Universidad Nacional Mayor de San Marcos
Universidad del Perú. Decana de América
Facultad de Farmacia y Bioquímica
Escuela Profesional de Farmacia y Bioquímica

Caracterización fisicoquímica y actividad antioxidante *in vitro* del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L.

TESIS

Para optar el Título Profesional de Químico Farmacéutico (a)

AUTOR

Alberto Alan ARIZA ALVA

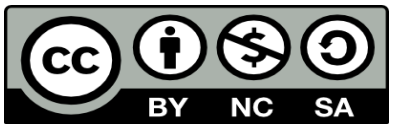
Vianella Lizet CURAY CARHUAMACA

ASESOR

Dr. Oscar HERRERA CALDERÓN

Lima, Perú

2025



Reconocimiento - No Comercial - Compartir Igual - Sin restricciones adicionales

https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/

Usted puede distribuir, remezclar, retocar, y crear a partir del documento original de modo no comercial, siempre y cuando se dé crédito al autor del documento y se licencien las nuevas creaciones bajo las mismas condiciones. No se permite aplicar términos legales o medidas tecnológicas que restrinjan legalmente a otros a hacer cualquier cosa que permita esta licencia.

Referencia bibliográfica

Ariza A, Curay V. Caracterización fisicoquímica y actividad antioxidante *in vitro* del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L. [Tesis de pregrado]. Lima: Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Facultad de Farmacia y Bioquímica, Escuela Profesional de Farmacia y Bioquímica; 2025.

Metadatos complementarios

Datos de autor 1	
Nombres y apellidos	Alberto Alan Ariza Alva
Tipo de documento de identidad	DNI
Número de documento de identidad	76569973
URL de ORCID	No aplica
Datos de autor 2	
Nombres y apellidos	Vianella Lizet Curay Carhuamaca
Tipo de documento de identidad	DNI
Número de documento de identidad	74844768
URL de ORCID	No aplica
Datos de asesor	
Nombres y apellidos	Oscar Herrera Calderón
Tipo de documento de identidad	DNI
Número de documento de identidad	44789288
URL de ORCID	https://orcid.org/0000-0001-7264-0961
Datos del jurado	
Presidente del jurado	
Nombres y apellidos	Julio Luis Díaz Uribe
Tipo de documento de identidad	DNI
Número de documento de identidad	07247790
Miembro del jurado 1	
Nombres y apellidos	José Fidel Jáuregui Maldonado
Tipo de documento de identidad	DNI
Número de documento de identidad	06960780
Miembro del jurado 2	

Nombres y apellidos	Sixto Antonio González Elera
Tipo de documento de identidad	DNI
Número de documento de identidad	08063663
Datos de investigación	
Línea de investigación	B.2.1.1. Plantas medicinales con potencial farmacéutico y productos naturales terapéuticos.
Grupo de investigación	No Aplica
Agencia de financiamiento	Autofinanciamiento
Ubicación geográfica de la investigación	Facultad de Farmacia y Bioquímica de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos. Coordenadas Geográfica: 12°3′20.21″ S, 77°1′24.87″ W País: Perú Departamento: Lima Provincia: Lima Distrito: Lima Calle: Jr. Puno N° 1002-Lima
Año o rango de años en que se realizó la investigación	2022-2025
URL de disciplinas OCDE	1.00.00 -- Ciencias naturales https://purl.org/pe-repo/ocde/ford#1.00.00 1.04.00 – Química https://purl.org/pe-repo/ocde/ford#1.04.00 1.04.01 -- Química orgánica https://purl.org/pe-repo/ocde/ford#1.04.00

Universidad Nacional Mayor de San Marcos
Universidad del Perú. Decana de América
Facultad de Farmacia y Bioquímica
Decanato

ACTA DE SUSTENTACIÓN DE TESIS

Los miembros del Jurado Examinador y Calificador de la Tesis titulada:

Caracterización fisicoquímica y actividad antioxidante *in vitro* del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L.

Que presentan los Bachilleres en Farmacia y Bioquímica:

ALBERTO ALAN ARIZA ALVA Y
VIANELLA LIZET CURAY CARHUAMACA

Que reunidos en la fecha se llevó a cabo la **SUSTENTACIÓN** de la **TESIS**, y después de las respuestas satisfactorias a las preguntas y objeciones formuladas por el Jurado, ha obtenido la siguiente calificación final:

18 (Dieciocho) - Aprobado con mención honrosa

de conformidad con el Art. 14.º del Reglamento General de Grados y Títulos de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos para la obtención del Título Profesional de Químico Farmacéutico (a) de la Facultad de Farmacia y Bioquímica.

Lima, 19 de diciembre de 2025.

Dr. Julio Luis Díaz Uribe
Presidente

Mg. Sixto Antonio González Elera
Miembro

Mg. José Fidel Jauregui Maldonado
Miembro

UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS
Universidad del Perú, Decana de América

CERTIFICADO DE SIMILITUD

Yo, **OSCAR HERRERA CALDERÓN** en mi condición de asesor acreditado con el Dictamen de la UPG o de la EP **DICTAMEN Nº 028-FFB-EPFB-2025** de la tesis / cuyo título es: **"Caracterización fisicoquímica y actividad antioxidante *in vitro* del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L.".** Presentado por los bachilleres en Farmacia y Bioquímica, **ALBERTO ALAN ARIZA ALVA** y **VIANELLA LIZET CURAY CARHUAMACA**, para optar al título profesional de **QUÍMICO FARMACÉUTICO (A).**

CERTIFICO que se ha cumplido con lo establecido en la Directiva de Originalidad y de Similitud de Trabajos Académicos, de Investigación y Producción Intelectual. Según la revisión, análisis y evaluación mediante la plataforma PIDS, el documento evaluado cuenta con el **13%** de similitud, nivel **PERMITIDO** para continuar con los trámites correspondientes y para su **publicación en el repositorio institucional.**

Se emite el presente certificado en cumplimiento de lo establecido en las normas vigentes, como uno de los requisitos para **la obtención del título profesional de Químico Farmacéutico (a).**

Lima, 25 de noviembre de 2025



OSCAR HERRERA CALDERÓN
DNI: 44789288

*Según corresponda: bachiller, magister, doctor: titulo profesional o tílulo de segunda especialidad.

La vigencia del presente certificado corresponde a un periodo de noventa (90) dias desde la fecha de su emisión: siempre que no haya observaciones en el texto durante el proceso de revisión por el jurado informante o surja alguna contingencia.

DEDICATORIA (*)

A nuestros padres y familia que día a día nos apoyaron por el camino que nos condujo a este momento.

A nuestros amigos con quienes compartimos momentos que recordaremos para toda la vida.

A la comunidad quienes nos dan la oportunidad de estudiar en tan prestigiosa universidad.

AGRADECIMIENTOS (*)

Queremos expresar nuestro más sincero agradecimiento al Dr. Oscar quien desde el inicio de esta investigación nos apoyó con su conocimiento y consejos.

Al pueblo de Churín por permitirnos obtener las muestras utilizadas en este proyecto.

ÍNDICE

ABREVIATURAS....8
RESUMEN....9
ABSTRACT....10
I. INTRODUCCIÓN....11
I.2. Objetivos....13
I.2.1. Objetivo general....13
I.2.2. Objetivos específicos....13
I.3. Importancia y alcance de la investigación....13
I.4. Limitaciones de la investigación....14
II. REVISIÓN DE LA LITERATURA....15
II.1. Marco teórico....15
II.1.1. Aspecto botánico....15
II.1.1.1. Clasificación taxonómica....15
II.1.1.2. Descripción morfológica....15
II.1.1.3. Usos y aplicaciones....16
II.2. Antecedentes del estudio....16
II.3. Bases teóricas....19
II.3.1. Aceites esenciales (AE)....19
II.3.1.1. Métodos de extracción de aceites esenciales....19
II.3.1.2. Principales componentes de los aceites esenciales....21
II.3.2. Actividad antioxidante....21
II.3.2.1. Estrés oxidativo....22
II.3.2.2. Radicales libres....23
II.3.3. Radical 2,2'-azino-bis-3-etilbenzotiazolina-6-sulfónico (ABTS)....24
II.3.4. Radical 2,2-difenil-1-picrilhidrazilo (DPPH)....24
II.3.5. Capacidad de reducción del hierro (FRAP)....24
II.3.6. Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas (GC-MS)....25
II.4. Glosario de términos....25
III. HIPÓTESIS Y VARIABLES....26
III.1. Hipótesis....26
III.2. Variables....26
III.3. Operacionalización de variables....27
IV. MATERIALES Y MÉTODOS....28
IV.1. Área de estudio....28
IV.2. Diseño de investigación....28
IV.3. Población y muestra....28
IV.4. Procedimientos, técnicas e instrumentos de recolección de información....28
IV.4.1. Tratamiento de muestra....28

IV.4.2. Extracción del aceite esencial (AE) 28
IV.4.3. Caracterización física del aceite 28
IV.4.4. Caracterización química del aceite 28
IV.4.5. Evaluación de la actividad antioxidante por DPPH 28
IV.4.5. Evaluación de la actividad antioxidante por ABTS 30
IV.4.5. Evaluación de la actividad antioxidante por FRAP 31
V. RESULTADOS 32
V.1. Caracterización física 32
V.2. Caracterización química 33
V.3. Actividad antioxidante por DPPH 41
V.4. Actividad antioxidante por ABTS 46
V.5. Actividad antioxidante por FRAP 51
VI. DISCUSIÓN 54
VII. CONCLUSIONES 59
IX. RECOMENDACIONES 60
X. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS 61
XII. ANEXOS (*) 71

ABREVIATURAS

ABTS: 2,2'-azino-bis-3-etilbenzotiazolina-6-sulfónico

AESM: aceite esencial de *Schinus molle*

BHA: butilhidroxianisol

BHT: butilhidroxitolueno

DPPH: 2,2-Difenil-1-Picrilhidrazilo

FRAP: Ferric Reducing Antioxidant (capacidad de reducción del hierro)

GC-MS: Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas

IARC: International Agency for Research on Cancer (Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer)

