.03	-	-	-	-	-	-	-
72	4-Ciclohexilideno-1-butanol	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.60	-
73	2,4,4-Trimetil-3-(3-oxobutil)-ciclohex-2-enona (3-oxo-7,8-dihidro- β -ionol)	-	-	0.61	0.82	-	-	-	-	-	-	-
74	No identificado	-	-	-	-	-	-	-	-	2.19	-	-
75	Tetracosano	2.39	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
76	No identificado	-	-	-	25.54	-	-	-	-	-	-	-
77	No identificado	-	-	-	-	-	-	-	-	-	14.56	36.16
78	17-Octadecenal	4.55	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
79	Ftalato de dibutilo	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.88
80	n-ácido hexadecanoico (Ácido palmítico)	2.25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
81	Heneicosano	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.97
82	(E) -15-Heptadecenal	14.99	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
83	3-Etenil-ciclocteno	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.94
84	Ácido hexadecanoico, butil ester (Palmitato de butilo)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.41
85	Hexadecano, 2,6,10,14-tetrametil-Fitano	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.1
NO. DE COMPONENTES TOTALES		10	14	20	19	19	11	17	14	15	15	50

En un estudio realizado por Hadjimitsi y Zabetakis (2005) identificaron los componentes volátiles en la jalea de *Crataegus azarolus*, los autores reportan tres compuestos similares a los obtenidos en el presente estudio, como son: óxido de linalol, linalol y (R)- α -terpineol; los cuales a pesar del procesado del fruto no sufrieron degradación en la obtención de la jalea.

La presencia de la diversidad estructural en la composición del aceite esencial en el fruto de tejocote justifica en parte la actividad biológica que presenta el género; se encuentra documentada la actividad antimicrobiana de extracto de fruto de *Crategus oxycanta* L. contra bacterias grampositivas (*Staphylococcus aureus*) debido a la presencia de flavonoides como miricetina-3,5,7,3,4',5'-hexahidroxiflavona, naringenina y pinocembrina (Kostic *et al.*, 2012). Por otra parte, la actividad antibacteriana del aceite esencial de mejorana, el cual contiene terpinen-4-ol, linalool y acetato de linalool mostró mejor actividad antibacteriana que el aceite de tomillo, limón y salvia (Tserennadmid *et al.*, 2010).

Aceites esenciales como marcadores quimitaxonómicos

Por otra parte, compuestos identificados en el presente estudio podrían contribuir como marcadores taxonómicos para la quimiotaxonomía del género *Crategus*, tal es el caso del Fitano (2,6,10,14-tetrametilhexadecano), un diterpenoide, que debido a su origen biosintético y su característica de isoprenoide, se utiliza como marcador natural en la química de material de espacio exterior y la geoquímica orgánica (Samejo *et al.*, 2010). Al respecto, Usano *et al.* (2014) afirman que el

origen geográfico del material vegetal tiene una relevancia significativa con respecto al quimiotipo y su respuesta a factores abióticos; afirma que es necesario llevar a cabo estudios de seguimiento fenológico a nivel de planta bajo diferentes condiciones para establecer la configuración de los perfiles fitoquímicos de interés.

Importancia farmacológica

Diversas especies de *Crataegus* se utilizan en la medicina tradicional mexicana, en otros países se usan en el tratamiento de varias enfermedades respiratorias (gripe, tos y asma); como tónico cardíaco, diurético, para el control de la formación de venas varicosas, de peso y colesterol e incluso para el control de diabetes (Martínez, 1967).

Por primera vez en México, Arrieta *et al.* (2010) estudiaron el efecto relajante del extracto de hojas de *Crataegus mexicana* en el musculo tráqueal de conejillos de indias (cobaya), mediante el uso de anillos traqueales aislados, donde probaron tres extractos: hexánico, metanólico y de diclorometano, siendo una fracción del extracto hexánico la que mostró un efecto relajante positivo; sin embargo, los autores mencionan la necesidad de profundizar en los estudios para identificar los compuestos bioactivos que contribuyen a los efectos relajantes de *C. mexicana*, y conocer los mecanismos de acción de estos metabolitos.

En el presente estudio se identificó entre los diversos componentes del aceite esencial de tejocote a α -terpineol, al respecto Hassan *et al.* (2010) reportan que α -

terpineol inhibe el crecimiento de células tumorales a través de un mecanismo que implica la inhibición de la ruta de NF-kappaB (factor nuclear kB). Así mismo, Held *et al.* (2007) encontraron que α -terpineol es un potente inhibidor de la producción de superóxidos, así como también se ha demostrado que tiene propiedades antifúngicas y antibacterianas (Pitarokili *et al.*, 2002; Kotan *et al.*, 2007). Otro metabolito presente en el aceite esencial de tejocote es metileugenol, derivado del eugenol (fenilpropanoide), el cual presenta actividad anestésica, anticonvulsiva, hipotérmica y miorrelajante (Baldovino, 1994.) La presencia de diferentes compuestos y la actividad sinérgica entre ellos, podrían también justificar las propiedades medicinales atribuidas al fruto de tejocote desde tiempos prehispánicos.

Importancia ecológica

Muchos de los compuestos identificados como son: ácido hexanoico; 2-ciclohexenona; γ -caprolactona; ácido-2-metil butírico; tetracosano; ácido heptanoico; ácido octanoico; 2-ciclohexenol, (R)-terpineol; antranilato de metilo; formiato de hexilo; fenoxietanol y dihidroactinidiolide, no solo contribuyen al aroma tan peculiar del tejocote, también tienen gran importancia ecológica durante su desarrollo, ya que son compuestos utilizados en sistemas de comunicación por especies como dípteros, himenópteros, thysanópteros coleópteros, chrysomélidos, lepidópteros y muchas otras especies de insectos plaga o insectos polinizadores y depredadores. La síntesis de los compuestos mencionados anteriormente responde a la necesidad de ciertas funciones ecológicas como atrayentes de

polinizadores, dispersores de semillas y polen, protección contra herbívoros y alelopatía, debido a ello, se pueden encontrar los compuestos mencionados relacionados a otras especies vegetales, en el Cuadro 13 se cita algunas de las especies vegetales donde se han identificado.

Los aceites esenciales también tienen un importante potencial como herbicidas, su uso para el control de malezas en la agricultura orgánica parece prometedor, a pesar de que estos herbicidas naturales actúan muy rápidamente y su eficacia está limitada por su rápida volatilización, pero tomando en cuenta la presencia de diversos compuestos como los ésteres, alcoholes y ácidos, confieren al aceite esencial de tejocote una excelente alternativa para el manejo y control de malezas de manera amigable con el ambiente.

El presente estudio realizado representa un parteaguas hacia nuevas investigaciones en diferentes ramas, desde aspectos farmacológicos hasta aspectos agronómicos en cuanto a control natural de plagas.

Cuadro 13. Compuestos volátiles identificados en *Crataegus* spp. y presentes en otras especies vegetales.

NO.	COMPUESTO	ESPECIE CONSTITUYENTE	REFERENCIA
1	(E)-2-Hexenal	<i>Phyllanthus acidus</i> (grocella); <i>Psidium guajava</i> (guayaba); <i>Laurus nobilis</i> (Laurel); <i>Musa sapientum</i> (plátano)	Pino <i>et al.</i> , 2008; Quijano y Pino, 2007a; Quijano y Pino, 2007b; Pino y Roncal, 2009
3	3-hidroxibutanoato de metilo	<i>Ananas comosus</i> (piña)	Sinuco, 2004
5	1-Hexanol (Hexanol)	<i>Psidium guajava</i> (guayaba); <i>Laurus nobilis</i> (Laurel); <i>Musa sapientum</i> (plátano)	Malo <i>et al.</i> , 2005; Quijano y Pino, 2007a; Quijano y Pino, 2007b; Pino y Roncal, 2009
14	Ácido hexanoico (Ácido caprico)	<i>Ananas comosus</i> (piña) <i>Psidium guajava</i> (guayaba); <i>Musa sapientum</i> (plátano)	Sinuco, 2004; Quijano y Pino, 2007a; Pino y Roncal, 2009

Cuadro 13. Continuación. Compuestos volátiles identificados en *Crataegus* spp. y presentes en otras especies vegetales.

NO.	COMPUESTO	ESPECIE CONSTITUYENTE	REFERENCIA
20	2,6-Dimetil-2,7-octadien-6-ol (Linalol)	<i>Vitis vinífera</i> (uva), <i>C. opaca</i> (tejocote), <i>C. aestivalis</i> (tejocote), <i>C. rufula</i> (tejocote), <i>C. jackii</i> (tejocote), <i>C. robesoniana</i> (tejocote), <i>C. flabellata</i> (tejocote), <i>C. azarolus</i> (tejocote), <i>Origanum vulgare</i> (orégano), <i>Helicteres guazumifolia</i> (coralillo), <i>Ocimum sp.</i> (albahaca), <i>Aniba rosaeodora</i> (palo de rosa) <i>Psidium guajava</i> (guayaba); <i>Laurus nobilis</i> (Laurel); <i>Cymbopogon proximus</i> (zacate limón); <i>Litchi chinensis</i> (Litchi); <i>Citrus sinensis</i> (natanja); <i>Daucus carota</i> (zanahoria)	Catania <i>et al.</i> , 2007; Horvat y Chapman, 2007; Kovaleva <i>et al.</i> , 2009; Hadjimitsi y Zabetakis, 2005; Ordanza y Sanchez, 1990; Ordaz <i>et al.</i> , 2011; Oliveira <i>et al.</i> , 2013; Maia <i>et al.</i> , 2004; Quijano y Pino, 2007a; Quijano y Pino, 2007b; Selim, 2011; Pino <i>et al.</i> , 2007; Céron y Cardona, 2011; Yañez <i>et al.</i> , 2007; Musa <i>et al.</i> , 2007.

Cuadro 13. Continuación. Compuestos volátiles identificados en *Crataegus* spp. y presentes en otras especies vegetales.

NO.	COMPUESTO	ESPECIE CONSTITUYENTE	REFERENCIA
25	(S)-4-Isopropil-1-metil-1-cyclohexen-3-ol ((S) 4-Terpineol)	<i>Origanum vulgare</i> (orégano), <i>Ocimum</i> sp. (albahaca), <i>Tomillo vulgare</i> ; <i>Laurus nobilis</i> (Laurel)	Ordanza y Sanchez, 1990; Oliveira <i>et al.</i> , 2013; Contreras, 2012; Quijano y Pino, 2007b
26	Ácido Octanoico (Ácido caprilico)	<i>Ananas comosus</i> (piña); <i>Psidium guajava</i> (guayaba); <i>Musa sapientum</i> (plátano)	Sinuco, 2004; Quijano y Pino, 2007a; Pino y Roncal, 2009
28	(S)- 2-(4-Metilciclohexen-3-en-1-il)-propan- 2-ol (α -terpineol)	<i>Vitis vinífera</i> (uva), <i>C.</i> <i>jackii</i> (tejocote), <i>C. robesoniana</i> (tejocote), <i>C. flabellata</i> (tejocote), <i>C. azarolus</i> (tejocote), <i>Origanum vulgare</i> (orégano), <i>Phyllanthus acidus</i> (grocella) <i>Psidium guajava</i> (guayaba); <i>Laurus nobilis</i> (Laurel); <i>Litchi chinensis</i> (Litchi); <i>Daucus carota</i> (zanahoria)	Catania <i>et al.</i> , 2007; Kovaleva <i>et al.</i> , 2009; Hadjimitsi y Zabetakis, 2005; Ordanza y Sanchez, 1990; Pino <i>et al.</i> 2008; Quijano y Pino, 2007a; Quijano y Pino, 2007b; Pino <i>et al.</i> , 2007; Musa y Claude, 2007

Cuadro 13. Continuación. Compuestos volátiles identificados en *Crataegus* spp. y presentes en otras especies vegetales.

NO.	COMPUESTO	ESPECIE CONSTITUYENTE	REFERENCIA
34	Ácido nonanoico (Ácido pelargónico)	<i>Helicteres guazumifolia</i> (coralillo), <i>Phyllanthus acidus</i> (grocella) <i>Psidium guajava</i> (guayaba); <i>Litchi chinensis</i> (Litchi); <i>Musa sapientum</i> (plátano)	Ordaz <i>et al.</i> , 2011; Pino <i>et al.</i> , 2008; Quijano y Pino, 2007a; Pino <i>et al.</i> , 2007; Pino y Roncal, 2009
39	Antranilato de metilo	<i>Vitis labrusca</i> (uva)	Acree <i>et al.</i> , 1994
48	Metileugenol	<i>Ocimum sp.</i> (albahaca) <i>Psidium guajava</i> (guayaba); <i>Laurus nobilis</i> (Laurel); <i>Musa sapientum</i> (plátano)	Oliveira <i>et al.</i> , 2013; Quijano y Pino, 2007a; Quijano y Pino, 2007b; Pino y Roncal, 2009
52	4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)-2-butanona (Dihidro β -ionona)	<i>Psidium guajava</i> (guayaba)	Quijano y Pino, 2007a
57	4-(2,2,6-Trimetil-7-oxabíclico-[4.1.0]-hept-1-il)- 3-buten-2-ona (β -ionona epóxido)	<i>Calendula officinalis</i> (caléndula)	Gazim <i>et al.</i> , 2008
58	4-(2,2,6-Trimetil-1-ciclohehexen-1-il)-3-buten- 2-ol (β -ionol)	<i>Achillea millefolium</i> (artemisa)	www.pherobase.net
64	5,6,7,7a-Tetrahidro-4,4,7a-trimetil-2(4H)- benzofuranona (Dihidroactinidiolida)	<i>Lippia graveolens</i> (orégano mexicano), <i>Helicteres guazumifolia</i> (coralillo)	García <i>et al.</i> , 2010; Ordaz <i>et al.</i> , 2011.

Cuadro 13. Continuación. Compuestos volátiles identificados en *Crataegus* spp. y presentes en otras especies vegetales.

NO.	COMPUESTO	ESPECIE CONSTITUYENTE	REFERENCIA
73	2,4,4-Trimetil-3-(3-oxobutil)-ciclohex-2-enona (3-oxo-7,8-dihidro- β -ionol)	<i>Vitis vinífera</i> (uva)	Catania <i>et al.</i> , 2007
75	Tetracosano	<i>Abies pindrow</i> (abies), <i>C. jackii</i> (tejocote), <i>C. robesoniana</i> (tejocote), <i>C. flabellata</i> (tejocote),	Humaira M. <i>et al.</i> 2013; Samejo <i>et al.</i> 2010; Kovaleva <i>et al.</i> , 2009
80	n-ácido hexadecanoico Ácido palmitico	<i>Ananas comosus</i> (piña), <i>Phyllanthus acidus</i> (grocella) <i>Psidium guajava</i> (guayaba); <i>Litchi chinensis</i> (Litchi); <i>Musa sapientum</i> (plátano)	Sinuco, 2004; Pino <i>et al.</i> , 2008; Quijano y Pino, 2007a; Pino <i>et al.</i> , 2007; Pino y Roncal, 2009
81	Heneicosano	<i>Abies pindrow</i> , <i>C. jackii</i> (tejocote), <i>C. robesoniana</i> (tejocote), <i>C. flabellata</i> (tejocote),	Humaira M. <i>et al.</i> , 2013; Samejo <i>et al.</i> , 2010; Kovaleva <i>et al.</i> , 2009
85	Hexadecano, 2,6,10,14-tetrametil- (Fitano)	<i>Abies pindrow</i>	Humaira <i>et al.</i> , 2013; Samejo <i>et al.</i> , 2010

VII. CONCLUSIONES

El rendimiento promedio obtenido del aceite esencial del fruto de *Crataegus* spp. fue del 0.00073 %, mientras la accesión 50 presentó el rendimiento más alto con 0.000983 %.

Se identificaron un total de 52 compuestos presentes en los aceites esenciales obtenidos de las 11 accesiones de estudio, en las cuales, no se encontró relación del perfil de componentes del aceite esencial con el origen de las muestras, ni con el tamaño.

Ésteres, terpenos (monoterpenos) y ácidos orgánicos fueron los principales grupos funcionales con 11, 8 y 7 compuestos respectivamente, sumando el 50 % del total de las sustancias identificadas.

Los ácidos hexanoico, heptanoico, octanoico y nonanoico son los metabolitos de mayor abundancia en ocho de las accesiones de estudio (86, 100, 15, 72, 04, ATEX02, ATEX05 y ATEX06).

De los 52 compuestos identificados solo óxido de linalol y R- α -terpineol fueron homólogos en las especies norteamericanas (*C. robesoniana*, *C. flabellata* y *C. jackii*) y Europea (*C. azarolus*).

VIII. BIBLIOGRAFÍA

1. ACREE T., E.; LAVIN E., H; SHURE, K. 1994. The aroma of non vinifera grapes In: Connaissance aromatique des Cepages et Qualite des Vins. Actes du Symposium Intenational, 9-10 fevrier 1993. Montpellier, France. 51-57.
2. ARRIETA, J.; SILES B., D.; GARCÍA S., J.; REYES T., B.; SÁNCHEZ M., M. E. 2010. Relaxant effect of the extracts of *Crataegus mexicana* on Guinea Pig tracheal smooth muscle. Pharmacognosy Journal 2(17):40-46.
3. ARMSTRONG J., S. 2006. Mitochondrial membrane permeabilization: the sine qua non for cell death. BioEssays 28:253–260.
4. BAHORUN, T.; TROTIN, F.; POMMERY, J.; VASSEUR, J.; PINKAS, M. 1994. Antioxidant activities of *Crataegus monogyna* extracts. Planta Medica, 60, 323–328.
5. BAKKALI, F.; AVERBECK, S.; AVERBECK, D.; ZHIRI, A.; IDAOMAR, M. 2005. Cytotoxicity and gene induction by some essential oils in the yeast *Saccharomyces cerevisiae*. Mutat. Res. 585: 1–13.
6. BAKKALI, F.; AVERBECK, S.; AVERBECK, D.; IDAOMAR, M. 2008. Biological effects of essential oils - A review. Food and Chemical Toxicology 46:446-475.
7. BALDOMINO, M. 1994. El Eugenol y sus efectos biológicos. Bugandia 5(1):13-15.