Ox/Red: óxido/reducción

RNS: Reactive Nitrogen Species (especies reactivas de nitrógeno)

ROS: Reactive Oxygen Species (especies reactivas de oxígeno)

SM: *Schinus molle*

UV: ultravioleta

TEAC: Capacidad Antioxidante Equivalente de Trolox

ET/g: Equivalente de Trolox por gramo

RESUMEN

El *Schinus molle* L., conocido como «molle» en Perú, es un árbol autóctono de los Andes sudamericanos. Tiene una copa frondosa y denso follaje, alcanzando entre 10 y 12 metros de altura. Su tronco ramificado mide hasta 1,5 metros de diámetro en la base. Las hojas son compuestas, lanceoladas, con bordes lisos o aserrados y un aroma característico. Los frutos, de color rojo brillante, crecen en racimos y tienen un sabor dulce. Es utilizada por los pobladores para un alivio reumático, analgésico, antiséptico, purgante, calmante para los calambres estomacales y diurético. Esta investigación tuvo como objetivo determinar la caracterización fisicoquímica y la actividad antioxidante *in vitro* del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L. Para ello se recolectó la muestra de molle, se extrajo el aceite esencial mediante el sistema de destilación por arrastre de vapor. Se realizó la cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC/MS) para identificar los componentes químicos volátiles y se obtuvieron 37 compuestos, de los cuales el aromadendreno (18,15%), δ-cadineno (12,65%) y el α-humuleno (11,92%) fueron los metabolitos con mayor abundancia en el aceite esencial. La capacidad antioxidante del aceite esencial se analizó por los métodos del DPPH, ABTS y FRAP, lo que resultó como TEAC 207,11 µg ET/g, 3017,43 µg ET/g y 0,0058 mmol ET/g respectivamente. Se pudo concluir que el rendimiento para este aceite es de 4% aproximadamente, que los sesquiterpenos son los compuestos con mayor presencia y en caso de la actividad antioxidante esta es moderada por lo que es recomendable explorar otros métodos de extracción.

Palabras clave: *Schinus molle* L., antioxidante, DPPH, ABTS, FRAP.

ABSTRACT

Schinus molle L., known as ‘molle’ in Peru, is a tree native to the South American Andes. It has a leafy crown and dense foliage, reaching between 10 and 12 meters in height. Its branched trunk measures up to 1.5 meters in diameter at the base. The leaves are compound, lanceolate, with smooth or serrated edges and a characteristic aroma. The bright red fruits grow in clusters and have a sweet taste. It is used by villagers for rheumatic relief, analgesic, antiseptic, purgative, soothing for stomach cramps and diuretic. This research aimed to determine the physicochemical characterization and *in vitro* antioxidant activity of the essential oil of the fruit of *Schinus molle* L. For this purpose, the molle sample was collected, the essential oil was extracted by steam distillation. Gas chromatography coupled to mass spectrometry (GC/MS) was performed to identify the volatile chemical components and 37 compounds were obtained, of which aromadendrene (18.15%), δ-cadinene (12.65%) and α-humulene (11.92%) were the metabolites with the highest abundance in the essential oil. The antioxidant capacity of the essential oil was analyzed by DPPH, ABTS and FRAP methods, which resulted as TEAC 207.11 µg ET/g, 3017.43 µg ET/g and 0.0058 mmol ET/g respectively. In conclusion, the essential oil of *Schinus molle* fruit is not a good antioxidant.

Keywords: *Schinus molle, antioxidant,* DPPH, ABTS, FRAP.

I. INTRODUCCIÓN

I.1. Planteamiento del problema:

El Perú es un país que posee una gran diversidad de suelos por las diferentes regiones geográficas; así como, los agentes climáticos y biológicos que promueven el crecimiento de una gran diversidad de flora con diferentes efectos terapéuticos, por ejemplo, el efecto antioxidante. El apogeo que han alcanzado las plantas medicinales como forma alternativa a los fármacos pone de manifiesto la gran importancia de estudiar su farmacología desde el desarrollo de una determinada sustancia mediante la utilización de técnicas fitoquímicas, a partir de las cuales se elabora un nuevo fármaco basado en una determinada molécula (1). Es por ello que, en los diferentes sectores: farmacéutico, cosmético y alimentario buscan hacer uso de la gran biodiversidad de flora peruana para elaborar productos con mayor valor extrínseco (2). Si bien se ha evidenciado la relevancia de investigar las plantas medicinales, el nivel de investigación en esta área está todavía en desarrollo, en comparación con el de los medicamentos. Entre las plantas medicinales más investigadas del Perú está la maca (*Lepedium meyenii*), que es la que cuenta con el mayor número de estudios. También existe abundante bibliografía sobre la hierba santa (*Piper auritum*), uña de gato (*Uncaria tomentosa*), la sangre de grado (*Croton lechleri*) y el chuchuhuasi (*Maytenus macrocarpa*) (1).

En los últimos años, se han investigado diversas especies vegetales por sus diversas propiedades, como su capacidad antioxidante. Esto es crucial para procesos fisiológicos como el envejecimiento, así como para respuestas inflamatorias y diversas enfermedades patológicas como la diabetes, enfermedades cardiovasculares, Alzheimer, Parkinson y varios tipos de cáncer, donde tanto la generación de radicales libres como la defensa antioxidante son fundamentales para preservar la salud (3). Por esta razón, los recursos vegetales que poseen actividad antioxidante son los más prometedores en los campos farmacéuticos, alimentarios y cosméticos.

Los antioxidantes ofrecen varios beneficios para la salud, estos compiten contra el estrés oxidativo para proteger las células del daño. Por esta razón, se consideran como un elemento crucial para la prevención y el posible tratamiento de diversas enfermedades. Las industrias farmacéutica, cosmética y alimentaria han depositado su confianza en los antioxidantes para lograr mejorar la calidad y eficacia de sus productos, haciéndolos indispensables en el campo de la salud, alimentario y cosmético (4). Entre los antioxidantes más comunes están BHA, BHT, Vitamina C, minerales, entre otros. Sin embargo, la FDA establece valores de exposición diaria para el uso de estos. Por lo cual la búsqueda de nuevos antioxidantes con mayores rangos de exposición de origen vegetal es cada vez mayor y puede llegar a sustituir el uso de antioxidantes sintéticos (5).

Tabla 1: Antioxidantes usados en las diferentes industrias (5)

Antioxidantes	Dosis máxima de exposición
BHA	8 mg
BHT	8 mg
Acido ascórbico	1440 mg
Vitamina E	246 mg

En el Perú durante el presente año se presentó un índice de radiación UV extremadamente alto, alcanzando picos de 18 (6), lo que supone un alto riesgo para las personas que se exponen al sol sin contar con protección. Esto se debe a que nos hallamos cercanos a la línea ecuatorial, donde la radiación UV incide en forma perpendicular, amenazando la salud de la población.

Actualmente, en nuestro país no se han realizado estudios sobre qué metabolitos del fruto de *Schinus molle* L. son responsables de la actividad antioxidante. Es por eso que nuestro estudio tiene como objetivo principal determinar la actividad antioxidante del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L., así como identificar los metabolitos.

I.2. Objetivos

I.2.1. Objetivo general

Determinar la caracterización fisicoquímica y la actividad antioxidante *in vitro* del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L.

I.2.2. Objetivos específicos

1. Caracterizar los parámetros físicos del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L. obtenido por arrastre de vapor.
2. Determinar la composición química del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L. por Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas.
3. Evaluar la actividad antioxidante del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L. por 2,2-Difenil-1-Picrilhidrazilo (DPPH).
4. Evaluar la actividad antioxidante del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L. por la reacción del radical ácido 2,2'-azino-bis-3-etilbenzotiazolina-6-sulfónico (ABTS).
5. Evaluar la actividad antioxidante del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L. por la capacidad antioxidante reductor del hierro (FRAP).

I.3. Importancia y alcance de la investigación

Los radicales libres (RL) son partículas atómicas o moleculares inestables y altamente reactivas que afectan a los enlaces proteicos de los tejidos. Se generan de manera natural y constante. El estrés oxidativo ocurre cuando se desequilibra la formación de especies reactivas de oxígeno respecto a los procesos antioxidantes de defensa, lo que conduce a alteraciones fisiológicas y bioquímicas que pueden ocasionar el daño y la muerte celular (7).

La Agencia Internacional de Investigación en Cáncer (IARC) en el año 2020, estimó que se reportaron aproximadamente 19,3 millones de nuevos casos de cáncer y cerca de diez millones de fallecimientos relacionados en todo el mundo. A nivel regional, el cáncer representa la segunda causa de muerte, y en el Perú se estimó una incidencia de 211,8 nuevos casos y una tasa de

mortalidad de 106,1 por cada 100 000 habitantes (8). En Perú, los tipos de cáncer más frecuentes en hombres son el de próstata (21,7%), pulmón (9,5%) y colorrectal (8%), mientras que en mujeres son el de mama (25,2%), pulmón (8,5%) y colorrectal (8,2%). Se prevé que para el año 2030 la incidencia del cáncer aumentará en un 32%, alcanzando los cinco millones de casos nuevos anuales (9).

Los agentes antioxidantes son sustancias químicas que interaccionan con los radicales libres, provocando su neutralización y, por tanto, evitando su capacidad de causar daño. También se conocen como «limpiadores» de radicales libres. El cuerpo humano produce algunos antioxidantes en el interior, conocidos como antioxidantes endógenos, que se utilizan para neutralizar los radicales libres. Sin embargo, el cuerpo depende de fuentes externas para obtener el resto de los antioxidantes necesarios, fundamentalmente a través de la ingesta de alimentos. Estos antioxidantes externos son comúnmente referidos como antioxidantes alimentarios. (10).

En la actualidad en el Perú se ha venido investigando las hojas de *Schinus molle* L. las cuales han demostrado tener actividad antioxidante, por lo que en nuestro trabajo buscamos demostrar si el fruto de *Schinus molle* L. también posee actividad antioxidante; ya que, en la actualidad no se han presentado estudios sobre el fruto.

I.4. Limitaciones de la investigación

El presente estudio tiene algunas limitaciones, una de ellas es que la muestra fue recolectada de una sola localidad (Churín), por lo que no se puede comparar con *Schinus molle* L. de las diferentes regiones del país.

Asimismo, no se va a realizar una identificación de los metabolitos responsables de la actividad antioxidante, por lo cual no se podrá determinar cuál(es) es/son los metabolitos responsables de la actividad.

II. REVISIÓN DE LA LITERATURA

II.1. Marco teórico

II.1.1. Aspecto botánico

II.1.1.1. Clasificación taxonómica

La siguiente clasificación taxonómica, según el Sistema de Clasificación APG IV, ha sido realizada por Hamilton Beltrán Santiago en el Museo de Historia Natural de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos y corresponde a la especie *Schinus molle* L.

ORDEN: Sapindales
FAMILIA: ANACARDIACEAE
GÉNERO: *Schinus*
ESPECIE: *Schinus molle* L.

II.1.1.2. Descripción morfológica

El *Schinus molle* L. (SM) conocido comúnmente en Perú como «molle», es un frondoso árbol autóctono de los Andes sudamericanos. Es un árbol de copa frondosa, con un denso follaje y frutos de aspecto llamativo. Puede alcanzar una altura de entre 10 y 12 metros. Su tronco, ramificado, tiene un diámetro de 1,5 metros en la base. Las hojas son compuestas, de forma lanceolada, con bordes lisos o aserrados y muy aromáticas. Los frutos son de color rojizo brillante, crecen en racimos y tienen un sabor dulce (11,12).



Figura 1. Árbol de molle. (Fuente propia)

II.1.1.3. Usos y aplicaciones

Los habitantes de Churín suelen usar la planta para un alivio reumático, analgésico, antiséptico, purgante, calmante para los calambres estomacales y diurético. Además, las hojas, las frutas y el látex tienen aplicación para muchas afecciones, incluidos los cólicos menstruales, respiratorios, urinarios, antidepresivo y estimulante digestivo (13). El aceite esencial de hojas y frutos de *SM* posee propiedades antibacterianas (bacterias grampositivas y gramnegativas), antifúngicas, insecticidas, repelentes y citotóxicas (14).

II.2. Antecedentes del estudio

- Herrera O., et al. 2022 realizaron un estudio que evaluó la capacidad antioxidante e insecticida del aceite esencial de hojas de *Schinus molle.* Utilizaron cromatografía GC-MS para identificar los compuestos volátiles y ensayos DPPH, ABTS y FRAP para evaluar la capacidad antioxidante. Obteniendo como resultado 34 componentes y una capacidad antioxidante baja (15).
- Vásquez A. evaluó en 2021 la actividad antioxidante y antimicrobiana en complejos de inclusión con dos tipos de ciclodextrinas. La determinación fue realizada por GC-MS y la actividad antioxidante por

el método ABTS y ORAC-FL. Como resultado del estudio, se identificaron 45 componentes y se evaluó el efecto antioxidante de las ciclodextrinas utilizando los métodos ABTS y ORAC-FL, y los resultados fueron estadísticamente significativos en comparación con el aceite esencial solo (16).

- Bendaoud H., et al. 2010 realizaron un estudio en el que evaluaron la composición y la actividad antioxidante de los aceites esenciales de los frutos de las dos especies *(Schinus molle y Schinus terebinthifolius).* Se analizó mediante CG-FID y CG-MS y la propiedad antioxidante se evaluó mediante los ensayos DPPH y ABTS, de los cuales se obtuvieron cuatro componentes principales y una actividad antioxidante mayor para *Schinus terebinthifolius.* (17).
- Hosni K., et al. 2011 evaluaron el efecto del estado de madurez sobre los lípidos totales, los ácidos grasos, el rendimiento y la composición de aceites esenciales y de eliminación de radicales libres de los frutos de *Schinus molle*. Como resultado se obtuvo que la maduración disminuyo el porcentaje de aceite esencial y que la actividad antioxidante fue muy débil frente al reactivo DPPH (18).
- Min K., et al. 2021 compararon la actividad química y propiedad antioxidante entre la pimienta negra y pimienta rosa (*Schinus molle* L.), por el método de DPPH y ABTS, se obtuvo que en la pimienta rosa el contenido de flavonoides y la actividad de eliminación de radicales es más alto (19).
- Según Rebolledo V., et al. 2021 realizaron la determinación del perfil fitoquímico y el efecto antioxidante mediante FRAP y DPPH de los extractos de acetato de etilo, metanólico y acuoso de *Schinus areira* L, donde se obtuvo que el extracto metanólico tuvo mayor presencia de compuestos polifenólicos y mayor actividad antioxidante (20).
- Llanos S. 2012 realizó la caracterización fisicoquímica e identificación de los componentes del aceite esencial del fruto de *Schinus molle L*. Se utilizó GC-FID para la identificación de los compuestos químicos obteniendo los siguientes componentes: limoneno, α-pineno, β-pineno, β-mirceno, y α-felandreno (21).

- Oliveira MBS., et al. 2020 evaluaron el contenido de compuestos fenólicos empleando el reactivo FC y la capacidad antioxidante por DPPH y FRAP de los extractos etanólicos del fruto y de la cáscara del fruto de *S. terebinthifolius*, obteniendo como resultado que el extracto de la cáscara del fruto tiene mayor capacidad antioxidante. (22).
- Martins M., et al. 2014 evaluaron la actividad antioxidante de los aceites esenciales de hojas y frutos de *Schinus molle* por los métodos DPPH y β-caroteno/ácido linoleico. Los aceites esenciales resultaron con una actividad antioxidante por DPPH y una mayor actividad por el método de β-caroteno/ácido linoleico (14).
- Según Volpini-Klein A., et al. 2020 analizaron la utilidad de los extractos de *Schinus molle* en comparación con el antioxidante sintético BHT. La evaluación de la propiedad antioxidante se determinó por los ensayos ABTS y DPPH y el método Rancimat para analizar la eficacia de los extractos, donde el extracto de hojas de *S. molle* presentó mayor capacidad antioxidante (23).
- Regina E., et al. 2019. evaluaron la actividad antioxidante del aceite esencial de las hojas de *Schinus lentiscifolius* Marchand utilizando el método DPPH, donde el aceite esencial presentó una actividad antioxidante en función de la dosis, que alcanza el 54,4 % a 100 mg/ml (24).
- Feriane A., et al. 2020. evaluaron la actividad antioxidante *in vitro* de los frutos de *S. terebinthifolius* y *S. molle* mediante los métodos de ensayo de poder reductor, ABTS y DPPH, donde PSTF presentó una actividad antioxidante superior que PSMF en los ensayos mencionadas (25).
- Bernardes N., et al. 2014 evaluaron la actividad antioxidante del extracto de los frutos de *Schinus terebinthifolius* mediante el método DPPH obteniendo como resultado, actividad antioxidante para el extracto metanólico a las 3 concentraciones ensayadas (10, 100, 1000µg/ml) (26).
- Según Dos Santos A., et al. 2015 evaluaron la composición química y cinética de extracción de los aceites esenciales extraídos por

hidrodestilación de frutos y hojas secas de *Schinus molle* L y *Schinus terebinthifolius* Raddi. Obteniendo como principales compuestos del fruto en ambas especies el α-pineno, β-pineno y germacreno D, y adicionalmente el espatulenol en *S. molle* (27).

- Tlili N., et al. 2018 evaluaron la composición y la actividad antioxidante de los frutos de *Schinus terebinthifolius* Raddi y *Schinus molle* L. La actividad antioxidante se determinó por TAC y DPPH. Las muestras de *Schinus molle* tenían una alta actividad antioxidante. Por medio del análisis de HPLC, se determinaron ocho compuestos con notorias diferencias entre las especies, el ácido gálico, ácido vanílico, cumarina y luteolina fueron los compuestos predominantes en *S. molle*; en *S. terebinthifolius*, la catequina, luteolina y el kampferol (28).
- Abderrahim A., et al. 2018 determinaron los principales constituyentes y la actividad antioxidante de los aceites esenciales de las hojas y fruto de *S. molle*. El grupo químico de los aceites esenciales fueron los sesquiterpenos, subgrupos cadineno y cadinoles. La actividad antioxidante se determinó por DPPH y ABTS obteniendo una baja actividad antioxidante de los aceites esenciales de hojas y frutos de *Schinus molle* L. (29).

II.3. Bases teóricas

II.3.1. Aceites esenciales (AE)

Los aceites esenciales son líquidos con fragancias distintivas que se evaporan fácilmente. Se adquieren a partir de material vegetal haciendo uso de diferentes técnicas. Los aceites esenciales pueden ser descritos como productos compuestos de sustancias aromáticas, ya sea solas o combinadas con sustancias que no tienen aroma. Estos compuestos aromáticos son sustancias químicamente puras que tienen la capacidad de evaporarse en condiciones ambientales típicas. Los aceites esenciales tienen una composición única de químicos, esto debido a causas genéticas, pero también por el clima, las lluvias o el origen geográfico. Principalmente están constituidos por metabolitos secundarios de plantas que son grasos y volátiles, principalmente mono y sesquiterpenos, aunque también pueden

incluir otros tipos de compuestos como fenoles, cumarinas, antraquinonas y alcaloides (30,31).