8. BARRIENTOS V., A.; LÓPEZ A., A. 1995. Características hortícolas y viverísticas de tejocote (*Crataegus pubescens* (H.B.K.) de la república Mexicana. Tesis Profesional. Departamento de Fitotecnia. Universidad Autónoma Chapingo. México. 72 p.
9. BERGER R., C. 2007. Flavours and fragrances, chemistry, bioprocessing and sustainability. Springer. Germany. 629 p.
10. BOUCHRA, C.; ACHOURI, M.; IDRISSE HASSANI, L. M.; HMAMOUCI, M. 2003. Chemical composition and antifungal activity of essential oils of seven Moroccan Labiatae against *Botrytis cinerea* Pers. Fr. J. Ethnopharmacol. 89:165-169.
11. BRUNETON, J. 2001. Farmacognosia. Fitoquímica. Plantas medicinales. Editorial Acribia S. A. Zaragoza, España. 1099 pp.
12. BURT, S. 2007. Essential oils: antibacterial activity and potential applications in foods. Institute for Risk Assessment Sciences, Division of Veterinary Public Health. Utrecht University. Utrecht, The Netherlands. 136 p.
13. CADBY P., A.; TROY W., R.; VEY M., G. 2002. Consumer exposure to fragrance ingredients: Providing estimates for safety evaluation. Regul. Toxicol. Pharmacol. 36:246-252.
14. CATANIA, C.; AVAGNINA, S. 2007. Los aromas responsables de la tipicidad y la vinicidad. In: Curso superior de degustación de vinos. EEA Mendoza. INTA. 20 pp.
15. CERÓN-SALAZAR, I.; CARDONA-ALZATE, C. 2011. Abrangente processo de avaliação para a obtenção de óleos essenciais e pectina de casca de laranja. Ingeniería y Ciencia 7(13): 65-86.

16. CHANG, C.; YANG, M.; WEN, H.; CHERN, J. 2002. Estimation of total flavonoids content in propolis by two complementary colorimetric methods. *Journal Food and Drug Analysis* 10:176-182.
17. CUI, N.; NAKAMURA, K.; TIAN, S.; KAYAHARA, H.; TIAN, Y. 2006. Polyphenolic content and physiological activities of chinese hawthorn extracts. *Bioscience Biotechnology and Biochemistry* 70:2948-2956.
18. DELGADO B., E. A.; HERRERA G., A. J.; PÉREZ M., C. A.; BORYS, M. W. 1984. Estado nutricional de dos huertos de tejocote (*Crataegus pubescens* H. B. K.). III. Concentración de nutrimentos en el follaje. *Revista Chapingo* 9(45/46): 168-175.
19. DINESH, KUMAR.; VIKRANT ARYA; ZULFI QAR ALI BHAT; NISAR AHMAD KHAN; DEO NANDAN PRASAD. 2012. The genus *Crataegus*: chemical and pharmacological perspectives. *Rev. Bras. Farmacogn. Braz. J. Pharmacogn.* 22(5): 1187-1200.
20. D'ANTUONO L., F.; GALLETTI G., C.; BOCCHINI, P. 2000. Variability of essential oil content and composition of *Origanum vulgare* L. Populations from a north mediterranean area (Liguria region, north Italy). *Ann. Bot.* 86: 471-478.
21. DUDAREVA, N.; PICHERSKY, E.; GERSHENZON, J. 2004. Biochemistry of plant volatiles. *Plant Physiol.* 135:1893-1902.
22. EDWARDS, J. E.; BROWN, P. N.; TALENT, N.; DICKINSON, T. A.; SHIPLEY, P. R. 2012. A review of the chemistry of the genus *Crataegus*. *Phytochemistry* 79: 5-26.
23. FHEUM. 2001. Farmacopea Herbolaria de los Estados Unidos Mexicanos. Secretaria de Salud, México, D.F. 228 p.

24. FREGONI, N. 1999. Los aromas del vino. Seminario Internacional "Hacia la enología del siglo XXI". 3 al 7 de mayo. Mendoza, Argentina.
25. GARCÍA, E. 1988. Modificaciones al Sistema de Clasificación Climática de Köppen. Edit. UNAM. D. F., México. 246 p.
26. GARCÍA L., C.; MARTÍNEZ R., A.; ORTEGA S., J. L.; CASTRO B., F.; 2010. Componentes químicos y su relación con las actividades biológicas de algunos extractos vegetales. *Revista Química Viva* 2: 86-96.
27. GARCÍA M., R.; AGUILAR S., L.; SOTO H., M.; NIETO A., R.; KITE, G. 2012. Compuestos fenólicos totales, flavonoides y actividad antioxidante en las flores de *Crataegus* spp. *Agrociencia* 46: 651-662.
28. GARCÍA M., R.; NIETO A., R. 2012. Valor nutracéutico del tejocote (*Crataegus* spp.) de México. SINAREFI-SAGARPA-UACH. 2011. 63 p.
29. GARCÍA M., R.; AGUILAR S., L.; SOTO H., M.; NIETO A., R.; KITE., G. 2013. Flavonoids and antioxidant activity of flowers of Mexican *Crataegus* spp. *Natural Products Research* 27 (9): 834-836.
30. GARCÍA M., R.; IBARRA E., E.; NIETO A., R. 2013. Antioxidant compounds in hawthorn fruits (*Crataegus* spp.) of Mexico. *Revista Mexicana de Biodiversidad* 84 (4): 1298-1304.
31. GAZIM Z., C.; MORALES R., C.; FRAGA S., R.; PRADO D., B. F.; VATARU N., C.; GARCIA C., D. A. 2008. Analysis of the essential oils from *Calendula officinalis* growing in Brazil using three different extraction procedures. *Brazilian Journal of Pharmaceutical Sciences* 44(3):391-395.
32. GERSHENZON, J. 1994. Metabolic costs of terpenoid accumulation in higher plants. *J. Chem. Ecol.* 20(6): 1281-1328.

33. GUYNOT M., E.; MARÍN, S.; SETÚ. L.; SANCHIS, V.; RAMOS, A. J. 2005. Screening for Antifungal Activity of Some Essential Oils Against Common Spoilage Fungi of Bakery Products. Food Science and Technology International February. 11(1): 25-32.
34. HADJIMITSI, E.; ZABETAKIS, L. 2005. The aroma of jam prepared from fruits of mosphilla (*Crataegus azarolus* L.). Flavour and Fragrance Journal 20:507-511.
35. HASSAN S., B.; GALI-MUHTASIB, H.; GÖRANSSON, H.; LARSSON, R. 2010. Alpha terpineol: a potential anticancer agent which acts through suppressing NF-kappaB signalling. Anticancer Res. 30(6):1911-1919.
36. HELD, S.; SCHIEBERLE, P.; SOMOZA V. 2007. Characterization of alpha-Terpineol as an anti-inflammatory component of orange juice by in vitro studies using oral buccal cells. J Agric Food Chem. 55(20): 8040-8046.
37. HERNÁNDEZ G., J. 2005. Estado actual del conocimiento del orégano mexicano (*Lippia graveolens* H.B.K.). Tesis inédita de licenciatura. Universidad Autónoma Chapingo, Texcoco, México.
38. HIGAREDA R., A.; SALAZAR M., J. A.; RAMOS R., E. G. 1995. "Caracterización de la pectina del tejocote. Revista Chapingo Serie Horticultura 1(4):47:52.
39. HORVAT R., J.; CHAPMAN G., W.; PAYNE J., A. 1991. Identification of volatile compounds from ripe mayhaw fruit (*Crataegus opaca*, *C. aestivalis*, and *C. rufula*). J. Food Qual. 14:307–312.

40. HORVAT R., J.; CHAPMAN G., W. 2007. Identification of volatile compounds from ripe Mayhaw fruit (*Crataegus opaca*, *C. aestivalis*, and *C. rufula*). J Food Quality. 14: 307-312.
41. HUMAIRA, M.; TASVEER Z., B.; SIKANDAR K., S.; UZMA, Y.; H. MUHAMMAD H., R. S.; BENISH K. 2013. An Overview of Biological, Phytochemical, and Pharmacological Values of *Abies pindrow*. Journal of Pharmacognosy and Phytochemistry 2(4): 182-187.
42. KOSTIC, D. A.; VELICKOVIC, J. M.; MITIC, S. S.; MITIC, M. N.; RANDELOVIC, S. S. 2012. Phenolic Content, and Antioxidant and Antimicrobial Activities of *Crataegus Oxyacantha* L (Rosaceae) Fruit Extract from Southeast Serbia. Tropical Journal of Pharmaceutical Research 11(1): 117-124.
43. KOTAN, R.; KORDALI, S.; CAKIR, A. 2007. Screening of antibacterial activities of twenty-one oxygenated monoterpenes. Z Naturforsch [C] 62(7-8): 507-513.
44. KOVALEVA A. M.; GONCHOROV, N. F.; KOMISSARENKO, A. N.; SIDORA, N. V.; KOVALEV, S. V. 2009. GC/MS Study of essential oil components from flowers of *Crataegus jackii*, *C. robesoniana* y *C. flabellata*. Chemistry of Natural Compounds. 45(4):582-584.
45. KUKLINGSKI, C. 2000. Farmacognosia. Estudio de las drogas y sustancias medicamentosas de origen natural. Ediciones omega S. A. Barcelona, España. 515 pp.
46. LALEL, H. J. D.; SINGH, Z.; TAN, S. C. 2003. The role of ethylene in mango fruit aroma volátiles biosynthesis. Journal of Horticulture Science y Biotechnology 78(4):470-484.

47. LOPEZ S., J.; NIETO Á., R.; BARRIENTOS P., A. F.; RODRIGUEZ P., E.; COLINAS L., M. T.; BORYS, M. W.; GONZALEZ A., F. 2008. Selección de variables morfológicas para la caracterización del tejocote (*Crataegus* spp.). Revista Chapingo Serie Horticultura 14(2): 97-111.
48. MAIA N., B.; BOVI O., A.; PERECIN M., B.; MARQUES M., O. M.; GRANJA N., P.; TRUJILLO A., L. 2004. New crops with potential to produce essential oil with high linalool content helping preserve rosewood - an endangered amazon species. Acta Hort. (ISHS) 629:39-43. http://www.actahort.org/books/629/629_4.htm
49. MALO E., A.; LÓPEZ L., C.; TOLEDO, J.; DEL MAZO, A.; VIRGEN, A.; ROJAS J., C. 2005. Behavioral and electrophysiological responses of the mexican fruit fly (diptera: tephritidae) to guava volatiles. Florida Entomologist. 88(4):364-371.
50. MARÍN-LOAIZA, J. C.; CÉSPEDES, C. L. 2007. Compuestos volátiles de plantas. Origen, emisión, efectos, análisis y aplicaciones al agro. Revista Fitotecnia Mexicana. Vol. 30 (4):327-351.
51. MARTÍNEZ, M. 1967. Las Plantas Medicinales de México. 6° Ed. Editorial Botas. México. 657 p.
52. MARTÍNEZ, M. 1979. Catálogo de Nombres Vulgares y Científicos de Plantas Mexicanas. Fondo de Cultura Económica. México. 1247p.
53. MARTÍNEZ M., A. 2003. Aceites Esenciales. Facultad Química Farmacéutica. Universidad De Antioquia. Medellin. 34 P.
54. MURILLO, E.; FERNÁNDEZ, K.; SIERRA, D. M.; VIÑA, A. 2004. Caracterización físico-química del aceite esencial de albahaca II. Revista Colombiana de Química. 33(2): 139-148.

55. MUSA, O. M.; CHALCHAT, J. C. 2007. Chemical composition of carrot seeds (*Daucus carota* L.) cultivated in Turkey: characterization of the seed oil and essential oil. *Grasas y aceites*. 58 (4):359-365.
56. NIETO Á., R.; BORYS, M. W. 1991. El tejocote (*Crataegus* spp.) en México, pp. 309-329. In: Avances en el Estudio de los Recursos Filogenéticos en México. ORTEGA P., R.; PALOMIO H., G.; CASTILLO G., F.; GONZÁLEZ H., V. A.; LIVERA M., M. (eds.). Sociedad Mexicana de Fitogenética, A. C. (SOMEFI), Chapingo, México.
57. NIETO Á., R.; M. W. BORYS. 1992. Banco de Germoplasma de tejocote (*Crataegus* spp.) de la República Mexicana. *Revista Chapingo*. 16(77): 126-130.
58. NIETO Á., R.; BORYS, M. W. 1993. El tejocote (*Crataegus* spp.); un potencial frutícola de zonas templadas. *Revista Fruticultura Profesional*. 54:63-71.
59. NIETO Á., R. 2007. Colección, conservación y caracterización del tejocote (*Crataegus* spp.). In: Nieto-Ángel, R. (ed.). *Frutales Nativos, un Recurso Fitogenético de México*. Universidad Autónoma Chapingo, México. 25-41 pp.
60. NIETO Á., R.; PÉREZ O., S. A.; NUÑEZ C., C. A.; MARTINEZ S., J.; GONZÁLEZ A., F. 2009. Seed and endocarp traits as markers of the biodiversity of regional sources of germplasm of tejocote (*Crataegus* spp.) from Central and Southern México. *Scientia Horticulturae*. 121: 166-170.
61. NUÑEZ C., C.; GARCÍA M., R.; NIETO A., R. 2007. Caracterización de genotipos de *Crataegus* en relación al contenido de compuestos fenólicos. *Proceedings Interamerican Society Tropical Horticulture* 51: 126-127.

62. ODY, P. 1993. The Herb Society's Complete Medicinal Herb. Dorling Kindersley. U K. 51 p.
63. OLIVEIRA, R. A.; MOREIRA, I. S.; OLIVEIRA, F. F. 2013. Linalool and methyl chavicol present basil (*Ocimum* sp.) cultivated in Brazil. *Revista Brasileira de Plantas Medicinais* 15(2):309-311.
64. ORDANZA, M.; SANCHEZ, A. 1990. Steam distillation and supercritical fluid extraction of some Mexican spices. *Chromatographia* 30(1-2): 16-18.
65. ORDAZ, G.; D'ARMAS, H.; YÁÑEZ, D.; MORENO, S. 2011. Composición química de los aceites esenciales de las hojas de *Helicteres guazumifolia* (Sterculiaceae), *Piper tuberculatum* (Piperaceae), *Scoparia dulcis* (Arecaceae) y *Solanum subinerme* (Solanaceae), recolectadas en Sucre, Venezuela. *Rev. Biol. Trop. (Int. J. Trop. Biol.* 59 (2): 585-595.
66. PARÉ, P. W.; TUMLINSON, J. H. 1999. Plant volatiles as a defense against Insect Herbivores. *Plant Physiol.* 121:325-331.
67. PARVEEN, M.; HASAN, M. K.; TAKAHASHI, J.; MURATA, Y.; KITAGAWA, E.; KODAMA, O.; IWAHASHI, H. 2004. Response of *Saccharomyces cerevisiae* to a monoterpene: evaluation of antifungal potential by DNA microarray analysis. *J. Antimicrob. Chemother.* 54, 46–55.
68. PEREZ O., S.A.; NUÑEZ C, C. A.; SEGURA, S.; NIETO A., R.; BARRIENTOS P., A. F. 2004. Los recursos genéticos de *Crataegus* (Rosaceae) en México: Variación eco-climática. *Proceedings of the Interamerican Society for Tropical Horticulture* 48:149-151.

69. PHIPPS. J. B. 1997. Monograph of northern Mexican *Crataegus* (Rosaceae, Subfam. Maloideae). SIDA Botanical Miscellany 15:1-94.
70. PHIPPS. J. B., O'KENNON R. J.; LANCE R. W. 2003. Hawthorns and Medlars. Plant Collector Guide. Royal Horticultural Society. Timber Press. Portland, USA. 139 p.
71. PINO, J. A.; CUEVAS-GLORY, L.; RONCAL, E.; FUENTES, V. 2007. Estudio de los compuestos volátiles del litchi cultivado en Cuba. Ciencia y Tecnología de Alimentos 17(3):20-23.
72. PINO, J. A.; CUEVAS-GLORY, L.; MARBOT, R.; FUENTES, V. 2008. Volatile compounds of grosella (*Phyllanthus acidus* [L.] Skeels) fruit. Revista CENIC Ciencias Químicas, 39(1):3-5.
73. PINO, J. A.; RONCAL, E. 2009. Caracterización de los compuestos volátiles del plátano fruta CV. FHIA 18. Ciencia y Tecnología de Alimentos 19(3):46-52.
74. PITAROKILI, D.; COULADIS, M.; PETSIKOS-PANAYOTAROU, N.; TZAKOU, O. 2002. Composition and antifungal activity on soil-borne pathogens of the essential oil of *Salvia sclarea* from Greece. J. Agric. Food Chem. 50(23): 6688-6691.
75. QUIJANO, C. E.; PINO, J. A. 2007a. Characterization of volatile compounds in guava (*Psidium guajava* L.) varieties from Colombia. Revista CENIC Ciencias Químicas, 38(3):367-370.
76. QUIJANO, C. E.; PINO, J. A. 2007b. Characterization of the leaf essential oil from laurel (*Laurus nobilis* L.) grown in Colombia. Revista CENIC Ciencias Químicas, 38(3):371-374.