II.3.1.1. Métodos de extracción de aceites esenciales

- Prensado: La muestra investigada se somete a un proceso de extracción mecánica para obtener el aceite, el cual luego se recolecta y filtra. Este método es típicamente empleado para extraer aceites esenciales de cítricos. (32)
- Con solventes volátiles: El material vegetal es tratado haciendo uso de los procesos de secado y molienda. Esta se pone en contacto con diferentes solventes. Este método tiene la desventaja de no solo extraer el aceite esencial, sino otras sustancias como grasas y ceras. (33)
- Enflorado: Esta metodología es utilizada para comúnmente para las flores. Esta es solubilizada en la grasa obteniendo una combinación de grasa y aceite esencial la cual se separará por métodos fisicoquímicos. (34)
- Fluido supercrítico: El material vegetal se somete a varios procesos, incluyendo su colocación en una cámara de acero inoxidable donde circula un fluido supercrítico a través de él. (35)
- Arrastre de vapor: El material vegetal es expuesto a vapor de agua de esta manera se va extrayendo el aceite esencial contenido a treves de un mecanismo de arrastre. La combinación de vapores saturados y aceites esenciales circula a través de un condensador. En este la combinación se condensa y enfría. Lo obtenido se separa haciendo uso de la decantación. (36)

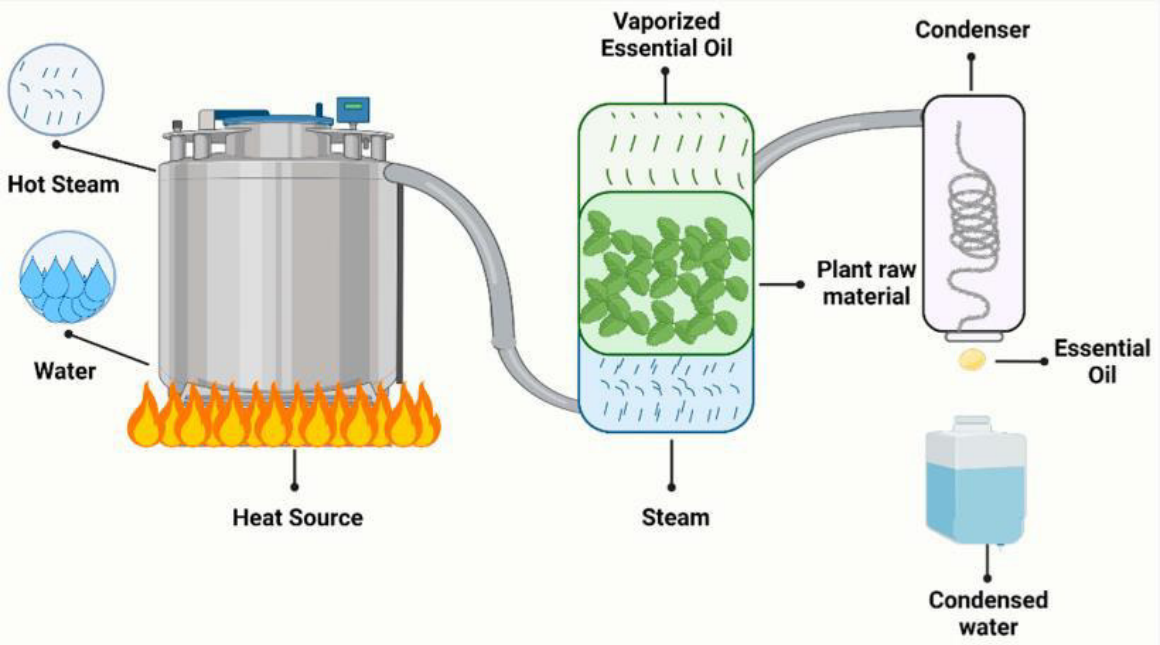


Figura 2. Extracción por arrastre de vapor. (37)

II.3.1.2. Principales componentes de los aceites esenciales

Se considera que el aceite esencial presenta entre 50 y 300 componentes químicos según la especie estudiada, estos compuestos pertenecen a diferentes grupos como: hidrocarburos terpénicos, cetonas, ésteres, aldehídos, éteres, alcoholes, compuestos fenólicos, entre otros. Así mismo estas características químicas son muy variables en función de la localización de cultivo y de las condiciones ambientales (38).

II.3.2. Actividad antioxidante

Los antioxidantes son los principales secuestrantes de especies reactivas de oxígeno (ROS) y especies reactivas de nitrógeno (RNS). Los ROS originan e intervienen en reacciones en cadena, por su parte los RNS son agentes químicos oxidantes (39). Al margen del mecanismo de los procesos, el sistema operativo que se genera es nocivo para un organismo vivo. Gran parte de los antioxidantes de interés son de origen vegetal y entre los principales compuestos destacan los fenólicos y polifenólicos (40).

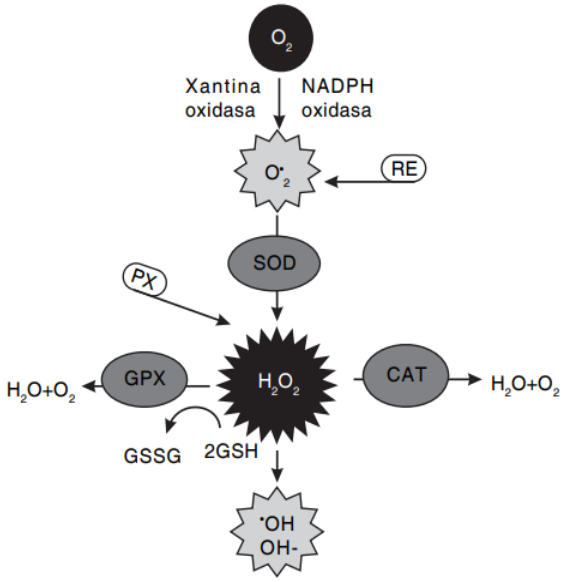


Figura 3. Mecanismo general de producción y neutralización de especies reactivas de oxígeno (41)

Es preciso enfatizar la diferencia entre las siguientes propiedades “antioxidante” y “antirradical”: una propiedad antirradical se define por la capacidad de los componentes para reaccionar con los radicales libres, pero una propiedad antioxidante constituye la capacidad de inhibir (reducir) todas las moléculas que tienen alto potencial Ox/Red, que son nocivos para las estructuras corporales (39).

II.3.2.1. Estrés oxidativo

El oxígeno es esencial para la vida, pero debido a su alta capacidad reactiva puede convertirlo en una sustancia tóxica. Cuando hay un desequilibrio a favor de sustancias prooxidantes sobre antioxidantes, se produce el estrés oxidativo. Este proceso disminuye la habilidad de las células para contrarrestar los radicales libres, cuyos efectos varían dependiendo de la intensidad del estrés experimentado. Un estrés oxidativo severo puede resultar en la muerte celular, mientras que una oxidación moderada puede iniciar la apoptosis; en situaciones extremas, podría provocar necrosis. En la última década, se ha investigado ampliamente el impacto de los radicales

libres en el riesgo de desarrollar patologías, lo que apunta a que el estrés oxidativo es un factor importante en diversas patologías (42).

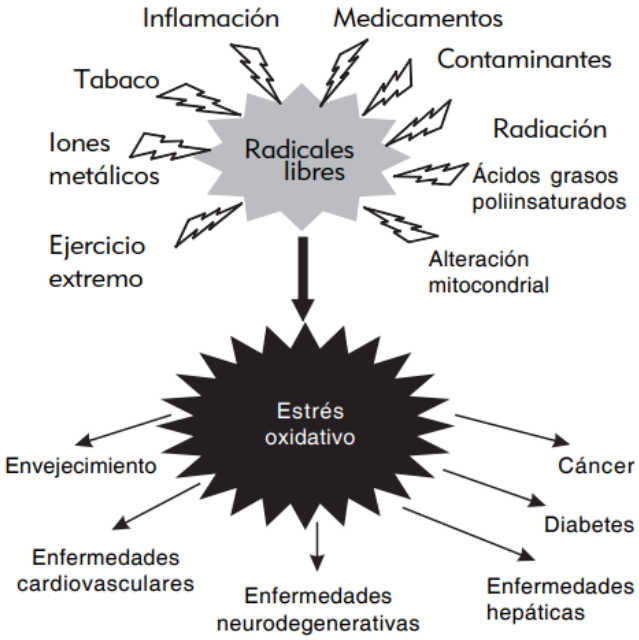


Figura 4. Estrés oxidativo (41)

II.3.2.2. Radicales libres

Los radicales libres son átomos o grupos de átomos altamente reactivos debido a la presencia de un electrón desapareado o libre. Estos tienden a capturar electrones de moléculas estables para lograr equilibrio electroquímico. En el momento en que un radical libre obtiene un electrón, la molécula que lo cedió se convierte en otro radical libre, dando inicio a una cadena de reacciones que puede dañar nuestras células (43).

Las sustancias oxidantes pueden afectar a diversas moléculas, siendo algunas más sensibles que otras a la actividad de los antioxidantes. Los ácidos nucleicos, las proteínas y los fosfolípidos presentes en las membranas celulares son específicamente vulnerables. La exposición a oxidantes puede ocasionar cambios en la estructura de estas moléculas, lo que conlleva una alteración en su funcionamiento. El impacto de los oxidantes en los sistemas vivos se conoce como estrés oxidativo (44).

II.3.3. Radical 2,2'-azino-bis-3-etilbenzotiazolina-6-sulfónico (ABTS)

La generación del radical ABTS establece el fundamento de uno de los métodos espectrofotométricos que se han aplicado para evaluar la actividad antioxidante (45).

La eliminación del radical ABTS es detectable cuantitativamente debido a la decoloración del espectro de absorción con valores característicos a 414, 417, 645, 734 y 815 nm. Unos valores característicos típicos utilizados para el monitoreo son 414–417 nm y 730–734 nm; sin embargo, este último rango es el recomendado debido que a longitudes de onda más bajas puede esperarse la posible interferencia de muchas muestras, lo que da como resultado una capacidad antioxidante subestimada. Es importante tomar en cuenta que las bandas máximas de absorbancia del radical ABTS se desplazan en diferentes solventes debido al efecto solvato crómico (46).

II.3.4. Radical 2,2-difenil-1-picrilhidrazilo (DPPH)

Es una técnica rápida, sencilla, económica y que se utiliza ampliamente para determinar la capacidad de los compuestos de accionar como radicales libres o donadores de hidrógeno, y así evaluar la actividad antioxidante. Esta técnica fue desarrollada por Blois. El DPPH se clasifica como un radical estable. La deslocalización confiere un color violeta intenso a la solución, con una absorción en torno a 520 nm al diluirla en etanol.

Esta técnica tiene limitaciones porque el radical DPPH reacciona con otros radicales y el perfil de tiempo de la reacción para alcanzar el estado estacionario no es lineal. El DPPH es sensible a ciertas bases de Lewis y tipos de solventes, así como al oxígeno. El DPPH sólo es soluble en disolventes orgánicos y la interferencia en la absorbancia de los compuestos de la muestra puede convertirse en un problema para el análisis cuantitativo (47).

II.3.5. Capacidad de reducción del hierro (FRAP)

El ensayo FRAP se fundamenta en la rápida reducción de tripiridiltriazina férrica (Fe III -TPTZ) mediante antioxidantes presentes en las muestras, formando tripiridiltriazina ferrosa (Fe II -TPTZ), un producto de color azul, que

aumenta la absorción a 593 nm. El ensayo FRAP se basa en el de Benzie y Strain. Soluciones estándar de sulfato de hierro (II) heptahidrato con concentraciones que oscilan entre 0,25 y 8 mmol dm^{-3} (48,49).

II.3.6. Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas (GC-MS)

La Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas es una técnica analítica avanzada que posibilita la separación, identificación y cuantificación precisa de una amplia gama de sustancias volátiles y semivolátiles. Esta metodología se fundamenta en la variación de la proporción de las sustancias en las fases móvil y estacionaria del sistema de análisis. Tras la separación inicial, las sustancias se fragmentan y se analizan según su patrón de fragmentación, que se compara con datos de espectros de masas, estos se almacenan en una base de datos para su posterior identificación preliminar. La identificación y cuantificación definitiva de cada sustancia se realiza empleando una sustancia de referencia (41).



Figura 5: GC-MASAS (50)

II.4. Glosario de términos

Densidad: es la relación entre la masa y el volumen de una sustancia, considerando una presión y temperatura específicas (51).

Índice de refracción: es la rapidez con la que un haz de luz viaja a través de los medios. Dependiendo del carácter, estado de la sustancia que se analiza y la temperatura, son inversamente proporcionales (52). Se emplea para determinar la «pureza y calidad» de los aceites (53).

III. HIPÓTESIS Y VARIABLES

III.1. Hipótesis

El aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L. presenta actividad antioxidante *in vitro*.

III.2. Variables

VI: El aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L.

VD: Actividad antioxidante.

III.3. Operacionalización de variables

VARIABLE(S)	TIPO DE VARIABLE	DEFINICIÓN CONCEPTUAL	DEFINICIÓN OPERACIONAL	DIMENSIONES	INDICADOR	UNIDAD DE MEDIDA
Aceite esencial	Independiente	Producto obtenido a partir de una materia prima natural (3.20) de origen vegetal, por destilación al vapor, por procesos mecánicos a partir del epicarpio de los frutos cítricos o por destilación en seco, previa separación de la fase acuosa, si la hubiere, por procesos físicos	Destilación por arrastre de vapor	Caracterización fisicoquímica	Rendimiento Densidad Índice de refracción	Porcentaje (%), Densidad (mg/mL), Partes por millón(ppm),
					Análisis químico	Perfil químico de compuestos volátiles
Actividad antioxidante	Dependiente	Antioxidante cualquier sustancia que, cuando está presente en una concentración baja en comparación con la de un sustrato oxidable, retrasa o previene significativamente la oxidación de ese sustrato.	Método del DPPH, ABTS FRAP	Actividad antioxidante por el método del DPPH, ABTS FRAP	Porcentaje de actividad antioxidante Concentración inhibitoria media (CI50) TEAC (capacidad antioxidante equivalente al trolox)	% ug/mL mgTEAC/ g aceite

IV. MATERIALES Y MÉTODOS

IV.1. Área de estudio (Citar coordenadas)

Laboratorio de Química Orgánica de la Facultad de Farmacia y Bioquímica de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos.

Coordenadas geográficas: 12°3′20.21″ S, 77°1′24.87″ W

IV.2. Diseño de investigación

Experimental, prospectivo y analítico

IV.3. Población y muestra

La muestra está formada por fruto de *Schinus molle* "molle" de origen peruano procedente del distrito de Pachangara, provincia de Oyón, departamento de Lima. Ubicado a 2265 msnm con una latitud: 10º48'45" y una longitud: 76º52'28", cuyos periodos de cosecha oscilan entre los meses de julio-enero.

IV.4. Procedimientos, técnicas e instrumentos de recolección de información

IV.4.1. Tratamiento de muestra

Se recolectan los frutos de molle en la localidad de Churín, distrito de Pachangara, provincia de Oyón, en la Región de Lima. Se desgrana manualmente los racimos del fruto del molle recolectado. A continuación, se realiza una selección, para descartar la materia prima dañada que presente signos de putrefacción y contaminación visible. Pesamos la muestra obtenida y la llevamos a secar. Finalmente, los frutos secos de molle son molidos, con el propósito de facilitar el paso del vapor y aumentar el área de contacto.

IV.4.2. Extracción del aceite esencial

La extracción se realiza mediante destilación por arrastre de vapor en un aparato tipo Clevenger por un periodo de 2 horas en base a 0.935 kg del fruto. El aceite esencial obtenido se separa por decantación, se añade miligramos de

sulfato anhidro (Na_2SO_4) para eliminar cualquier resto de agua. Después, se conservó a 4°C en un vial ámbar hasta su uso posterior

IV.4.3. Caracterización física del aceite

La caracterización física del aceite se realiza mediante las actividades que se describen a continuación en la tabla:

Tabla 2. Descripción de la caracterización física del aceite. Fuente propia

Actividad	Descripción
Rendimiento	Se calcula utilizando la siguiente fórmula. $$R = \frac{\rho_{20} \cdot V}{p} . 100\%$$
Densidad	La densidad relativa del aceite esencial se realiza siguiendo al Norma Técnica Peruana NTP 319.075:1974. Utilizando la siguiente fórmula: $$\text{Densidad} = \frac{M_3 - M_1}{M_2 - M_1}$$ Picnómetro vacío: $\mathbf{M_1}$ Picnómetro con agua destilada: $\mathbf{M_2}$ Picnómetro con el líquido problema: $\mathbf{M_3}$
Índice de refracción	El índice de refracción se determina según la Norma Técnica Peruana NTP 319.084.1984.

IV.4.4. Caracterización química del aceite

Para el análisis se empleó un cromatógrafo de gases Agilent Technologies 7890A con un detector de masas selectivo Agilent Technologies 5975C. Se disolvieron 20 µL de la muestra de AE en 980 µL de diclorometano.

Se utilizó una columna capilar apolar DB-5MS (60 m x 250 µm x 0,25 µm) de fenilmetilpolisiloxano al 5% para separar las sustancias químicas presentes en la mezcla. La inyección se realizó en modo Split (20:1) y la temperatura del inyector se mantuvo a 250 °C.

El horno cromatográfico se inició a 50 °C, con un aumento de temperatura de 2,5 °C por minuto hasta alcanzar los 180 °C, luego se incrementó en 10 °C por minuto hasta llegar a los 200 °C, y finalmente en 20 °C por minuto hasta alcanzar los 240 °C. Durante los 56 minutos de la prueba, se utilizó helio como gas de arrastre a un flujo constante de 1 mL/min.

Para la identificación de componentes volátiles se realiza una comparación de índices de retención relativa (RI) y datos de espectros de masas (biblioteca NIST-5) y literatura publicada.

IV.4.5. Evaluación de la actividad antioxidante por DPPH

Los pasos a seguir se especifican en la siguiente figura:

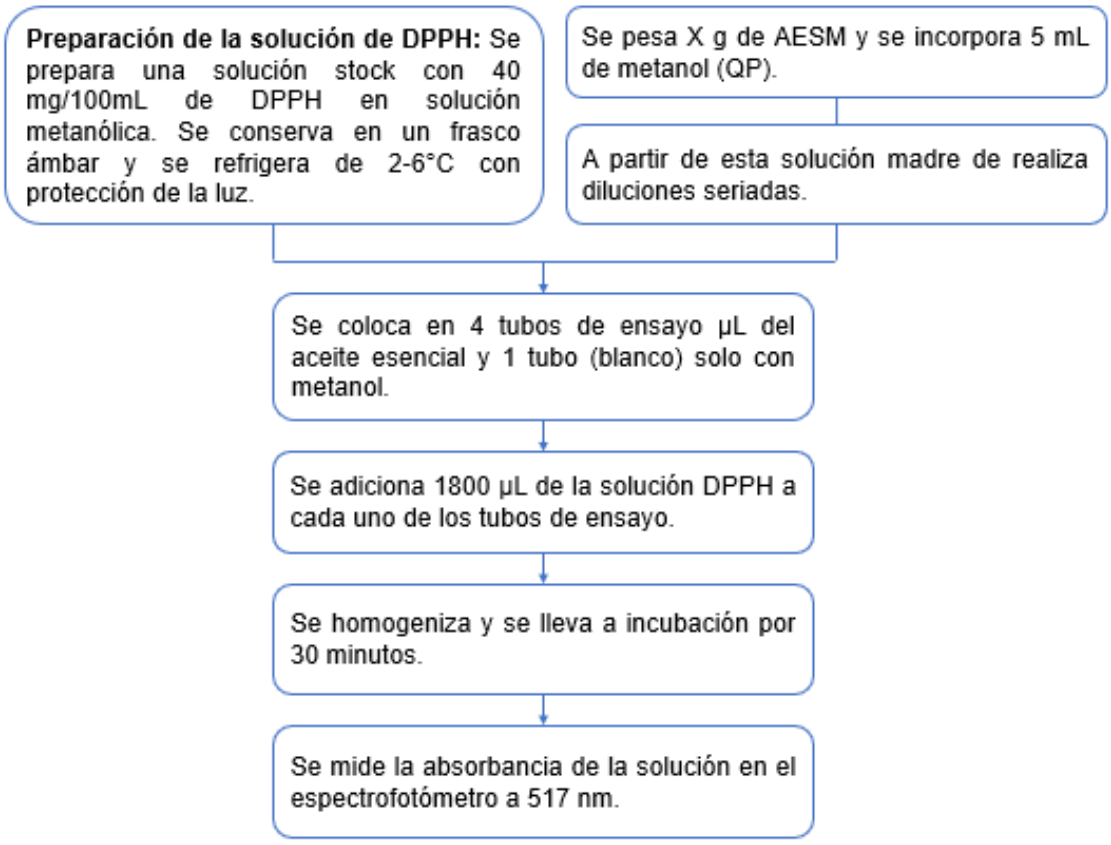


Figura 6. Diagrama de flujo de la actividad antioxidante DPPH del AESM (Fuente propia)

- Se realiza la gráfica de la absorbancia con la concentración para determinar la IC_{50}, mediante regresión lineal.