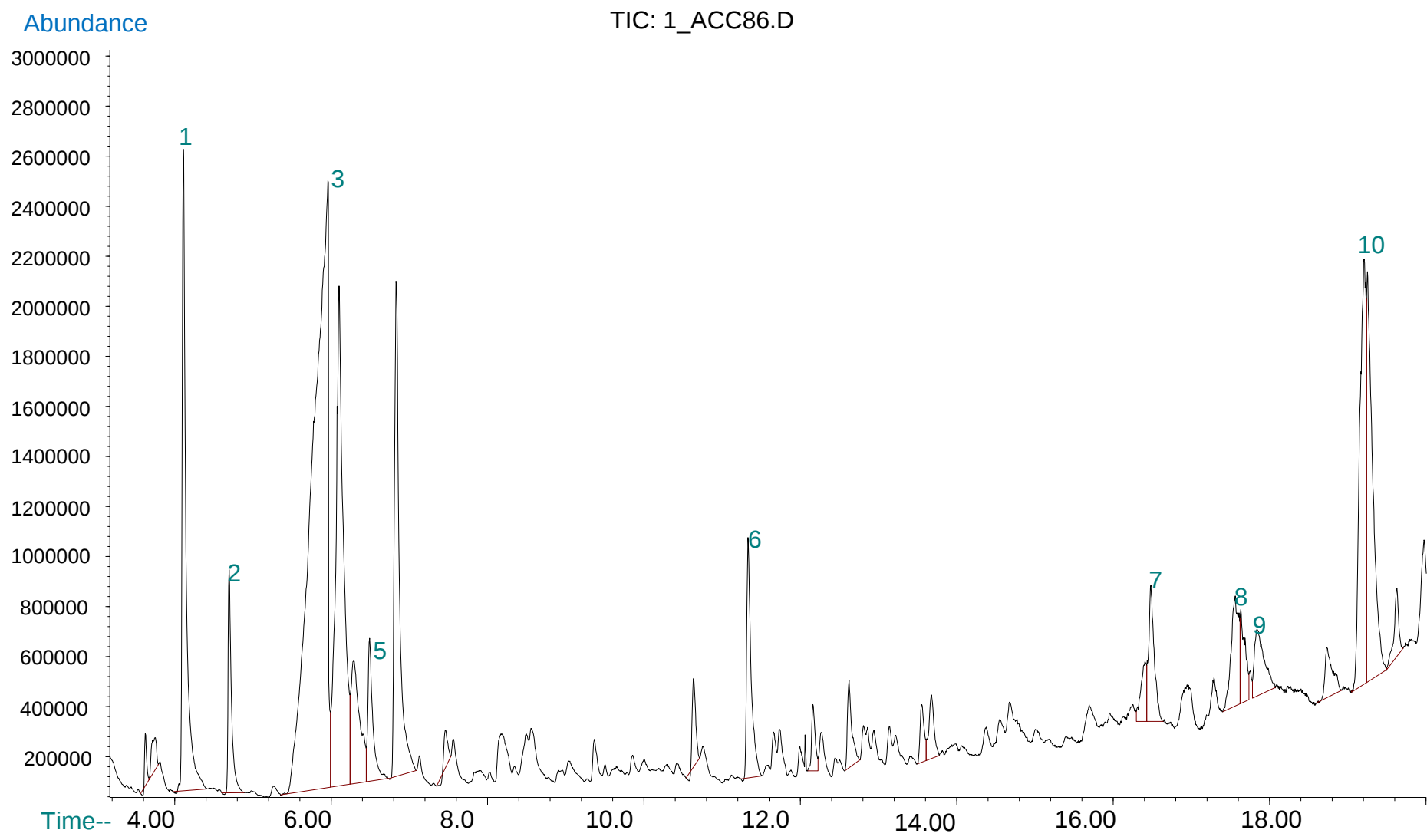
77. REYNOLDS, A. G.; WARDLE, D. A 1997. Flavour development in the vineyard impact of viticultural practices on grape monoterpenes and their relationship to wine sensory response. *S. Afr. J. Enol. Vitic.* 18:3-18.
78. RODRÍGUEZ Á., M.; ALCARAZ M., L.; REAL C., S. M. 2012. Procedimientos para la extracción de aceites esenciales en plantas aromáticas. Edit. Centro de Investigaciones Biológicas del Noroeste, S.C. La Paz, Baja California Sur, México. 38 p.
79. SALAM, Z.; AWADA, S.; RACHIDI, S.; HAJJ, A.; KRIVORUSCHKO, E.; KANAAN, H. 2011. Chemical analysis of essential oil from Lebanese wild and cultivated *Origanum syriacum* L. (Lamiaceae) before and after flowering. *Journal of Medicinal Plants Research* 5(3): 379-387.
80. SAMEJO, M. Q.; BURDI, D. K.; BHANGER, M. I.; TALPUR, F. N.; KHAN, K. M. 2010. Identification of hydrocarbons from *Abies pindrow* leaves. *Chemistry of Natural Compounds*. 46(1):132-134.
81. SANCHEZ S., O. 1974. La flora del Valle de México. Ed. Herrero S. A. México. 152pp.
82. SANGWAN, N. S.; FAROOQI, A. H. A.; SHABIH, F.; SANGWAN, R. S. 2001. Regulation of essential oil production in plants. *Plant Growth Regul* 34: 03-21.
83. SELIM A., S. 2011. Chemical composition, antioxidant and antimicrobial activity of the essential oil and methanol extract of the Egyptian lemongrass *Cymbopogon proximus* Stapf. *Grasas y aceites*, 62 (1):55-61.
84. SINUCO, D. C.; MORALES, A. L.; DUQUE, C. 2004. Componentes volátiles libres y glicosídicamente enlazados del aroma de la piña (*Ananas comosus* L.) variedad perolera. *Revista Colombiana de Química* 33(1):47-56.

85. SORIA A., C.; ESTEBAN, J.; MORALES, R.; MARTÍN-ÁLVAREZ, P. J.; SANZ, J. 2008. Validación estadística de la presencia en plantas de quimiotipos caracterizados por la concentración de componentes volátiles obtenida mediante GC-MS. *Botanica Complutensis* 32: 225-236.
86. SVEDSTRÖM, U.; VUORELA, H.; KOSTIAINEN, R.; TUOMINEN, J.; KOKKONEN, J.; RAUHA, J.; LAAKSO, I.; HILTUNEN, R. 2002. Isolation and identification of oligomeric procyanidins from *Crataegus* leaves and flowers. *Phytochemistry* 60:821-825
87. TAIZ, L. & ZEIGER, E. 2002. "Plant Physiology". 3er Ed. Sinauer Associates Inc Publishers. Massachusetts, USA.
88. TEPE, B.; DAFERERA, D.; SOKMEN, A.; SOKMEN, M.; POLISSIOU, M. 2005. Antimicrobial and antioxidant activities of the essential oils and various of *Salvia Tomentosa* Miller (Laminaceae). *Food Chem* 90:333-340.
89. TSERENNADMID, R.; MIKLÓS, T.; LÁSZLÓ, G.; TAMÁS, P.; CSABA, V.; LÁSZLÓ, G.; JUDIT, K.. 2010. Antibacterial effect of essential oils and interaction with food components. *Cent. Eur. J. Biol.* 5(5): 641-648.
90. TUKEY, H. B. 1964. Dwarfed Fruit Trees. Mcmillan Co. Inc. New York, N. Y. pp. 182-194.
91. USANO-ALEMANY, J.; PALÁ-PAÚL, J.; HERRÁIZ-PEÑALVER, D. 2014. Temperature stress causes different profiles of volatile compounds in two chemotypes of *Salvia lavandulifolia* Vahl. *Biochemical Systematics and Ecology* 54:166–171.
92. YAÑEZ, R. X.; MANCILLA, L. L.; PARADA, D. P. 2007. Estudio del aceite esencial de la naranja dulce (*Citrus senensis*, variedad Valencia) cultivada en Labateca (Norte de Santander, Colombia). *BISTUA* 5:3-8.

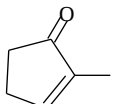
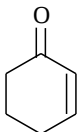
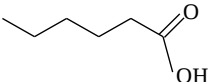
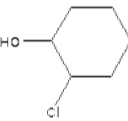
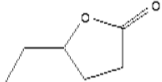
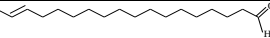
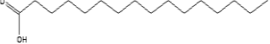
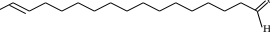
93. <http://webbook.nist.gov/chemistry/> 24-02-2014. Consulta de datos de diferentes compuestos químicos.
94. <http://www.pherobase.com/database/kovats/kovats-index.p> 24-02-2014. Consulta de datos de diferentes compuestos químicos.
95. <http://ocw.upm.es/ingenieria-agroforestal/uso-industrial-de-plantas-aromaticas-y-medicinales/contenidos/material-de-clase/tema7.pdf> 24-02-2014.

IX. ANEXOS

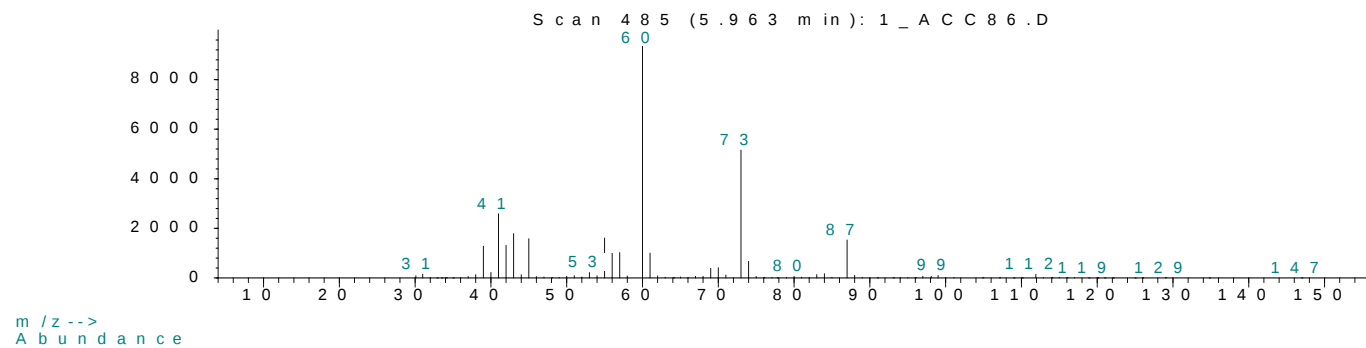
ANEXO 1. Cromatograma del aceite esencial de *Crataegus mexicana* (ACC86).



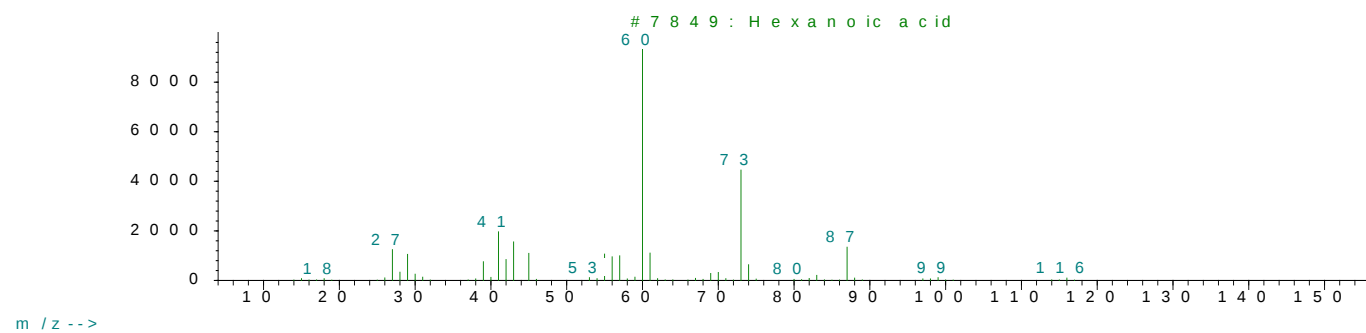
ANEXO 2. Componentes del aceite esencial de *Crataegus mexicana* (ACC86).

ACC86									
PK	TR	Compuesto	CAS	% I	CR (%)	IK	FORMULA	PM	ESTRUCTURA
1	4.11	2-metil-ciclopenten-2-ona	001120-73-6	80	7.52	897.3750	C ₆ H ₈ O	96.13	
2	4.69	2-Ciclohexenona	000930-68-7	91	9.9	897.805556	C ₆ H ₈ O	96.13	
3	5.96	Ácido hexanoico (Ácido caprico)	000142-62-1	83	28.98	997.848684	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16	
4	6.11	2-Cloro- ciclohexanol	001561-86-0	93	11.8	998.0000	C ₆ H ₁₁ ClO	134.604	
5	6.49	2(3H)-Furanone, 5-etildihidro- (γ-Caprolactona)	000695-06-7	80	2.17	998.217105	C ₆ H ₁₀ O ₂	114.1424	
6	11.33	No identificado	007766-37-2	38	3.36	1397.217054			
7	16.48	Tetracosano	000646-31-1	95	2.39	1796.533334	C ₂₄ H ₅₀	338.6538	
8	17.56	17-Octadecenal	056554-86-0	94	4.55	1797.561904	C ₁₈ H ₃₄ O	266.4620	
9	17.84	n-ácido hexadecanoico	000057-10-3	99	2.25	1797.82857	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	256.4241	
10	19.21	E-15-Heptadecenal	1000130-97-9	95	14.99	1799.13333	C ₁₇ H ₃₂ O	252.43538	

Abundance

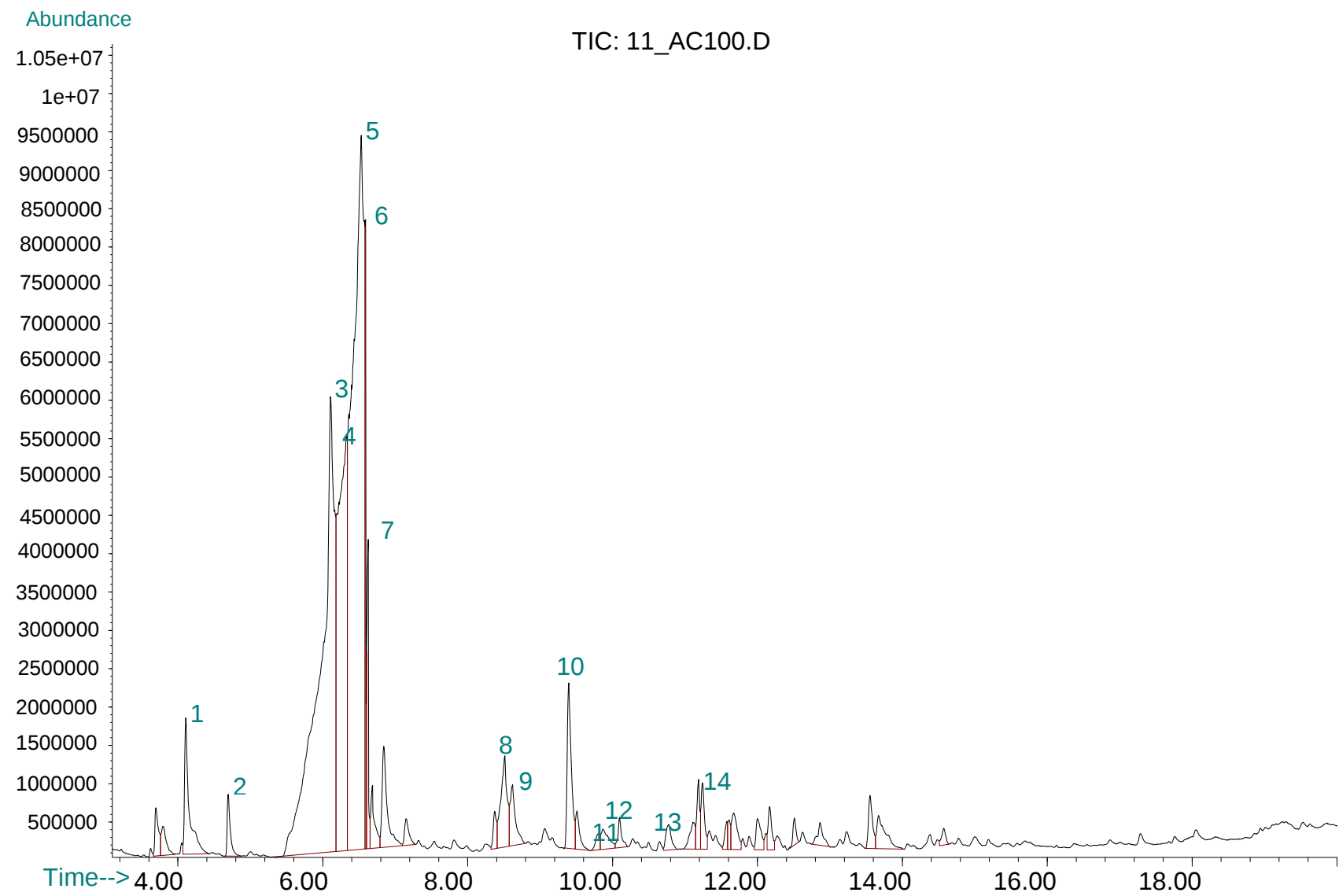


m/z -->

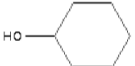
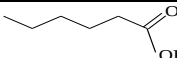
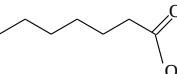
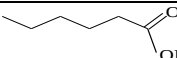
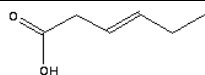
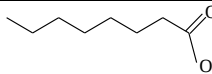
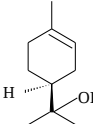
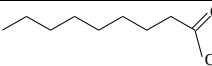
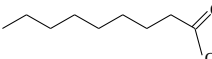
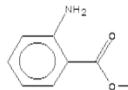
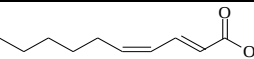


ANEXO 3: Comparación de espectros de masas del ácido hexanoico, componente principal del aceite esencial de la ACC86: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.

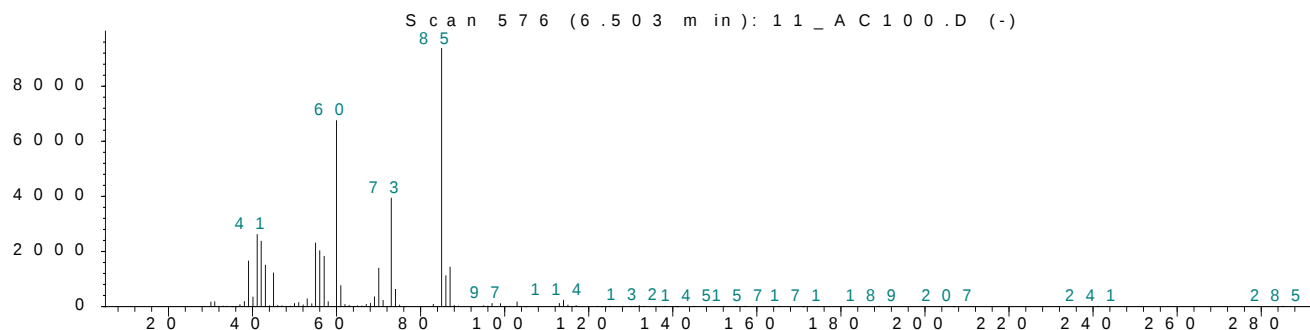
ANEXO 4. Cromatograma del aceite esencial de *Crataegus mexicana* (ACC100).