- De igual manera se procede con Trolox como estándar para evaluar la actividad antioxidante por el método DPPH y la especie antioxidante Trolox.

IV.4.6. Evaluación de la actividad antioxidante por ABTS

Para la evaluación de la actividad antioxidante por ABTS, se utilizó la siguiente metodología descrita en la figura 7.

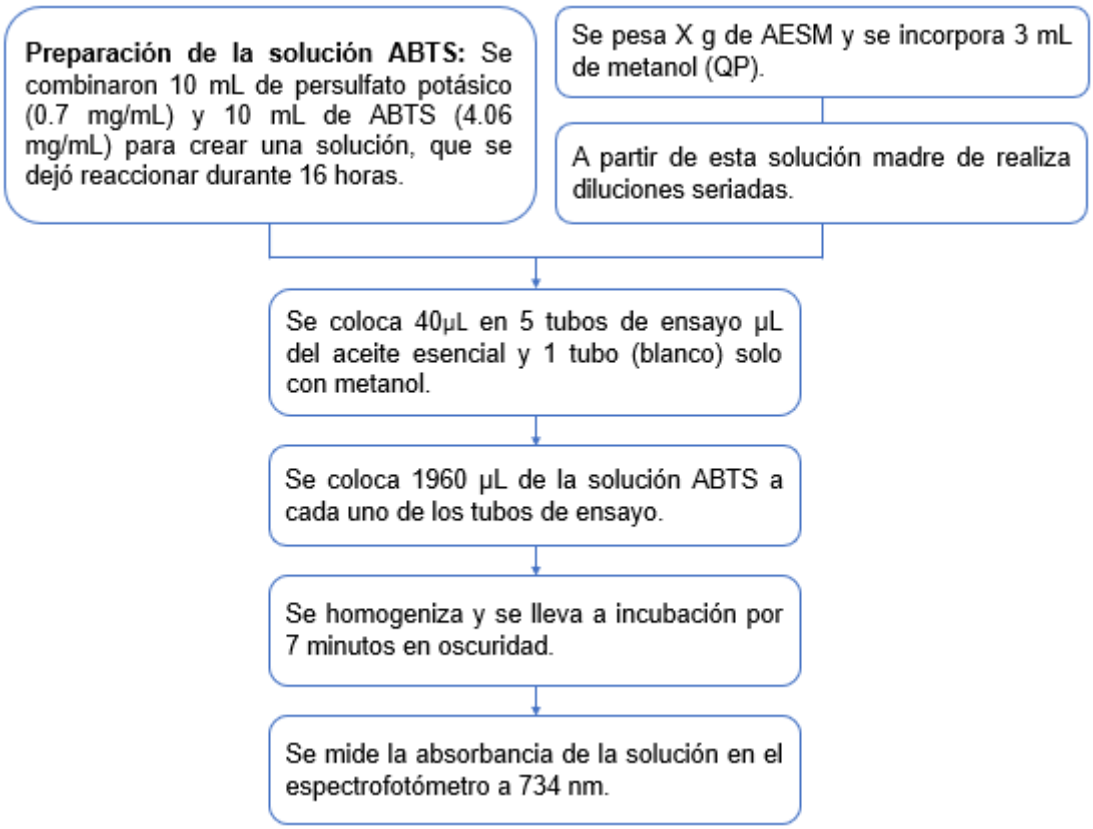


Figura 7. Diagrama de flujo de la actividad antioxidante ABTS del AESM (Fuente propia)

El mismo proceso se aplica utilizando el estándar Trolox a 250 µg/mL o 1000 µM. La absorbancia se interpreta a 0,7 ± 0,02 con una longitud de onda de 734 nm. Con los valores de absorbancia resultantes se determina el porcentaje de captación de radicales libres (DPPH) mediante la siguiente expresión:

$$\%\, Inhibición = \frac{(Abs_{DPPH} - Abs_{muestra}) \times 100}{Abs_{DPPH}}$$

El método de regresión lineal es usado para calcular la concentración inhibitoria media (IC50), basado en la concentración del aceite esencial.

IV.4.7. Evaluación de la actividad antioxidante por FRAP

Para la evaluación de la actividad antioxidante por FRAP, se utilizó la metodología descrita a continuación:

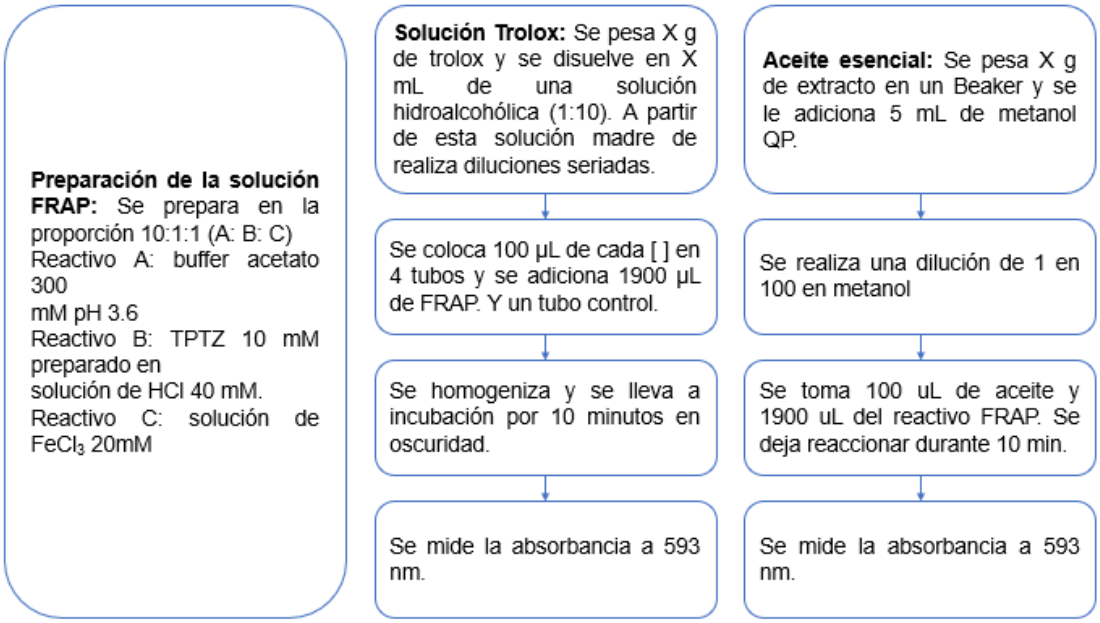


Figura 8. Diagrama de flujo de la actividad antioxidante FRAP del AESM (Fuente propia)

V. RESULTADOS

V.1. Caracterización física

Los resultados de la caracterización física del aceite se describen en la siguiente tabla:

Tabla 3. Resultados de la caracterización física del aceite

Actividad	Descripción
Rendimiento	4.171 %
Densidad	A 20° C es 0.9748
Índice de refracción	A 20°C es 1.479

V.2. Caracterización química

El perfil químico del AE del fruto de molle presentó 46 picos (Figura 9), que corresponden a 37 componentes, de los cuales 2 son de estructura desconocida. El análisis identificó al Aromadendreno como el principal químico volátil con un 18,15%, seguido del δ-cadineno (12,65%) y el α-humuleno (11,92%). De acuerdo a la Figura 9, el tiempo de retención a 25,706 min correspondió al componente principal del EO (compuesto 9).

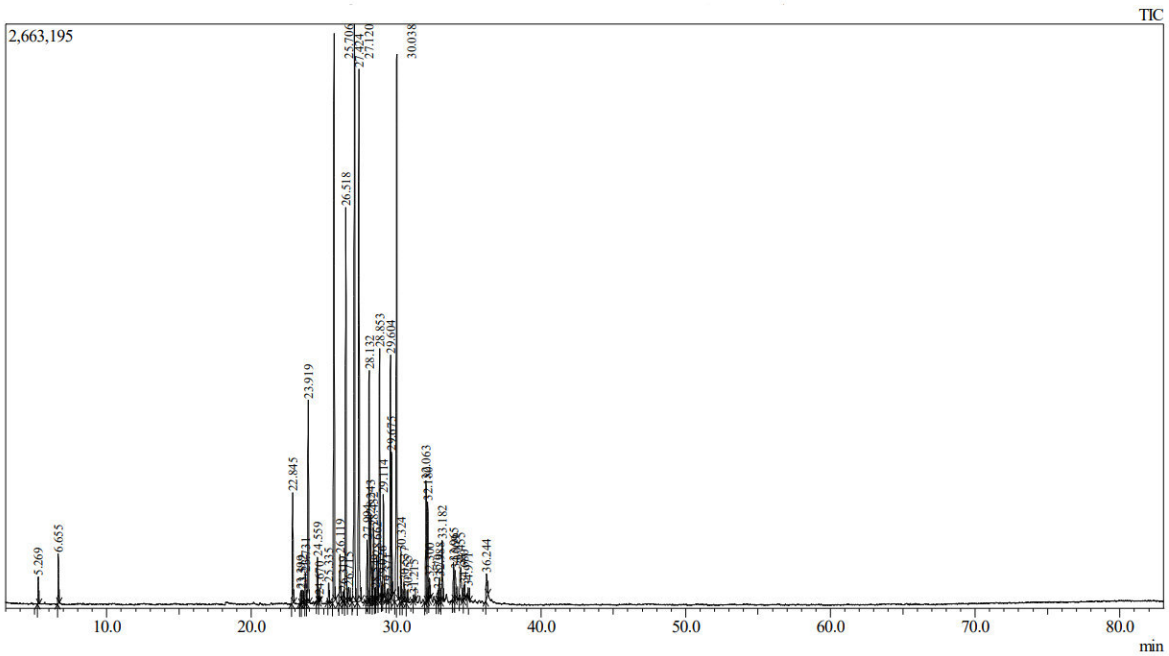
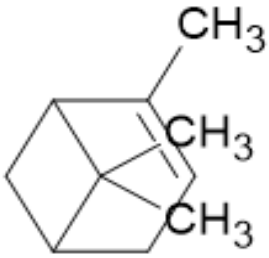
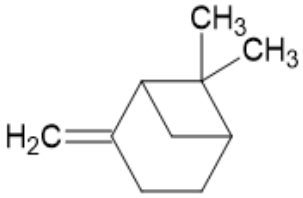
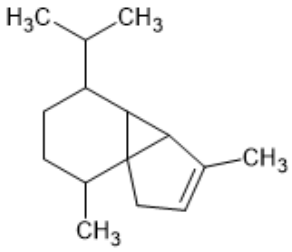
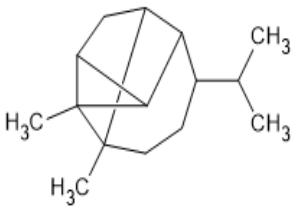
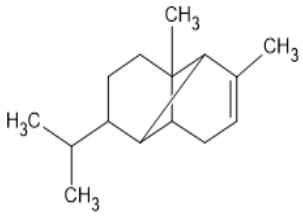
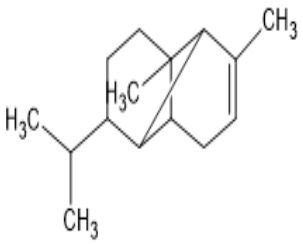
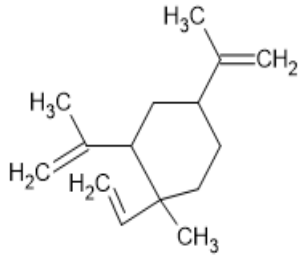
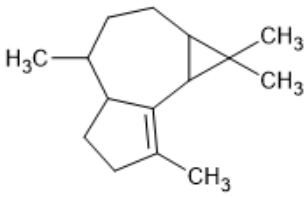
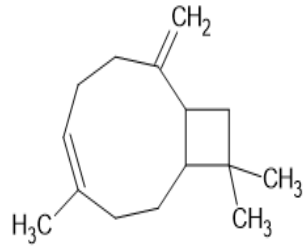
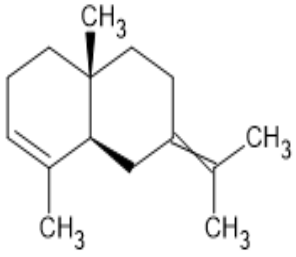
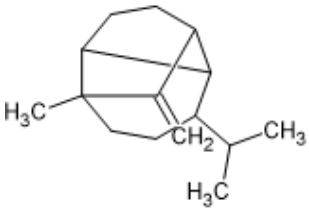
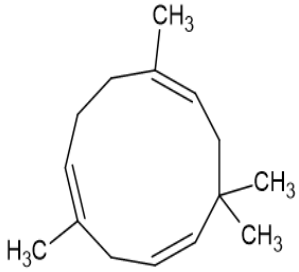
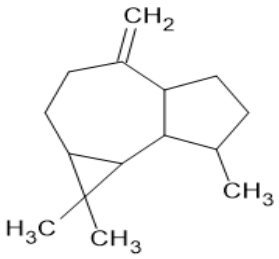
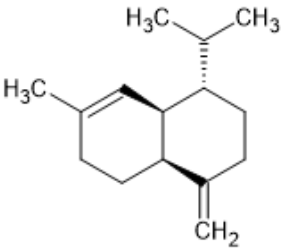


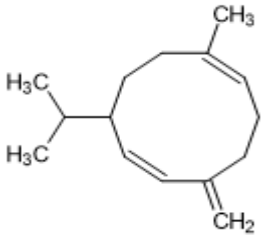
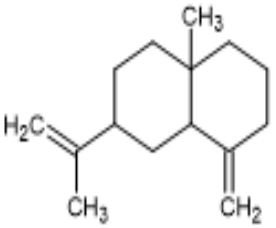
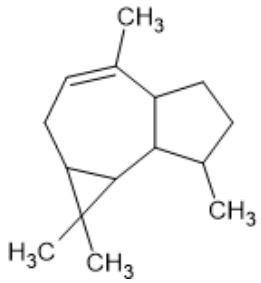
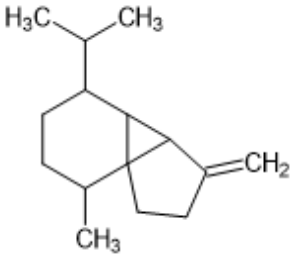
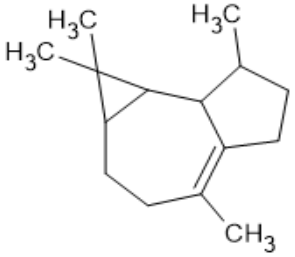
Figura 9. Perfil cromatográfico del aceite esencial del fruto de molle mediante GC-MS

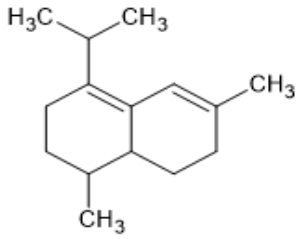
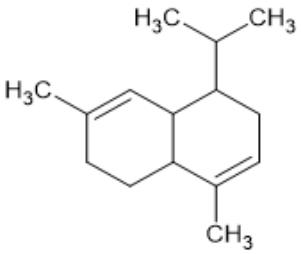
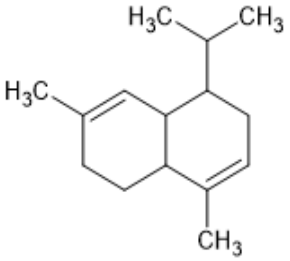
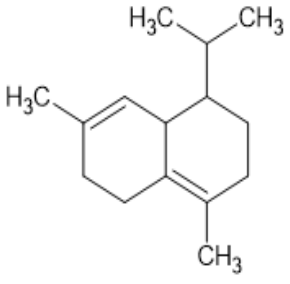
Tabla 4. Composición química del aceite esencial del fruto de *Schinus molle*

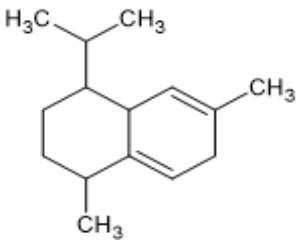
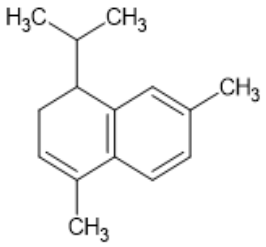
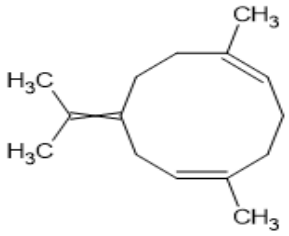
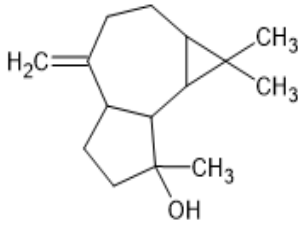
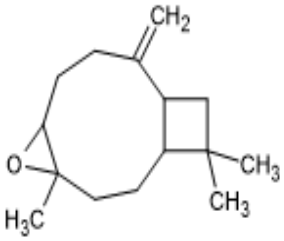
Nombre Compuesto	RT (min)	LRI REF	LRI EXP	% Area	Fórmula molecular / Masa molecular	Estructura Química	Grupo Químico
α – pineno	5,269	0	455	0,35	$C_{10}H_{16}$ 136,23 g/mol		Monoterpeno
β – pineno	6,655	943	732	0,73	$C_{10}H_{16}$ 136,23 g/mol		Monoterpeno
α -cubebeno	22,845	1344	3970	2,02	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno
Ciclosativeno	23,512	1125	4081	0,29	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Otros

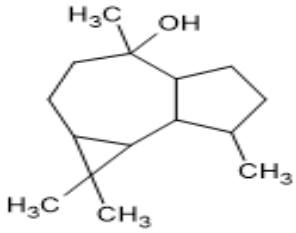
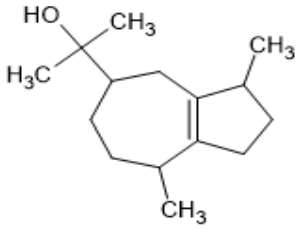
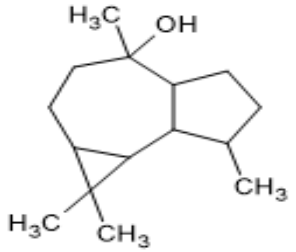
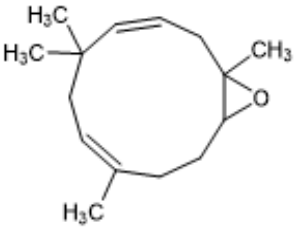
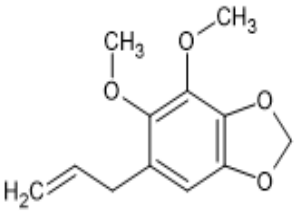
α - illangeno	23,731	1221	4147	0,57	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno
α - copaene	23,919	1221	4185	3,78	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno
β - elemene	24,67	1398	4335	0,08	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno
α - gurjunene	25,335	1419	4468	0,37	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno
β - cariofileno	25,706	1494	4542	10.88	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno