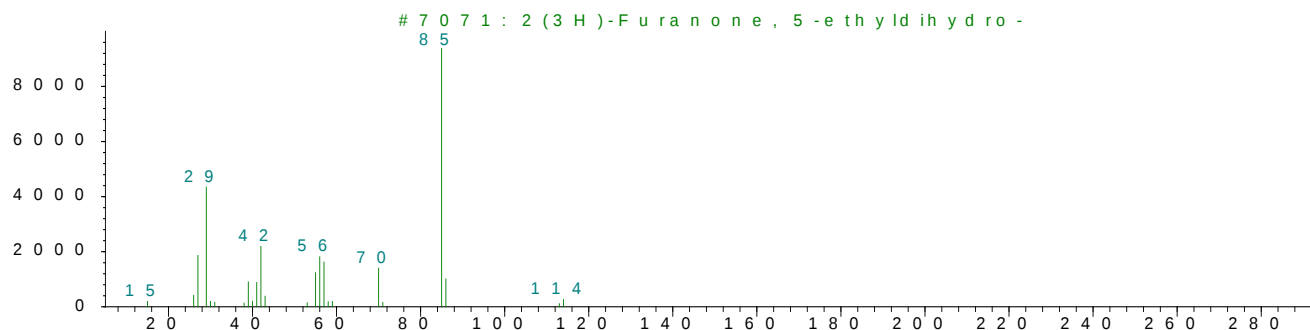
ANEXO 5. Componentes del aceite esencial de *Crataegus mexicana* (100).

ACC100									
PK	TR	Compuesto	CAS	% I	CR (%)	IK	Formula	PM	Estructura
1		2-Ciclohexenol	000822-67-3	94	2.42	897	C ₆ H ₁₀ O	98.1430	
2	4.7	2-Ciclohexenona	000930-68-7	91	0.74	897.805556	C ₆ H ₈ O	96.13	
3	6.11	2-Cloro- ciclohexanol	001561-86-0	80	24.7	998.0000	C ₆ H ₁₁ ClO	134.604	
4	6.33	Ácido hexanoico (Ácido caprico)	000142-62-1	83	14.05	998.3552	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16	
5	6.53	Ácido heptanoico (Ácido enántico)	000111-14-8	80	32.2	1097.8926	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.19	
6	6.59	Ácido hexanoico (Ácido caprico)	000142-62-1	83	2.39	998.3552	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16	
7	6.63	Trans-3-ácido hexenoico	001577-18-0	98	2.05	1102.9310	C ₆ H ₁₀ O ₂	114.1424	
8	8.51	Ácido octanoico (Ácido caprílico)	000124-07-2	91	2.18	1197.6527	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.21	
9	8.62	(S)- 2-(4-Metilciclohexen-3-en-1-il)-propan-2-ol (α-terpineol)	010482-56-1	96	1.28	1206.0929	C ₁₀ H ₁₈ O	154.25	
10	9.4	No identificado	001587-15-1	53	2.64	1265.9422			
11	9.81	Ácido nonanoico	000112-05-0	96	0.26	1297.4014	C ₉ H ₁₈ O ₂	158.24	
12	9.87	Ácido nonanoico (Ácido pelargónico)	000112-05-0	96	0.59	1297.4014	C ₉ H ₁₈ O ₂	158.24	
13	10.78	Antranilato de metilo	000134-20-3	96	0.53	1298.0072	C ₈ H ₉ NO ₂	151.1626	
14	11.25	(E,Z)- 2,4-decadienoato de metilo	004493-42-9	95	0.88	1397	C ₁₁ H ₁₈ O ₂	182.26	

Abundance



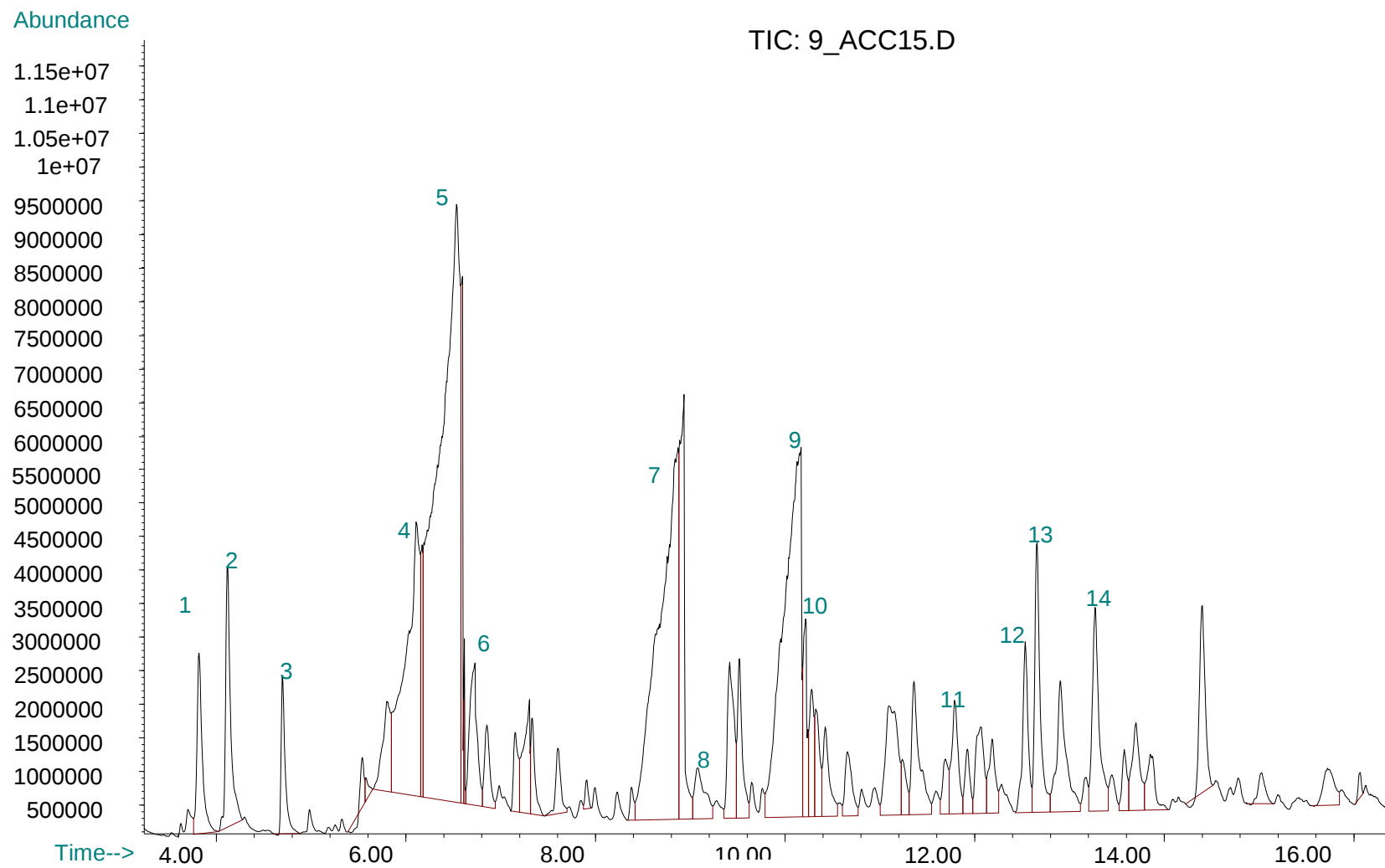
m/z -->
Abundance



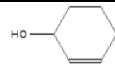
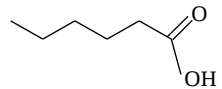
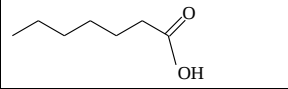
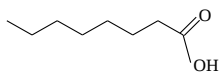
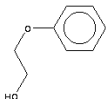
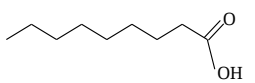
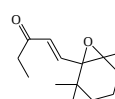
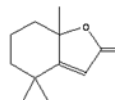
m/z -->

ANEXO 6: Comparación de espectros de masas del 5-etildihidro -2(3H) –furanona componente principal del aceite esencial de la ACC100: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.

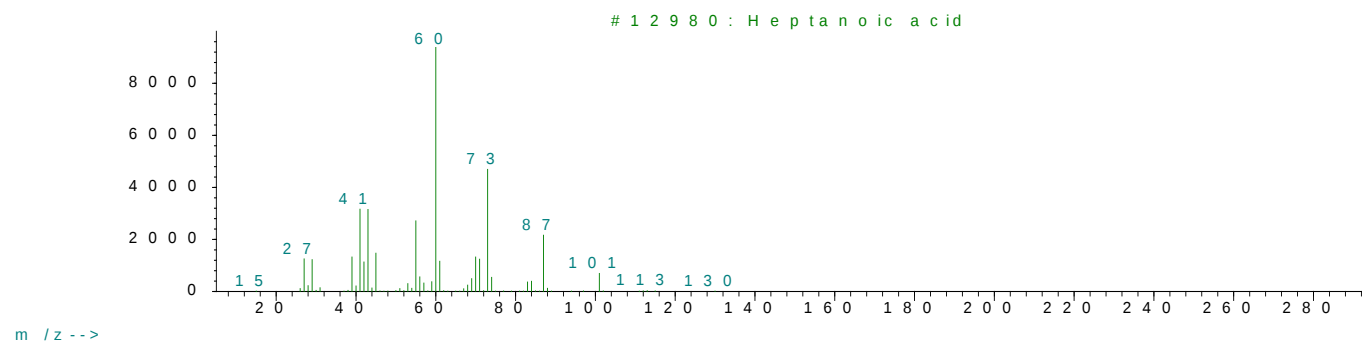
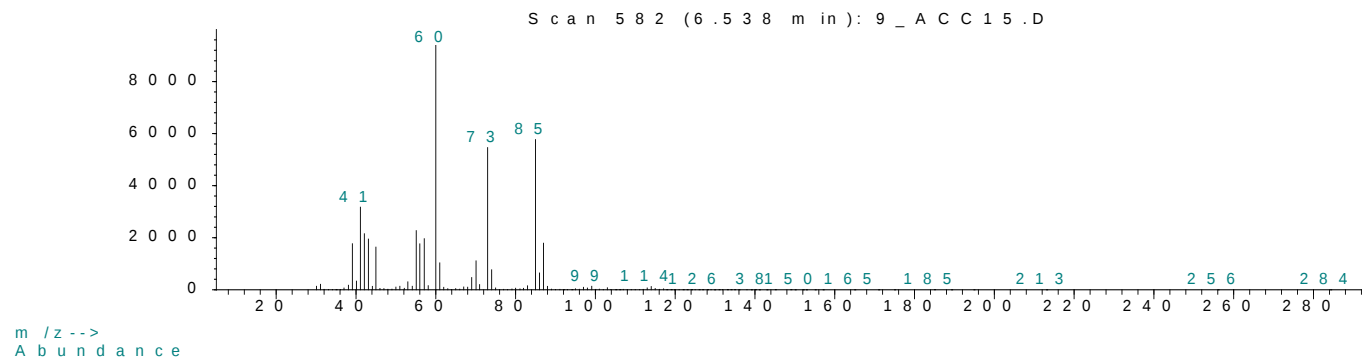
ANEXO 7. Cromatograma del aceite esencial de *Crataegus aurescens* (ACC15).



ANEXO 8. Componentes del aceite esencial de *Crataegus aurescens* (ACC15).

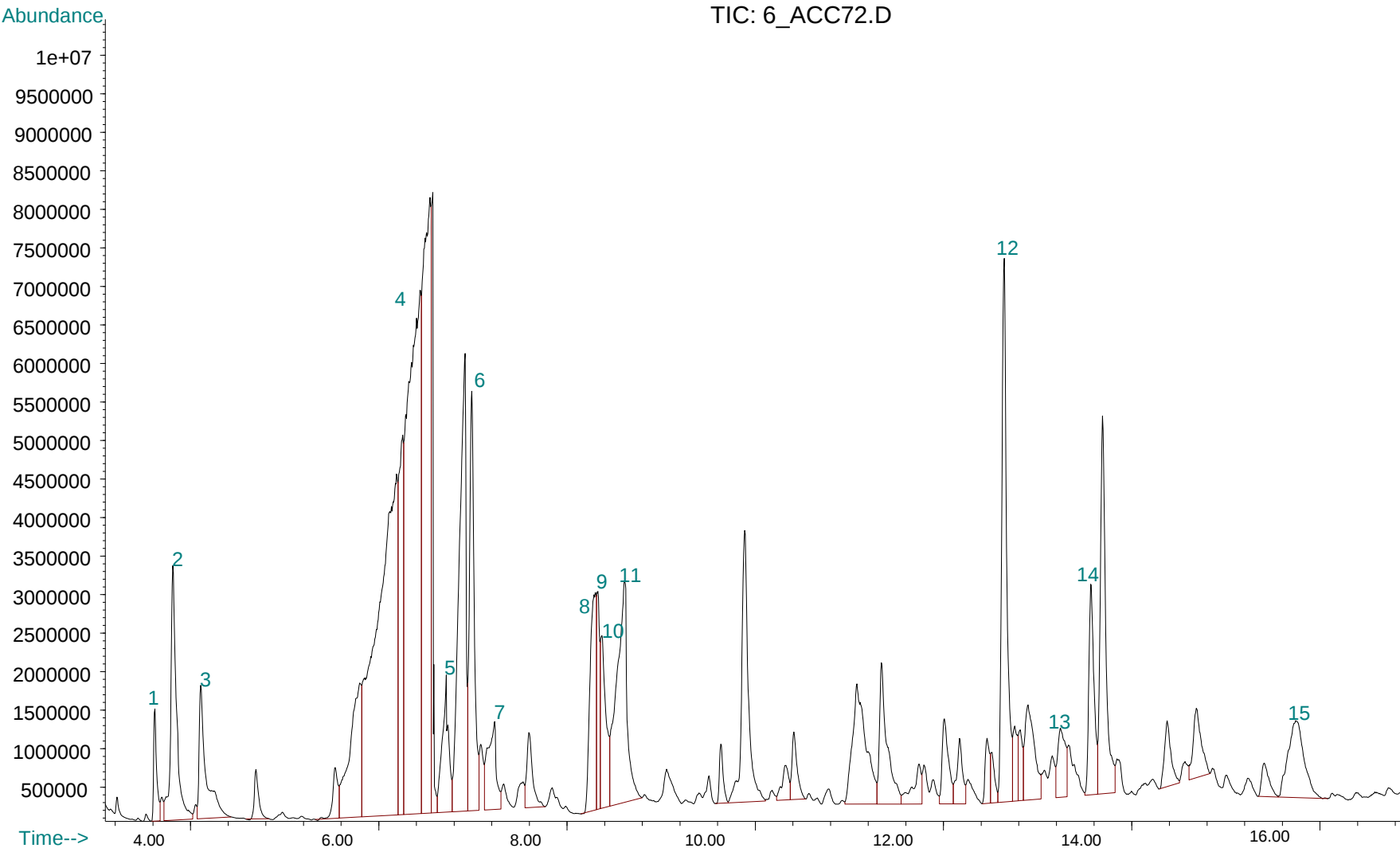
ACC15									
P K	TR	Compuesto	CAS	% I	CR (%)	IK	Formula	PM	Estructura
1	3.82	No identificado	000629-33-4	72	1.62	896			
2	4.12	2-Ciclohexenol	000822-67-3	93	2.19	897	C ₆ H ₁₀ O	98.1430	
3	4.7	2-Ciclohexenona	000930-68-7	91	1.07	897.8 055	C ₆ H ₈ O	96.13	
4	6.11	Ácido hexanoico (Ácido caprico)	000142-62-1	83	10.21	998	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16	
5	6.54	Ácido heptanoico (Ácido enántico)	000111-14-8	80	22.49	1097	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.19	
6	6.73	No identificado	001191-04-4	50	1.76	1105			
7	8.87	Ácido Octanoico (Ácido caprílico)	000124-07-2	91	15.26	1197	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.21	
8	9.08	2-fenoxi-etanol (Fenoxietanol)	000122-99-6	90	0.89	1197	C ₈ H ₁₀ O ₂	138.16	
9	10.17	Ácido nonanoico (Ácido pelargónico)	000112-05-0	95	10.59	1297	C ₉ H ₁₈ O ₂	158.24	
10	10.21	No identificado	031642-67-8	70	1.28	1299			
11	11.79	No identificado	001931-63-1	70	1.25	1397			
12	12.53	4-(2,2,6-Trimetil-7-oxabicyclo-[4.1.0]-hept-1-il)-3-buten-2-ona (β-ionona epóxido)	023267-57-4	94	1.54	1496	C ₁₃ H ₂₀ O ₂	208.3	
13	12.66	No identificado	022516-10-5	46	2.44	1497. 0941			
14	13.27	5,6,7,7a-Tetrahidro-4,4,7a-trimetil-2(4H)-benzofuranona (Dihidroactinidiolide)	015356-74-8	98	2.36	1497. 6504	C ₁₁ H ₁₆ O ₂	180.24	

Abundance

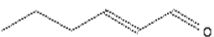
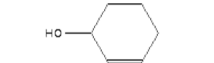
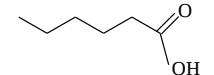
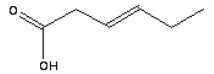
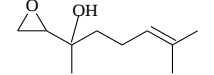
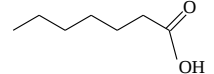
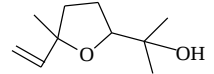
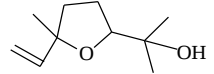
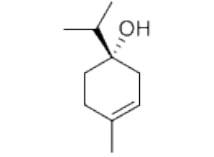
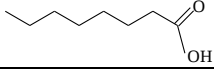
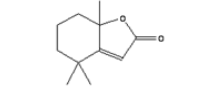


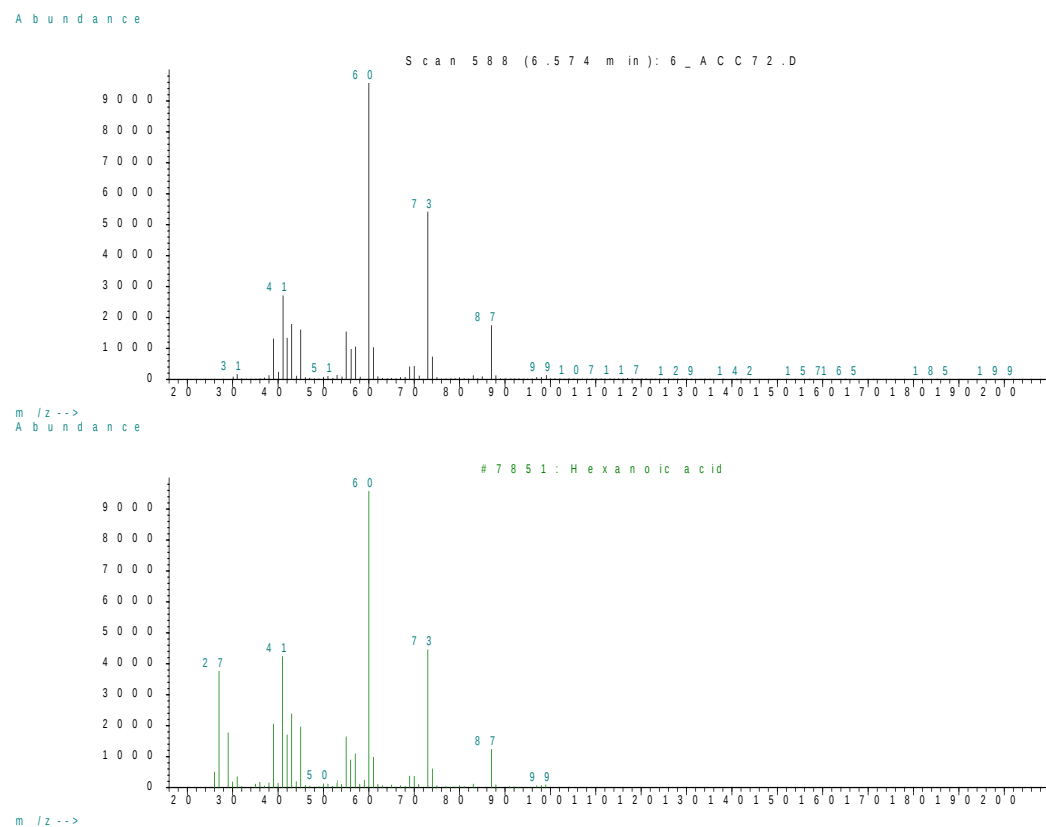
ANEXO 9: Comparación de espectros de masas del ácido heptanoico componente principal del aceite esencial de la ACC15:
A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.

ANEXO 10. Cromatograma del aceite esencial de *Crataegus boroussana* (ACC72).



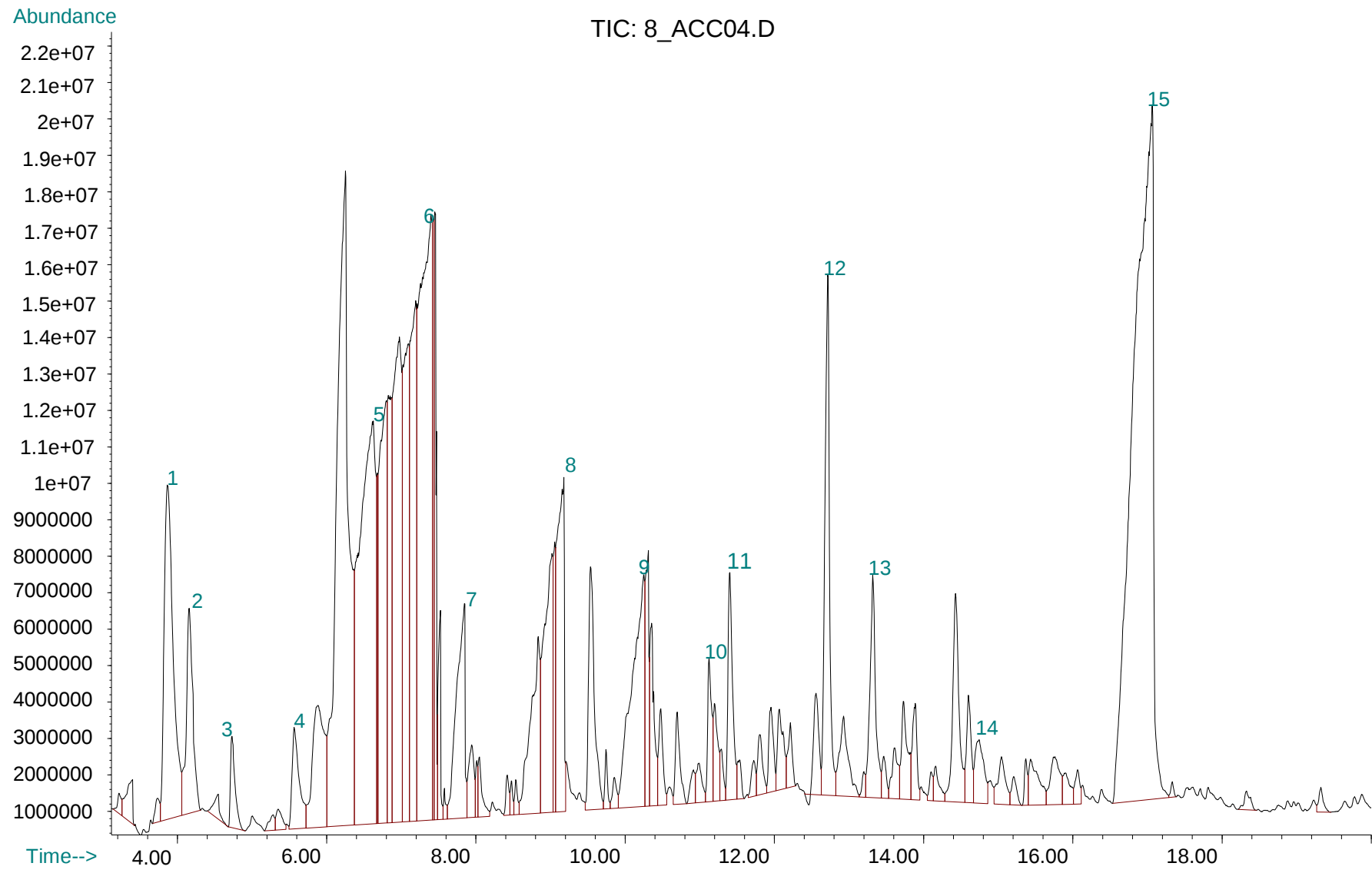
ANEXO 11. Componentes del aceite esencial de *Crategus Boroussana* (ACC72).

ACC72									
PK	TR	Compuesto	CAS	% I	CR (%)	IK	Formula	PM	Estructura
1	3.62	(E)- 2-Hexenal	006728-26-3	93	0.6	876.195	C ₆ H ₁₀ O	98.1430	
2	3.82	No identificado	000629-33-4	72	2.62	884.8625	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.1849	
3	4.11	2-Ciclohexenol	000822-67-3	94	1.62	897.4305	C ₆ H ₁₀ O	98.1430	
4	6.44	Ácido hexanoico (Ácido capríco)	000142-62-1	83	41.22	998.4078	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16	
5	6.72	Trans-3-ácido hexenoico	004219-24-3	81	1.5	1033.6682	C ₆ H ₁₀ O ₂	114.1424	
6	6.99	6-Metil-2-(2-oxiranil)-5-hepten-2-ol	1000132-13-0	80	3.61	1053.1244	C ₁₀ H ₁₈ O ₂		
7	7.23	Ácido heptanoico (Ácido enántico)	000111-14-8	83	1.35	1097.8926	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.19	
8	8.3	2-Meti-2-vinil-(α-hidroxi-isopropil)-tetrahidrofurano (Óxido de linalool)	014049-11-7	80	2.27	1175.3128	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	170.2487	
9	8.33	2-Meti-2-vinil-(α-hidroxi-isopropil)-tetrahidrofurano (Óxido de linalool)	014049-11-7	80	1.20	1175.3128	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	170.2487	
10	8.37	(S)-4-Isopropil-1-metil-1-cyclohexen-3-ol (S) 4-Terpineol	000562-74-3	83	1.71	1180.3777	C ₁₀ H ₁₈ O	154.25	
11	8.61	Ácido Octanoico (Ácido caprílico)	000124-07-2	83	4.21	1197.7430	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.21	
12	12.64	No identificado	062338-00-5	42	4.82	1458.7784			
13	13.24	5,6,7,7a-Tetrahidro-4,4,7a-trimetil-2(4H)-benzofuranona (Dihidroactinidiolide)	015356-74-8	98	0.94	1497.6422	C ₁₁ H ₁₆ O ₂	180.24	
14	13.57	No identificado	067589-48-4	64	1.93	1519.0173			
15	15.75	No identificado	010407-42-8	72	2.19	1660.0226			

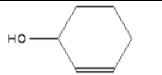
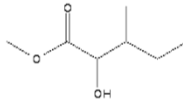
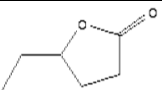
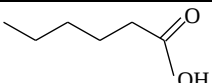
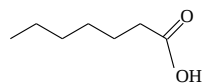
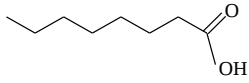
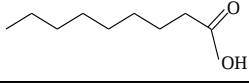
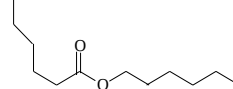
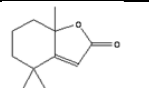
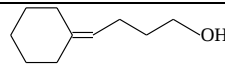


ANEXO 12: Comparación de espectros de masas del ácido hexanoico componente principal del aceite esencial de la ACC72:
 A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.

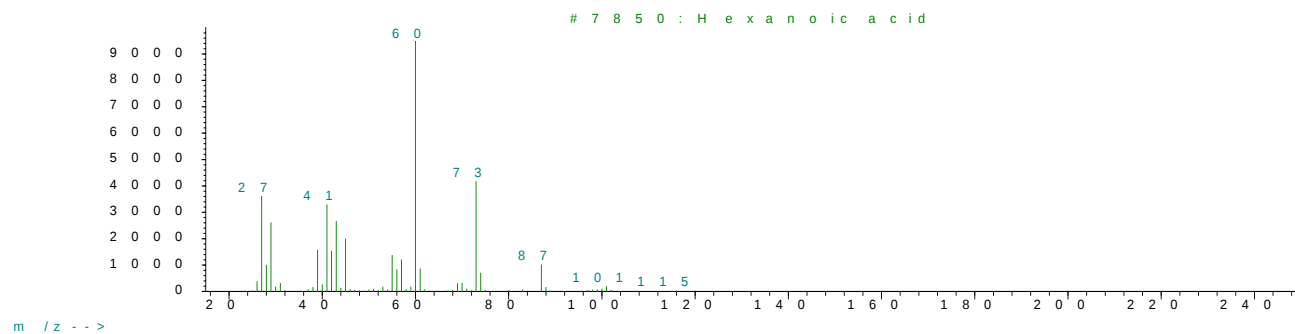
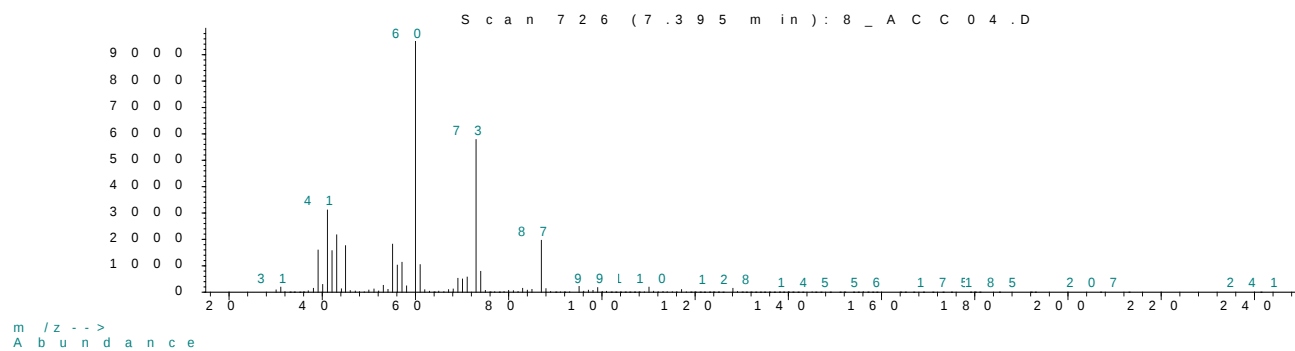
ANEXO 13. Cromatograma del aceite esencial de *Crataegus sulfured* (ACC04).



ANEXO 14. Componentes del aceite esencial de *Crategus sulfured* (ACC04)

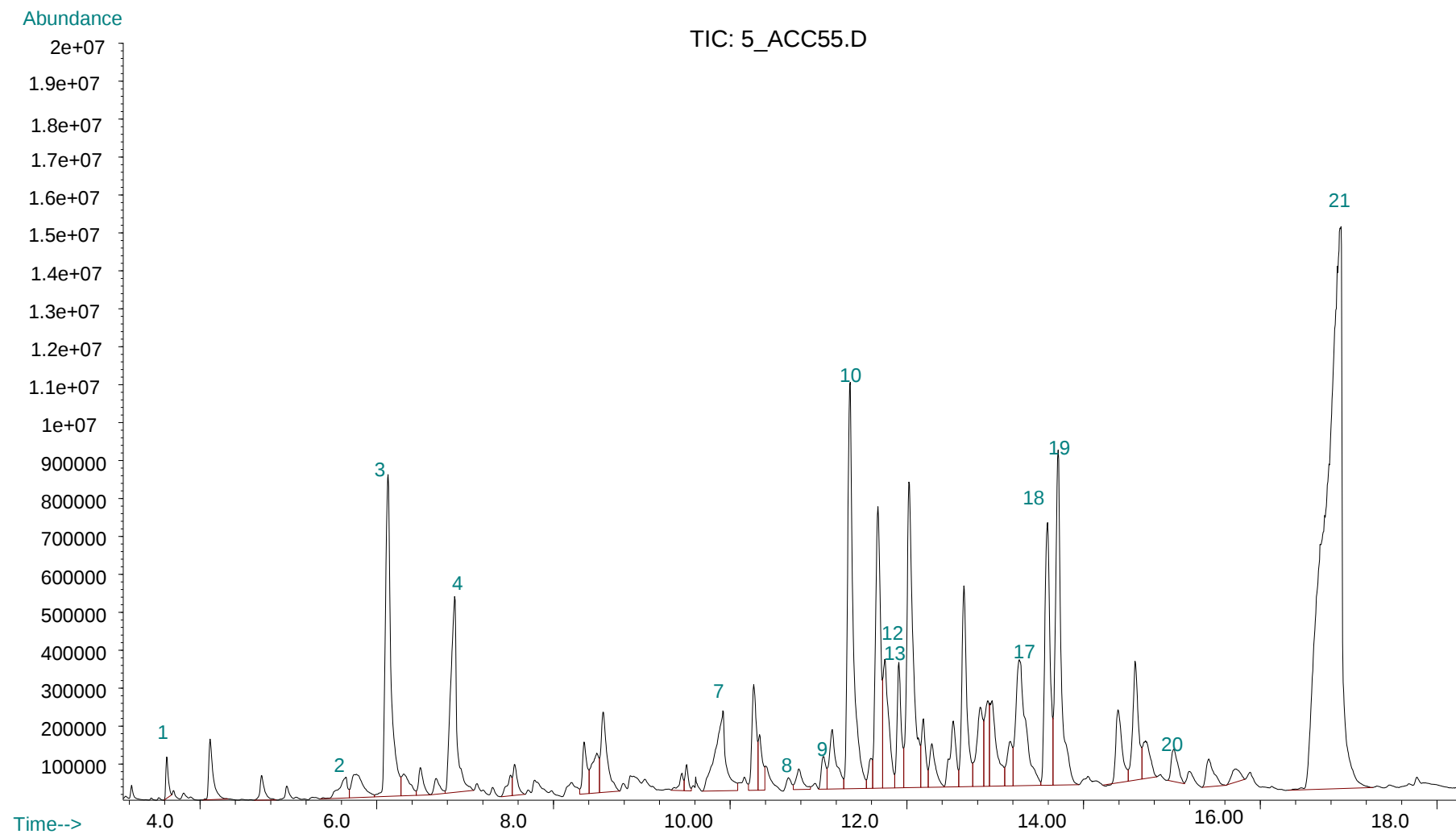
ACC04									
PK	TR	Compuesto	CAS	% I	CR (%)	IK	Formula	PM	Estructura
1	3.87	1-Hexanol	000111-27-3	86	3.23	897.2292	C ₆ H ₁₄ O	102.1748	
2	4.16	2-Ciclohexenol	000822-67-3	89	1.46	897.4236	C ₆ H ₁₀ O	98.1430	
3	4.73	2-Ciclohexenona	000930-68-7	87	0.44	897.805556	C ₆ H ₈ O	96.13	
4	5.57	Ácido 2-hidroxi-metil-pentanoato de metilo	041654-19-7	83	0.77	942.4329	C ₇ H ₁₄ O ₃	146.1843	
5	6.62	2(3H)-Furanone, 5-etildihidro-	000695-06-7	80	6.82	998.2171	C ₆ H ₁₀ O ₂	114.1424	
6	7.4	Ácido hexanoico (Ácido caprico)	000142-62-1	83	23.04	998.3618	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16	
7	7.85	Ácido heptanoico (Ácido enántico)	000111-14-8	83	1.91	1097.9060	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.19	
8	9.18	Ácid Octanoico (Ácido caprilico)	000124-07-2	91	10.97	1197.7430	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.21	
9	10.25	Ácido nonanoico (Ácido pelargónico)	000112-05-0	94	3.93	1297.4963	C ₉ H ₁₈ O ₂	158.24	
10	11.12	Hexanoato de hexilo	006378-65-0	86	0.6	1298.1094	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	200.32	
11	11.4	No identificado	013603-44-6	38	1.12	1366.7468			
12	12.72	No identificado	062338-00-5	42	2.57	1397.9457			
13	13.32	5,6,7,7a-Tetrahidro-4,4,7a-trimetil-2(4H)-benzofuranona (Dihidroactinidiolide)	015356-74-8	98	1.33	1497.6178	C ₁₁ H ₁₆ O ₂	180.24	
14	14.75	4-Ciclohexilideno-1-butanol	004441-58-1	83	0.6	1698.8377	C ₁₀ H ₁₈ O	154.24932	
15	17.06	No identificado	074685-76-0	38	14.56	1896.522			

Abundance



ANEXO 15: Comparación de espectros de masas del ácido hexanoico componente principal del aceite esencial de la ACC04: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.

ANEXO 16. Cromatograma del aceite esencial de *Crataegus mexicana* (ACC55).

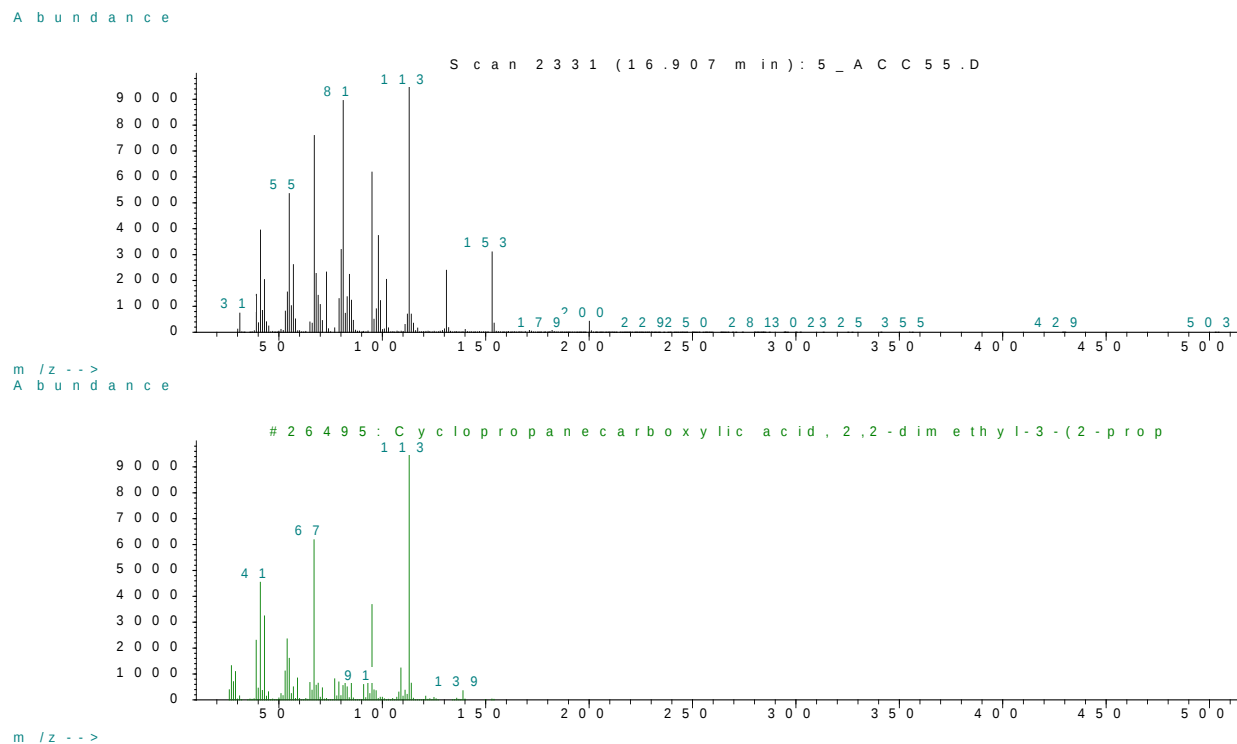


ANEXO 17. Componentes del aceite esencial de *Crataegus mexicana* (ACC55).

ACC55									
PK	TR	Compuesto	CAS	% I	CR %	IK	Formula	PM	Estructura
1	3.63	2-Hexenal	000505-57-7	97	0.29	896.9236	C ₆ H ₁₀ O	98.1430	
2	5.95	Ácido hexanoico (Ácido caprico)	000142-62-1	83	0.51	951.3703	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16	
3	6.13	2-Cloro- ciclohexanol	001561-86-0	95	5.27	997.9868	C ₆ H ₁₁ ClO	134.604	
4	6.89	No identificado	003393-45-1	39	3.47	998.2828			
5	8.35	(R)-4-Isopropil-1-metil-1-cyclohexen-3-ol ((R) 4-Terpinenol)	020126-76-5	94	0.67	1197.3541	C ₁₀ H ₁₈ O	154.2493	
6	8.57	(R) 2-(4-Metilciclohexen-3-en-1-il)-propan-2-ol (R-α-terpineol)	000098-55-5	96	1.47	1197.5347	C ₁₀ H ₁₈ O	154.2493	
7	9.92	Ácido nonanoico (Ácido pelargónico)	000112-05-0	95	2.44	1297.4963	C ₉ H ₁₈ O ₂	158.24	
8	10.78	Antranilato de metilo	000134-20-3	95	0.38	1298.0072	C ₈ H ₉ NO ₂	151.1626	
9	11.06	Benzoato de butilo	000136-60-7	93	0.43	1298.1459	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	178.22766	
10	11.36	No identificado	007766-37-2	47	6.53	1397.2480			
11	11.67	Nicotinato de butilo	006938-06-3	86	4.12	1397.4496	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	179.21	

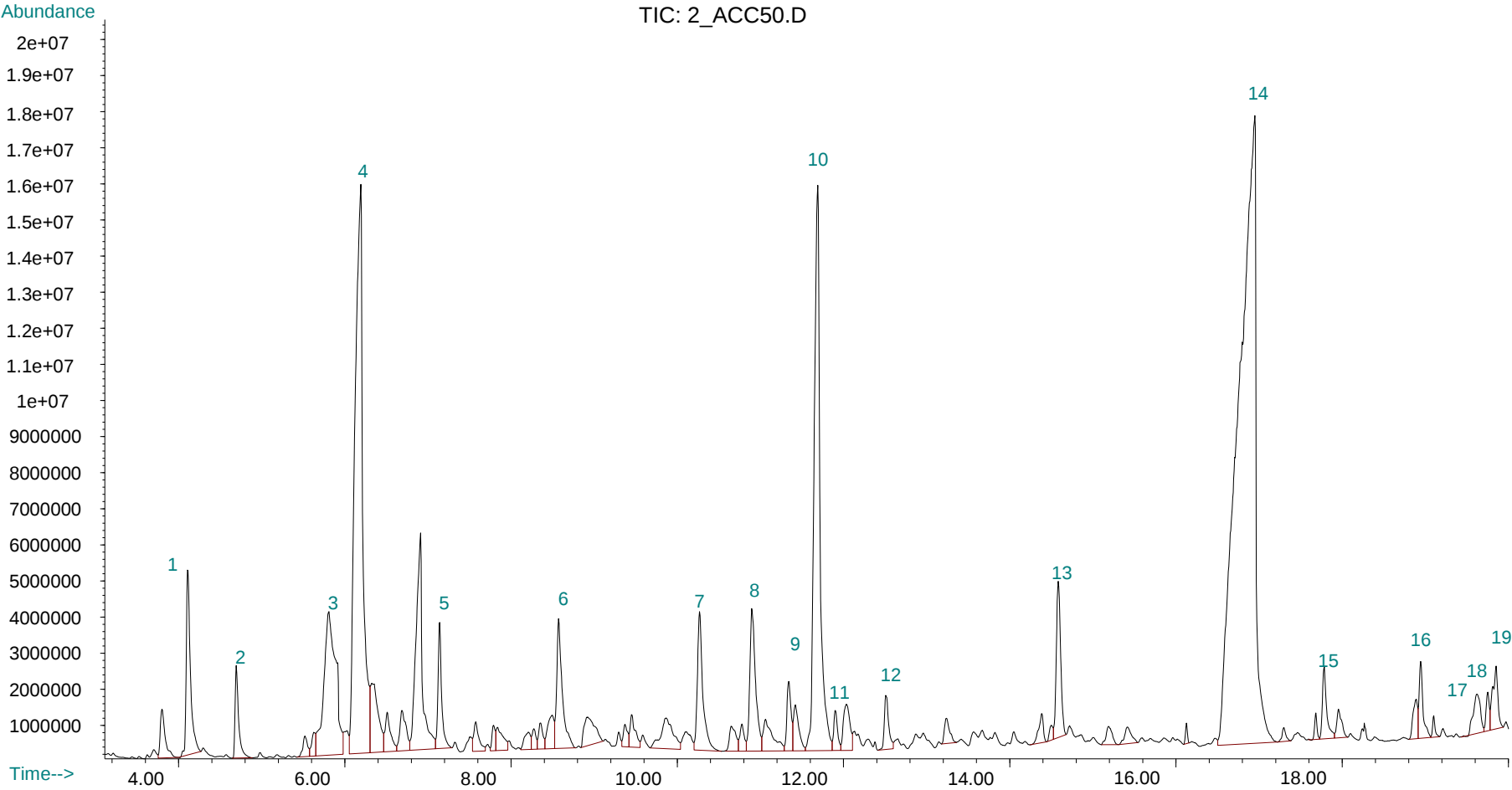
ANEXO 17. Continuación. Componentes del aceite esencial de *Crataegus mexicana* (ACC55).

PK	TR	Compuesto	CAS	% I	CR %	IK	Formula	PM	Estructura
12	11.76	No identificado	183311-94-6	38	2.17	1397.4496			
13	11.91	4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)-2-butanona (Dihidro β-ionona)	017283-81-7	97	1.5	1414.8087	C ₁₃ H ₂₂ O	194.3132	
14	12.03	No identificado	002368-80-1	38	5.51	1428.6961			
15	12.53	4-(2,2,6-Trimetil-1-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ol (β-ionol)	022029-76-1	93	1.16	1496.9756	C ₁₃ H ₂₂ O	194.3132	
16	12.65	No identificado	013837-12-2	43	2.91	1497.0902			
17	13.27	5,6,7,7a-Tetrahydro-4,4,7a-trimetil-2(4H)-benzofuranona (Dihydroactinidiolide)	015356-74-8	98	3.63	1497.6829	C ₁₁ H ₁₆ O ₂	180.24	
18	13.59	No identificado	067589-48-4	50	3.99	1569.8078	C ₂₀ H ₃₀ O ₃	318.45	
19	13.71	No identificado	000499-74-1	43	5.43	1596.8547			
20	15.02	2,4,4-Trimetil-3-(3-oxobutil)-ciclohex-2-enona (3-oxo-7,8-dihidro-β-ionol)	072008-46-9	99	0.61	1696.8198	C ₁₃ H ₂₀ O	208.2967	

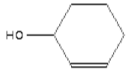
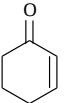
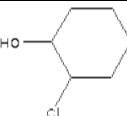
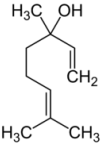
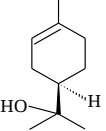
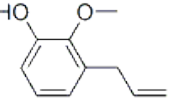
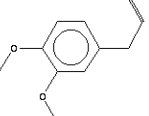
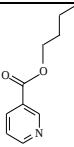


ANEXO 18: Comparación de espectros de masas del ácido 2,2-dimetil-3-2propenil ciclopropanecarboxílico, (reportado como No Identificado debido a su bajo porcentaje de identidad) componente principal del aceite esencial de la ACC55: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.

ANEXO 19. Cromatograma del aceite esencial de *Crataegus mexicana greggiana* (ACC50).

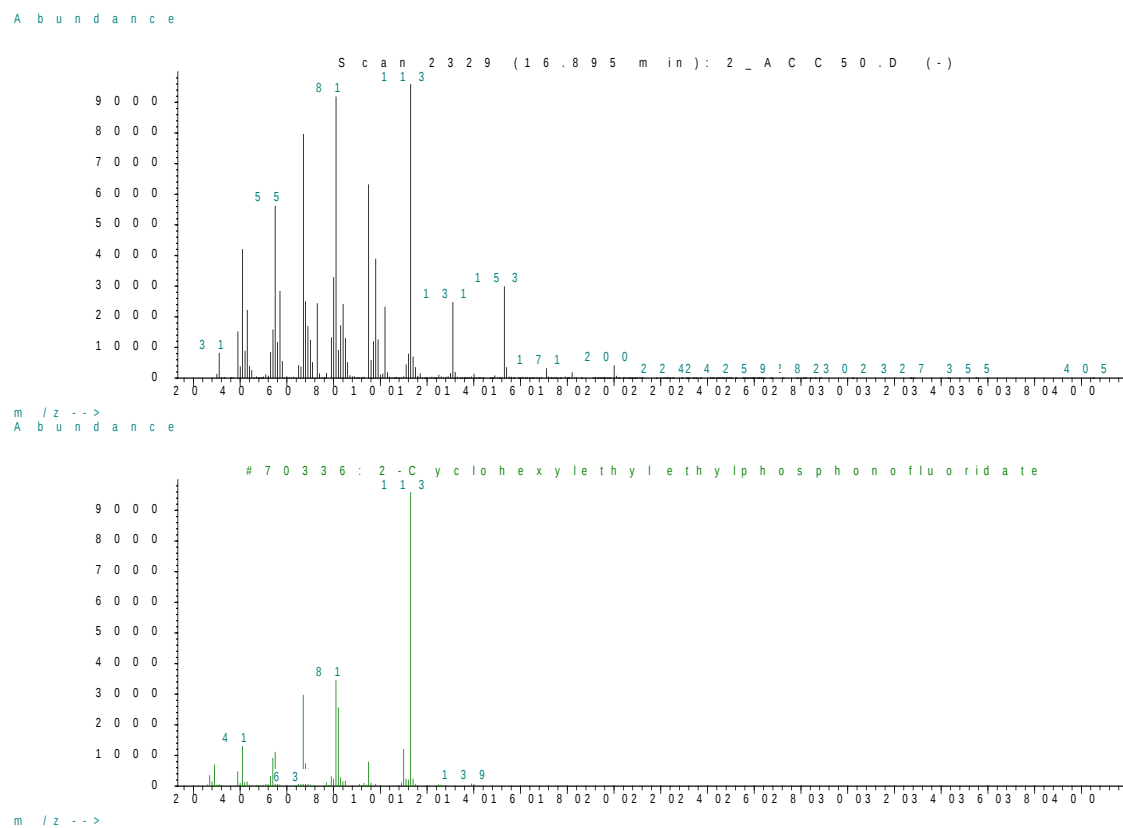


ANEXO 20. Componentes del aceite esencial de *Crataegus mexicana* (ACC50).

ACC50									
PK	TR	Compuesto	CAS	% I	CR (%)	IK	Formula	PM	Estructura
1	4.11	2-Ciclohexenol	000822-67-3	89	2.6	897	C ₆ H ₁₀ O	98.14	
2	4.69	2-Ciclohexenona	000930-68-7	91	1.08	897.8055	C ₆ H ₈ O	96.13	
3	5.81	No identificado	005926-95-4	58	6.03	998			
4	6.19	2-Cloro- ciclohexanol	001561-86-0	94	16.74	998.0000	C ₆ H ₁₁ ClO	134.60	
5	7.14	2,6-Dimetil-2,7-octadien-6-ol (Linalol)	000078-70-6	94	1.52	1097.604	C ₁₀ H ₁₈ O	154.24	
6	8.58	R) 2-(4-Metilciclohexen-3-en-1-il)-propan-2-ol (R-α-terpineol)	000098-55-5	83	2.39	1197.5416	C ₁₀ H ₁₈ O	154.24	
7	10.27	No identificado	002363-88-4	60	2.51	1270.7840			
8	10.9	2-Metoxi-3-(2-propenil)-fenol	001941-12-4	98	2.26	1298.0875	C ₁₀ H ₁₂ O ₂		
9	11.42	Metileugenol	000093-15-2	90	0.67	1363.4904	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	178.22	
10	11.69	Nicotinato de butilo	006938-06-3	91	10.79	1397.4496	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	179.21	

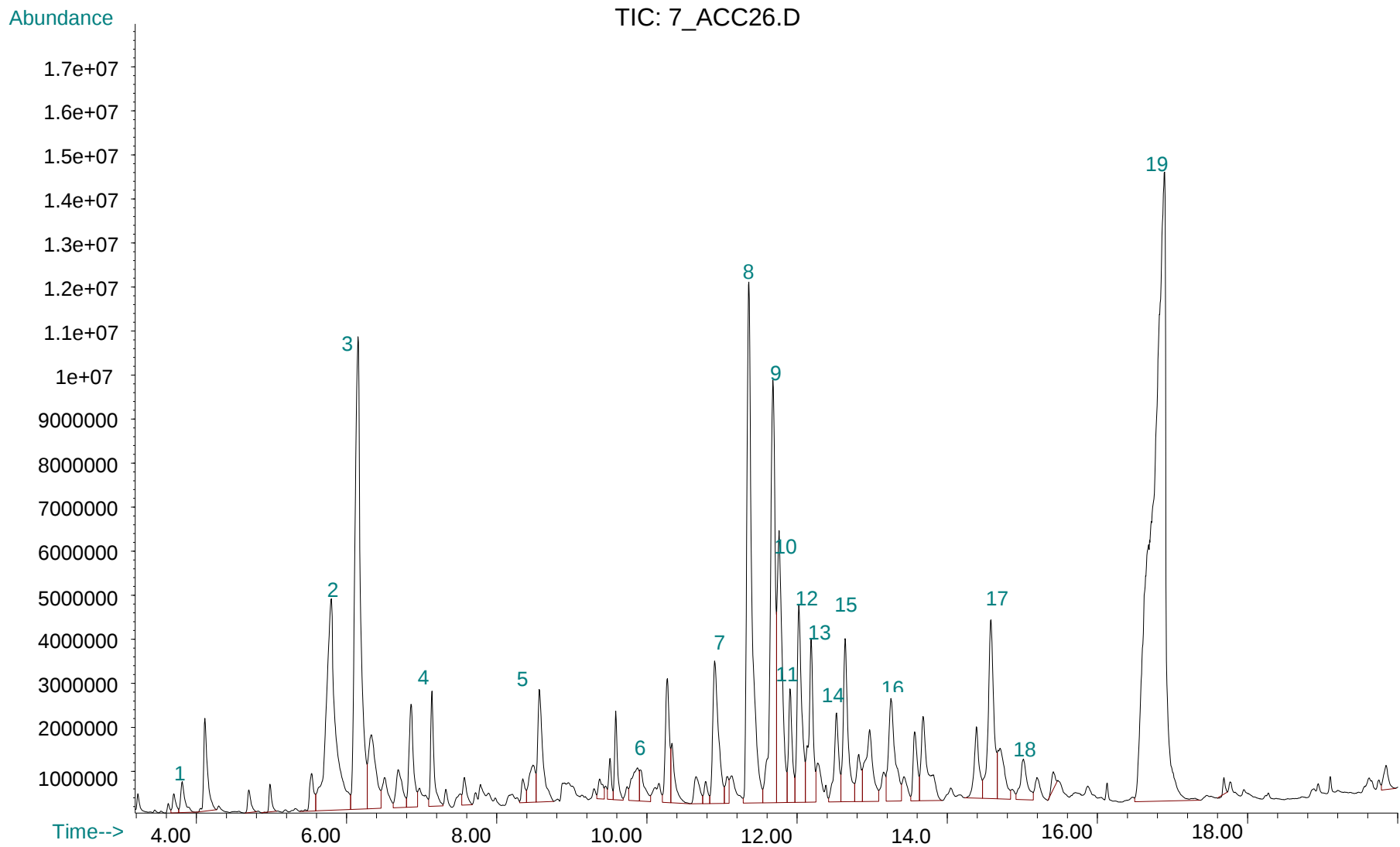
ANEXO 20. Continuación. Componentes del aceite esencial de *Crataegus mexicana* (ACC50).

PK	TR	Compuesto	CAS	% I	CR (%)	IK	Formula	PM	Estructura
11	11.9	4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)-2-butanona (Dihidro β -ionona)	017283-81-7	83	0.39	1422.9296	$C_{13}H_{22}O$	194.31	
12	12.51	4-(2,2,6-Trimetil-7-oxabicyclo-[4.1.0]-hept-1-il)-3-buten-2-ona (β -ionona epóxido)	023267-57-4	92	0.65	1496.9430	$C_{13}H_{20}O_2$	208.3	
13	14.59	No identificado	103129-99-3	59	2.27	1684.0819			
14	16.95	No identificado	074685-76-0	38	36.1	1896.4117			
15	17.78	Ftalato de dibutilo	000084-74-2	96	0.88	1897.1176	$C_{16}H_{22}O_4$	278.34	
16	18.95	Heneicosano	000629-94-7	99	0.97	1898.1126	$C_{21}H_{44}$	296.57	
17	19.62	3-Etenil-cicloocteno	002213-60-7	89	0.94	1898.6824	$C_{10}H_{16}$	136.23	
18	19.75	Ácido hexadecanoico, butil ester Palmitato de butilo	000111-06-8	98	0.41	1898.7930	$C_{20}H_{40}O_2$	312.53	

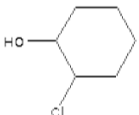
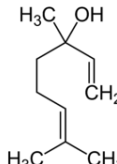
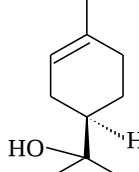
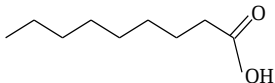
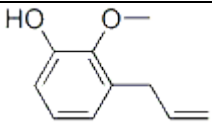
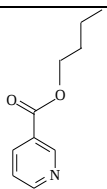


ANEXO 21: Comparación de espectros de masas del etilfosfonofluoridato 2-ciclohexiletil (reportado como No Identificado debido a su bajo porcentaje de identidad) componente principal del aceite esencial de la ACC50: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.

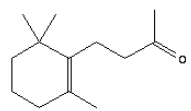
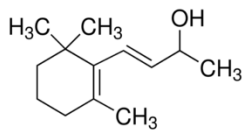
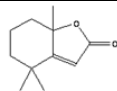
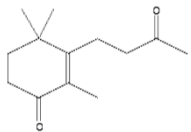
ANEXO 22. Cromatograma del aceite esencial de *Crataegus gracillior* (ACC26



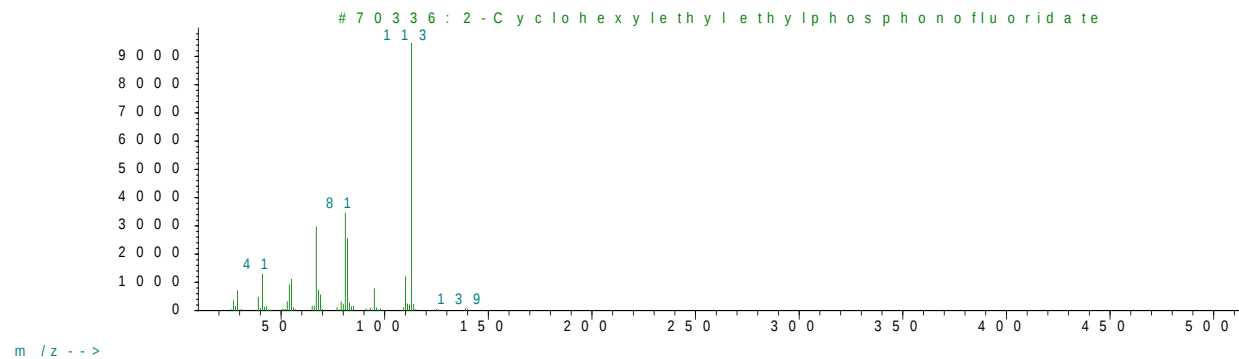
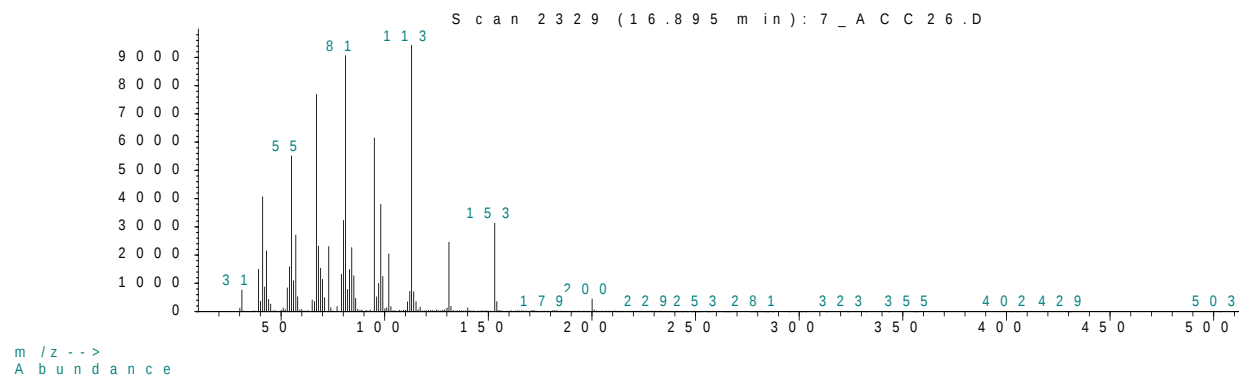
ANEXO 23. Componentes del aceite esencial de *Crataegus gracillior* (ACC26).

ACC26									
PK	TR	Compuesto	CAS	% I	CR (%)	IK	Formula	PM	Estructura
1	3.81	1-Hexanol	000111-27-3	80	0.4	897.055	C ₆ H ₁₄ O	102.1748	
2	5.8	No identificado	005926-95-4	49	6.01	997.8223			
3	6.16	2-Cloro- ciclohexanol	001561-86-0	94	8.23	997.9868	C ₆ H ₁₁ ClO	134.604	
4	7.14	2,6-Dimetil-2,7-octadien-6-ol (Linalol)	000078-70-6	96	1.15	1097.5838	C ₁₀ H ₁₈ O	154.2493	
5	8.57	(R) 2-(4-Metilciclohexen-3-en-1-il)-propan-2-ol (R-α-terpineol)	000098-55-5	83	1.74	1197.5208	C ₁₀ H ₁₈ O	154.2493	
6	9.88	Ácido nonanoico (Ácido pelargónico)	000112-05-0	81	1.19	1297.4306	C ₉ H ₁₈ O ₂	158.24	
7	10.91	2-Metoxi-3-(2-propenil)-fenol	001941-12-4	98	2.48	1298.0875	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	164.20108	
8	11.36	No identificado	007766-37-2	50	7.97	1397.2170			
9	11.68	Nicotinato de butilo	006938-06-3	91	6.15	1397.4996	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	179.21	
10	11.76	No identificado	000874-23-7	43	4.15	1397.5702			

ANEXO 23. Continuación. Componentes del aceite esencial de *Crataegus gracillior* (ACC26).

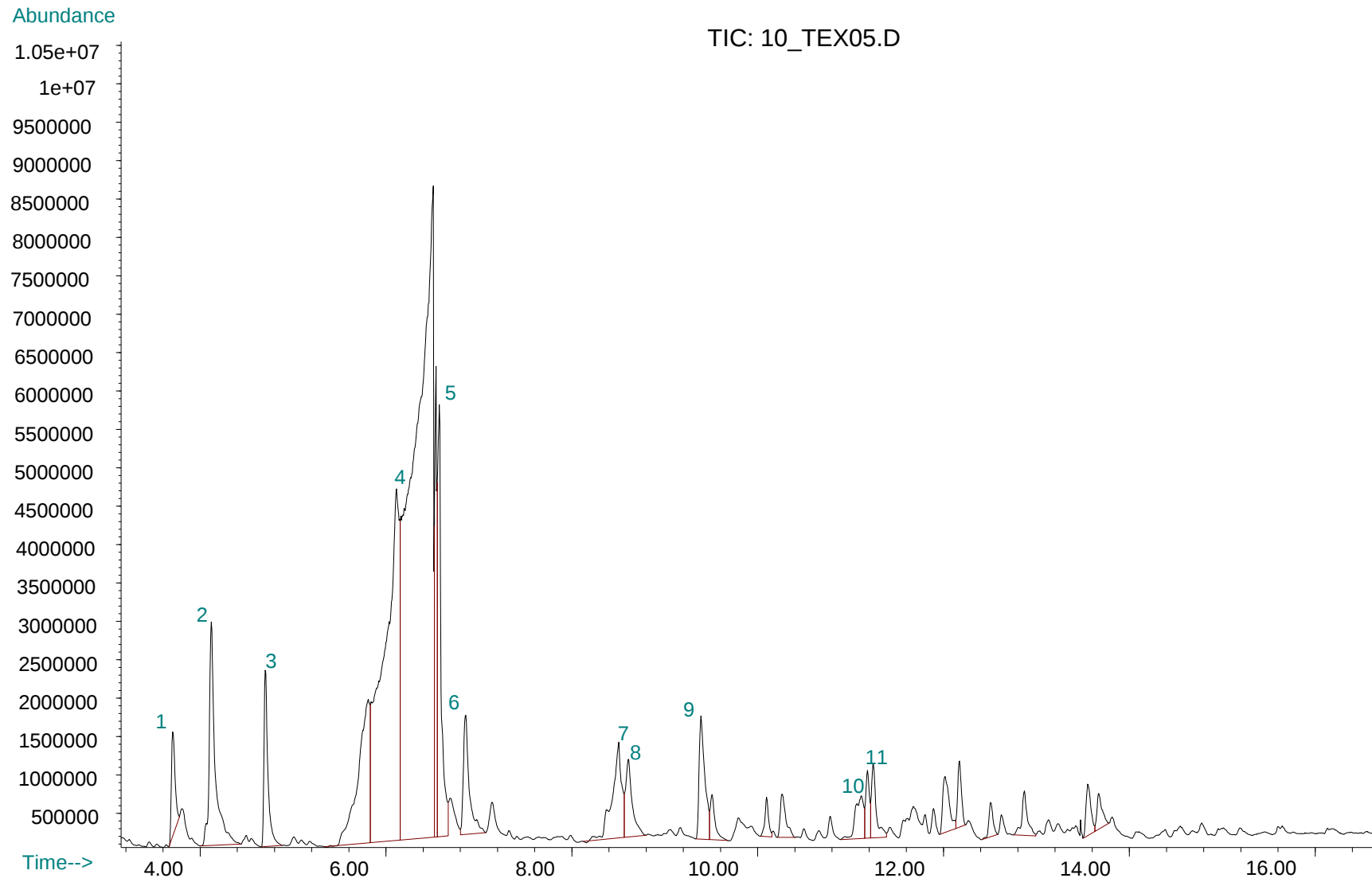
PK	TR	Compuesto	CAS	% I	CR (%)	IK	Formula	PM	Estructura
11	11.9 1	4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)-2-butanona (Dihidro β-ionona)	017283-81-7	97	1.29	1397.7027	C ₁₃ H ₂₂ O	194.3132	
12	12.0 3	No identificado	000823-85-8	38	2.75	1397.8086			
13	12.1 9	No identificado	000108-52-1	43	2.18	1398.5858			
14	12.5 3	4-(2,2,6-Trimetil-1-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ol (β-ionol)	022029-76-1	91	1.25	1496.9430	C ₁₃ H ₂₂ O	194.3132	
15	12.6 4	No identificado	004601-85-8	30	2.36	1497.0434			
16	13.2 6	5,6,7,7a-Tetrahydro-4,4,7a-trimetil-2(4H)-benzofuranona (Dihydroactinidiolide)	015356-74-8	98	2.04	1497.6097	C ₁₁ H ₁₆ O ₂	180.24	
17	14.5 8	No identificado	004413-21-2	35	3.03	1646.9969			
18	15.0 2	2,4,4-Trimetil-3-(3-oxobutil)-ciclohex-2-enona (3-oxo-7,8-dihidro-β-ionol)	072008-46-9	99	0.82	1696.7927	C ₁₃ H ₂₀ O	208.2967	
19	16.8 9	No identificado	1000298-47-5	50	25.2 4	1908.4246			

Abundance



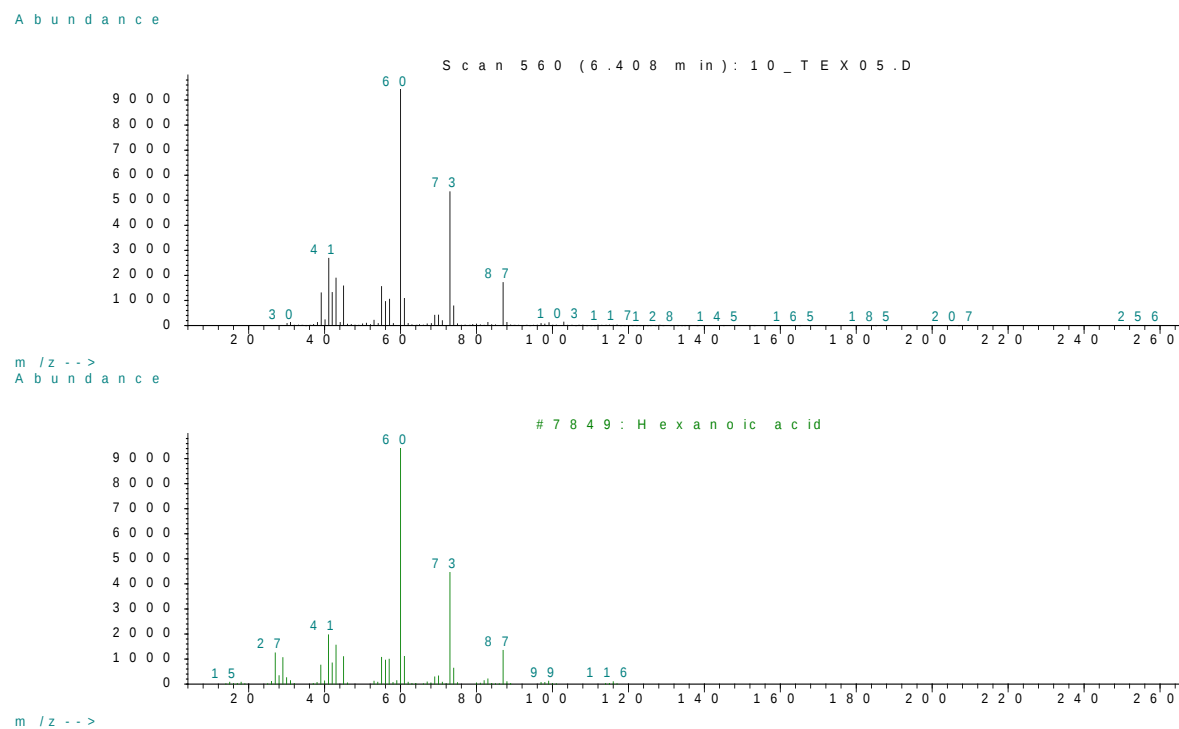
ANEXO 24: Comparación de espectros de masas del etilfosfonofluoridato 2-ciclohexiletil (reportado como No Identificado debido a su bajo porcentaje de identidad) componente principal del aceite esencial de la ACC26: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.

ANEXO 25. Cromatograma del aceite esencial de *Crataegus rosei* (ATEX05).



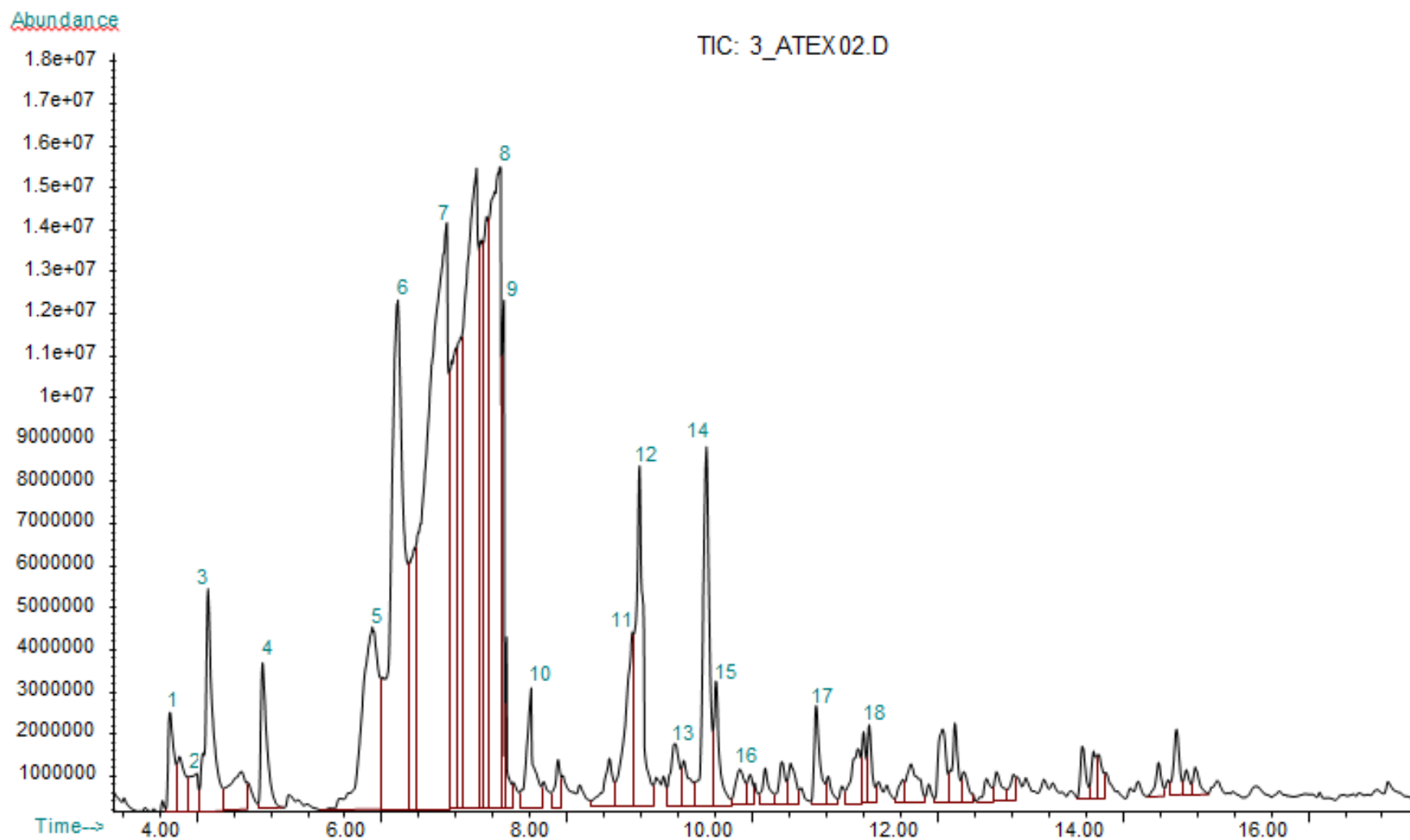
ANEXO 26. Componentes del aceite esencial de *Crataegus rosei* (ATEX05)

ATEX05									
PK	TR	Compuesto	CAS	% I	CR (%)	IK	Formula	PM	Estructura
1	3.71	3-hidroxibutanoato de metilo	001487-49-6	90	1.21	897.1589	C ₅ H ₁₀ O ₃	118.1311	
2	4.13	2-Ciclohexenol	000822-67-3	94	4.35	897.4305	C ₆ H ₁₀ O	98.1430	
3	4.71	2-Ciclohexenona	000930-68-7	91	2.28	897.8055	C ₆ H ₈ O	96.13	
4	6.11	Ácido hexanoico	000142-62-1	83	64.49	998.000	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16	
5	6.57	2(3H)-Furanone, 5-etildihidro-	000695-06-7	90	8.62	998.2171	C ₆ H ₁₀ O ₂	114.1424	
6	6.86	No identificado	003393-45-1	39	2.31	1028.040			
7	8.51	Ácid Octanoico (Ácido caprílico)	000124-07-2	87	2.9	1197.7222	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.21	
8	8.61	(R) 2-(4-Metilciclohexen-3-en-1-il)-propan-2-ol (R-α-terpineol)	000098-55-5	96	1.73	1204.9979	C ₁₀ H ₁₈ O	154.2493	
9	9.39	No identificado	1000190-19-0	42	2.31	1261.7487			
10	11.12	4-Metil-bencidrazida	003290-99-1	81	1.13	1387.6190	C ₈ H ₁₀ ON ₂		
11	11.25	(Z,E)-2,4-decadienoato de metilo	108965-84-0	96	1.17	1397.0775	C ₁₁ H ₁₈ O ₂	182.26	



ANEXO 27: Comparación de espectros de masas del ácido hexanoico, componente principal del aceite esencial de la ATEX05:
 A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.

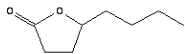
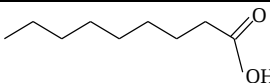
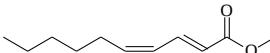
ANEXO 28. Cromatograma del aceite esencial de *Crataegus aurescens* (ATEX02).

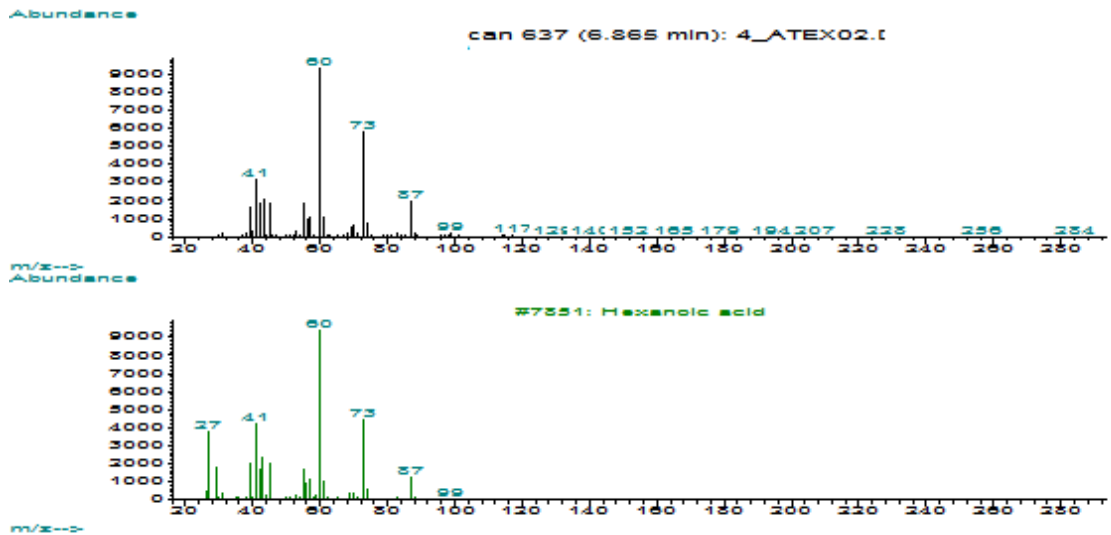


ANEXO 29. Componentes del aceite esencial de Crataegus mexicana (ATEX02).

ATEX02									
PK	TR	Compuesto	CAS	% I	CR (%)	IK	Formula	PM	Estructura
1	3.72	3-hidroxibutanoato de metilo	001487-49-6	90	0.79	811.6209	C ₅ H ₁₀ O ₃	118.1311	
2	4.01	Acido 2-metil- butírico	000116-53-0	80	0.5	836.3969	C ₅ H ₁₀ O ₂	102.1317	
3	4.13	No identificado	021020-27-9	46	2.31	846.64914			
4	4.72	2-Ciclohexenona	000930-68-7	81	1.22	897.805556	C ₆ H ₈ O	96.13	
5	5.9	No identificado	005926-95-4	64	4.43	997.8684			
6	6.18	2-Cloro- ciclohexanol	001561-86-0	80	9.44	998.0000	C ₆ H ₁₁ ClO	134.604	
7	6.7	2(3H)-Furanone, 5-etildihidro-	000695-06-7	81	17.59	998.217105	C ₆ H ₁₀ O ₂	114.1424	
8	7.28	Ácido hexanoico (Ácido caprico)	000142-62-1	83	37.45	1097.4563	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16	
9	7.32	Trans-3-ácido hexenoico	001577-18-0	98	1.63	1097.5344	C ₆ H ₁₀ O ₂	114.1424	
10	7.62	Ácido heptanoico (Ácido enántico)	000111-14-8	90	1.17	1098.1208	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.19	
11	8.71	Ácid Octanoico (Ácido caprílico)	000124-07-2	82	1.96	1197.7013	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.21	
12	8.78	(R) 2-(4-Metilciclohexen-3-en-1-il)- propan-2-ol (R-α-terpineol)	000098-55-5	96	3.34	1197.5972	C ₁₀ H ₁₈ O	154.2493	

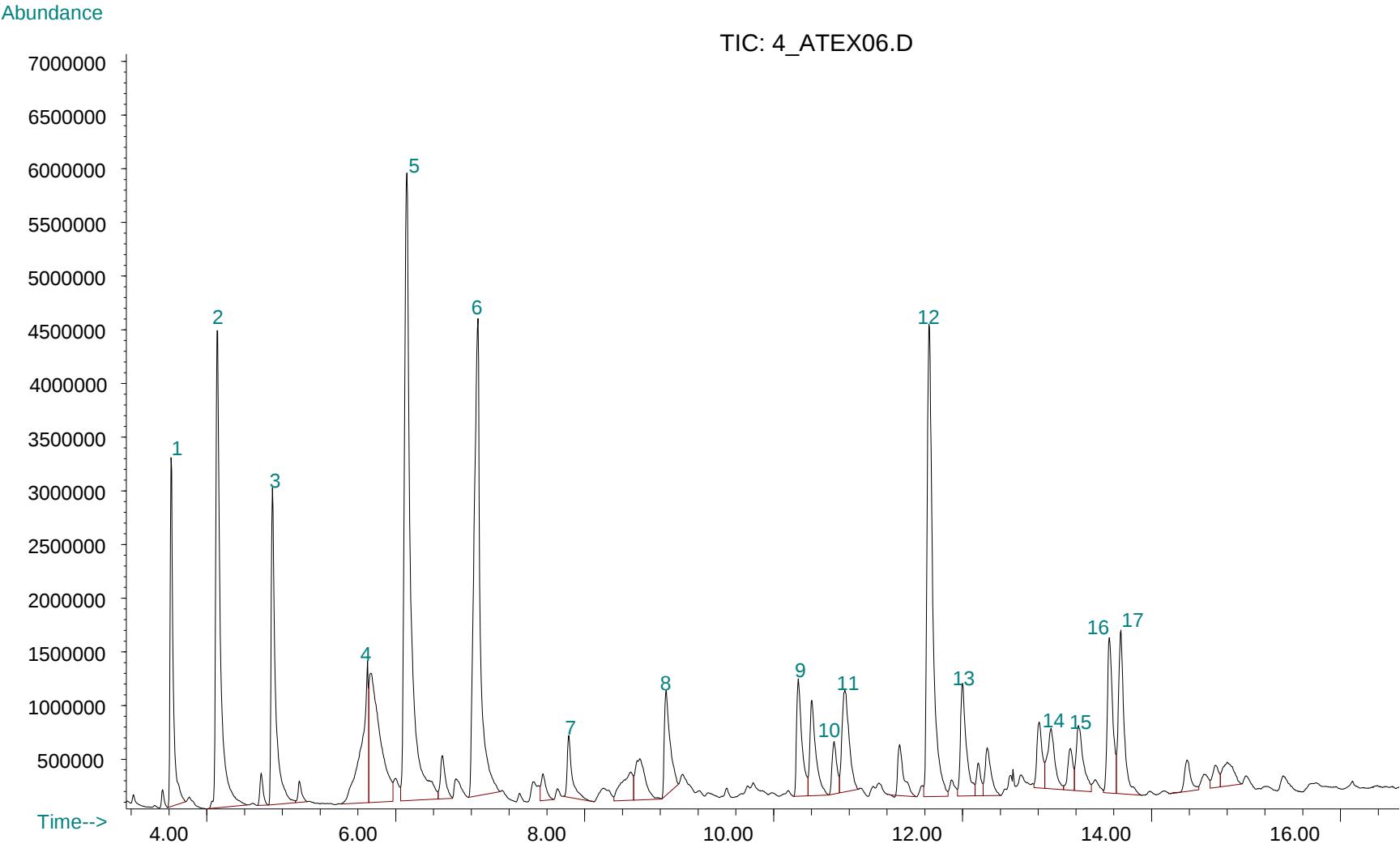
ANEXO 29. Continuación. Componentes del aceite esencial de Crataegus mexicana (ATEX02).

PK	TR	Compuesto	CAS	% I	CR (%)	IK	Formula	PM	Estructura
13	9.17	2-fenoxi-etanol (Fenoxietanol)	000122-99-6	87	0.76	1197.9583	C ₈ H ₁₀ O ₂	138.1638	
14	9.51	No identificado	001587-15-1	53	3.23	1246.2592			
15	9.62	5-Butildihidro-furan-2(3H)-ona (γ-Octalactona)	000104-50-7	90	0.96	1261.8860	C ₈ H ₁₄ O ₂	142.1956	
16	9.87	Ácido nonanoico (Ácido pelargónico)	000112-05-0	96	0.44	1297.4014	C ₉ H ₁₈ O ₂	158.24	
17	10.69	Ciclonon-4-inona	037079-60-0	68	0.77	1413.1889			
18	11.26	(E,Z)- 2,4-decadienoato de metilo	004493-42-9	95	0.5	1494.8669	C ₁₁ H ₁₈ O ₂	182.26	

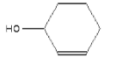
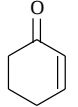
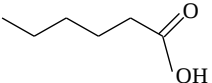
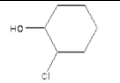
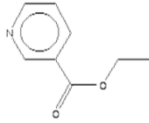
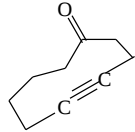
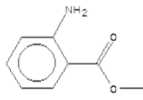
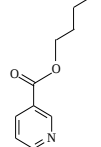


ANEXO 30: Comparación de espectros de masas del ácido hexanoico componente principal del aceite esencial de la ATEX02: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.

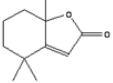
ANEXO 31. Cromatograma del aceite esencial de *Crataegus mexicana* sp.

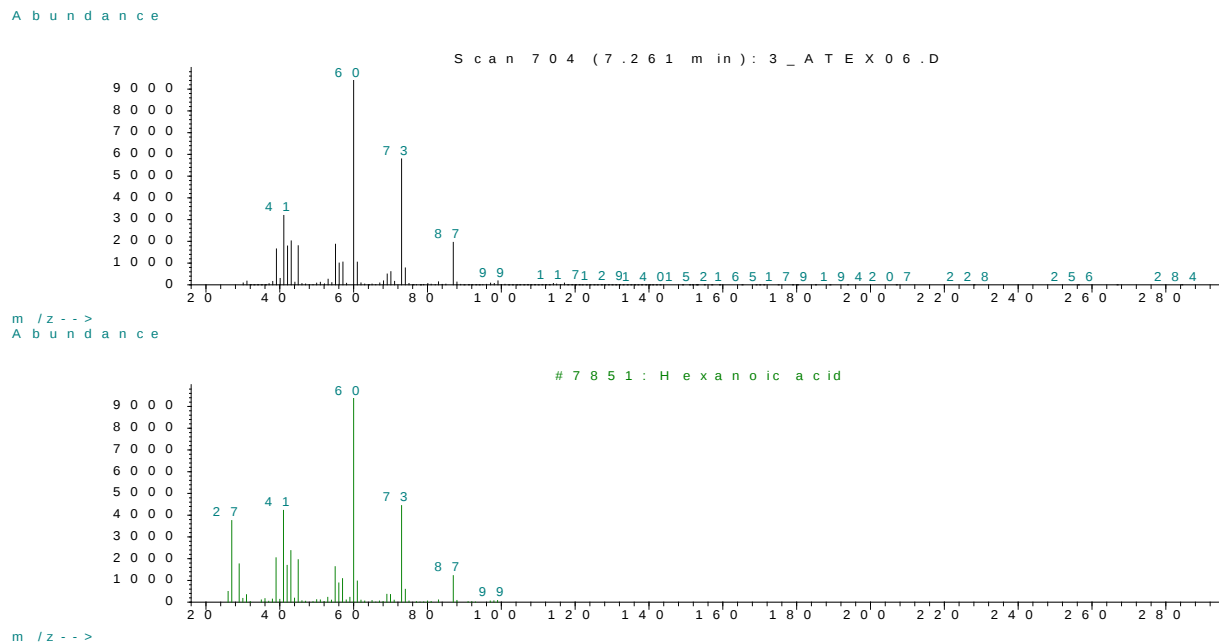


ANEXO 32. Componentes del aceite esencial de *Crataegus* sp.

ATEX06									
PK	TR	Compuesto	CAS	% I	CR (%)	IK	Formula	PM	Estructura
1	3.63	2-Hexenal	000505-57-7	97	4.08	896.9236	C ₆ H ₁₀ O	98.1430	
2	4.11	2-Ciclohexenol	000822-67-3	89	8.31	897	C ₆ H ₁₀ O	98.1430	
3	4.7	2-Ciclohexenona	000930-68-7	91	5.08	897.8055	C ₆ H ₈ O	96.13	
4	5.7	Ácido hexanoico (Ácido caprico)	000142-62-1	83	9.14	997.8486	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16	
5	6.12	2-Cloro- ciclohexanol	001561-86-0	95	15.01	998.0000	C ₆ H ₁₁ ClO	134.604	
6	6.87	No identificado	003393-45-1	39	11.39	1028.040			
7	7.84	Ciclohepteno	000628-92-2	87	1.16	1098.0402	C ₇ H ₁₂	96.1702	
8	8.86	Nicotinato de etilo	000614-18-6	96	2.16	1197.7083	C ₈ H ₉ NO ₂	151.1626	
9	10.26	No identificado	004314-66-3	49	2.45	1276.4803			
10	10.64	Ciclonon-4-inona	037079-60-0	81	1.03	1297.8613	C ₉ H ₁₂ O	136.19098	
11	10.75	Antranilato de metilo	000134-20-3	97	3.33	1298.0145	C ₈ H ₉ NO ₂	151.1626	
12	11.65	Nicotinato de butilo	006938-06-3	91	10.52	1397.4573	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	179.21	

ANEXO 32. Continuación. Componentes del aceite esencial de *Crataegus* sp.

PK	TR	Compuesto	CAS	% I	CR (%)	IK	Formula	PM	Estructura
13	12	No identificado	003201-26-1	47	2.58	1419.6447			
14	12.94	No identificado	1000146-69-5	59	2.16	1479.2339			
15	13.23	5,6,7,7a-Tetrahydro-4,4,7a-trimetil-2(4H)-benzofuranona (Dihidroactinidiolide)	015356-74-8	94	2.07	1497.6178	C ₁₁ H ₁₆ O ₂	1498	
16	13.56	No identificado	000102-29-4	59	3.31	1518.5373			
17	13.68	No identificado	018979-50-5	64	3.68	1526.1445			



ANEXO 33: Comparación de espectros de masas del ácido hexanoico, componente secundario del aceite esencial de la ATEX06: A) espectro del análisis en el espectrómetro de masas; B) espectro de la biblioteca NIST02.