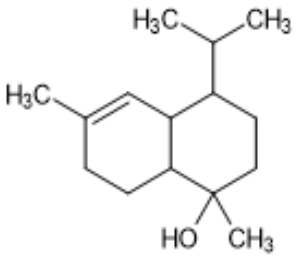
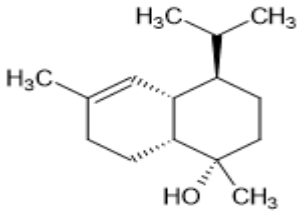
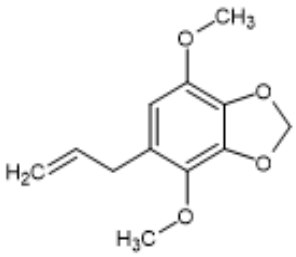
Selina-3,7(11)-dieno	26,319	1507	4665	0,17	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno
Sativen	26,715	1339	4744	0,34	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno
α-humuleno	27,12	1579	4825	11,92	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno
Aromadendreno	27,424	1386	4886	10,54	$C_{15}H_{24}$ 204.35 g/mol		Sesquiterpeno
γ - muuroleno	28,132	1440	5027	4,45	$C_{15}H_{24}$ 204.35 g/mol		Sesquiterpeno

Germacreno D	28,243	1515	5050	1,78	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno
β - selinene	28,432	1469	5087	1,41	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno
Dehidroaromadendrano	28,549	1490	5111	0,18	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Otros
1H-Cyclopenta[1,3]cyclopropal[1,2]benzene	28,662	1435	5133	0,83	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno
Ledena	28,853	1339	5172	5,43	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno

Epizonareno	29,026	0	5206	0,27	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno
α -muuroleno	29,114	1440	5224	1,96	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno
α - amorfeno	29,604	1435	5322	4,57	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno
Desconocido	-	-	5336	2,57	-		Otros
δ-cadineno	30,03	1469	5409	11,30	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno

Hexahidro naftaleno	30,324	1440	5466	0,92	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Otros
α - calocoreno	30,755	1547	5552	0,23	$C_{15}H_{20}$ 200,32 g/mol		Sesquiterpeno
Germacrene B	31,215	1398	4335	0,09	$C_{15}H_{24}$ 204,35 g/mol		Sesquiterpeno
Espatulenol	32,063	1536	5814	2,30	$C_{15}H_{24}O$ 220,35 g/mol		Sesquiterpeno
Óxido de cariofileno	32,18	1507	5837	1,92	$C_{15}H_{24}O$ 220,35 g/mol		Sesquiterpeno

Globulol	32,3	1530	5861	0,44	$C_{15}H_{26}O$ 222,37 g/mol		Sesquiterpeno
Guaiol	32,879	1614	5977	0,32	$C_{15}H_{26}O$ 222,37 g/mol		Sesquiterpeno
Ledol	32,988	1530	5999	0,46	$C_{15}H_{26}O$ 222,37 g/mol		Sesquiterpeno
Óxido de humuleno	33,182	0	6037	1,26	$C_{15}H_{24}O$ 220,35 g/mol		Otros
Dillapiole	34,069	0	6215	0,82	$C_{12}H_{14}O_4$ 222,24 g/mol		Otros

α -cadinol	34,455	1580	6292	1,26	$C_{15}H_{26}O$ 222,37 g/mol		Sesquiterpeno
Torreyol	34,68	1580	6337	0,25	$C_{15}H_{26}O$ 222,37 g/mol		Sesquiterpeno
Apiole	36,244	0	6650	0,63	$C_{12}H_{14}O_4$ 222,24 g/mol		Sesquiterpeno

LRI Ref: índice de retención lineal obtenido de la literatura; LRI Exp: índice de retención lineal calculado frente a n-alcanos C9-C24. a Media de tres determinaciones.

V.3. Actividad antioxidante por DPPH

Aceite esencial molle

Se pesó (Balanza Ohaus) 1,065 g de aceite esencial de molle en un Beaker y se le incorporó cinco (5) mL de metanol químicamente puro (QP). A partir de esta solución madre (213,10 mg/mL) se prepararon diluciones seriadas como se muestra en la tabla a continuación

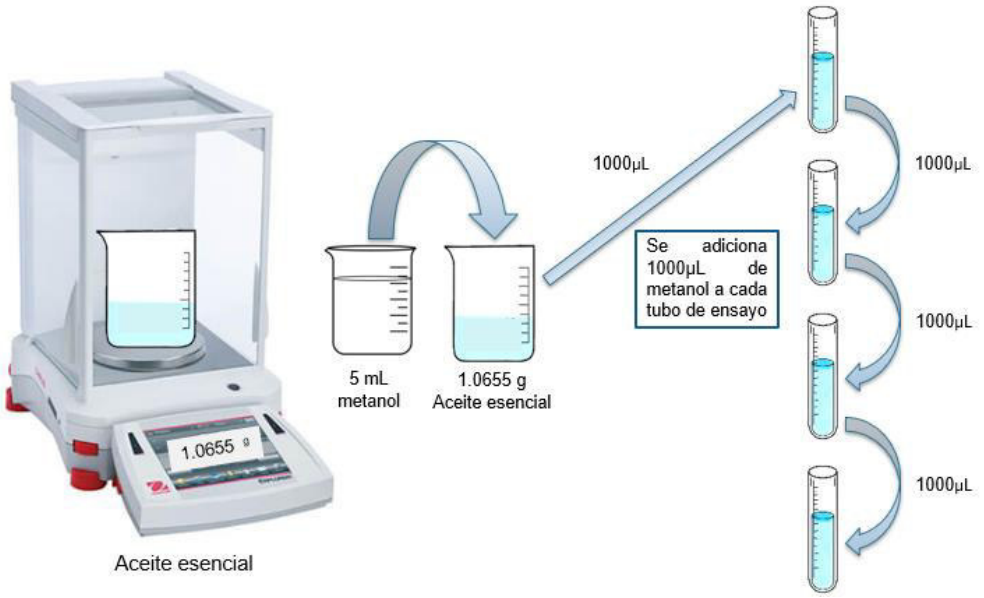


Figura 10. Preparación de diluciones del aceite esencial. (Fuente propia)

Tabla 5. Diluciones seriadas del AESM para evaluación por DPPH

Dilución	Extracto µL	Metanol µL	Volumen final	Concentración final µg/mL
Tubo 1	1000 (solución madre)	1000	2000	106550,00
Tubo 2	1000 (del tubo 1)	1000	2000	53275,00
Tubo 3	1000 (del tubo 2)	1000	2000	26637,50
Tubo 4	1000 (del tubo 3)	1000	2000	13318,75

Batería de reacción

Tabla 6. Batería de reacción del AESM para evaluación por DPPH

Muestra	DPPH	Extracto	Metanol	Volumen final	Concentración final µg/mL
Tubo 1	1800	200	0	2000	10655,00
Tubo 2	1800	200	0	2000	5327,50
Tubo 3	1800	200	0	2000	2663,75
Tubo 4	1800	200	0	2000	1331,88
Tubo 5 (control)	1800	0	200	2000	0

Lecturas por triplicado

Tabla 7. Resultados de la actividad antioxidante del AESM por el método del radical DPPH

Muestra	A1	A2	A3	Promedio	DE	% de inhibición	Ecuación de la recta
Tubo 1	0,286	0,292	0,288	0,289	0,003	57,00%	y = -4E-05x + 0,6833
Tubo 2	0,493	0,490	0,485	0,489	0,004	27,11%	
Tubo 3	0,599	0,602	0,602	0,601	0,002	10,48%	CI_{50}
Tubo 4	0,638	0,635	0,630	0,634	0,004	5,51%	8690,83 µg/mL
Tubo 5 (control)	0,676	0,670	0,668	0,671	0,004	0%	

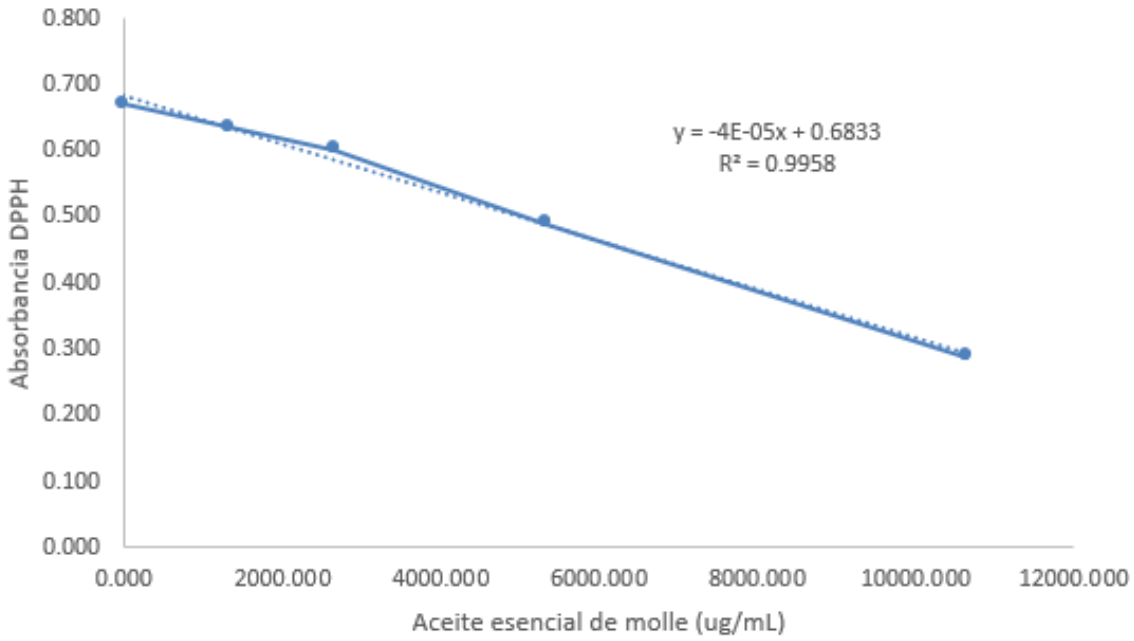


Figura 11. Curva de captación del radical DPPH (Fuente propia)

Trolox

Se pesó 0,0020 g de Trolox en un Beaker y se le incorporó diez (10) mL de metanol químicamente puro (QP). A partir de esta solución madre (0,2 mg/mL) se prepararon diluciones seriadas como se muestra en la tabla a continuación.

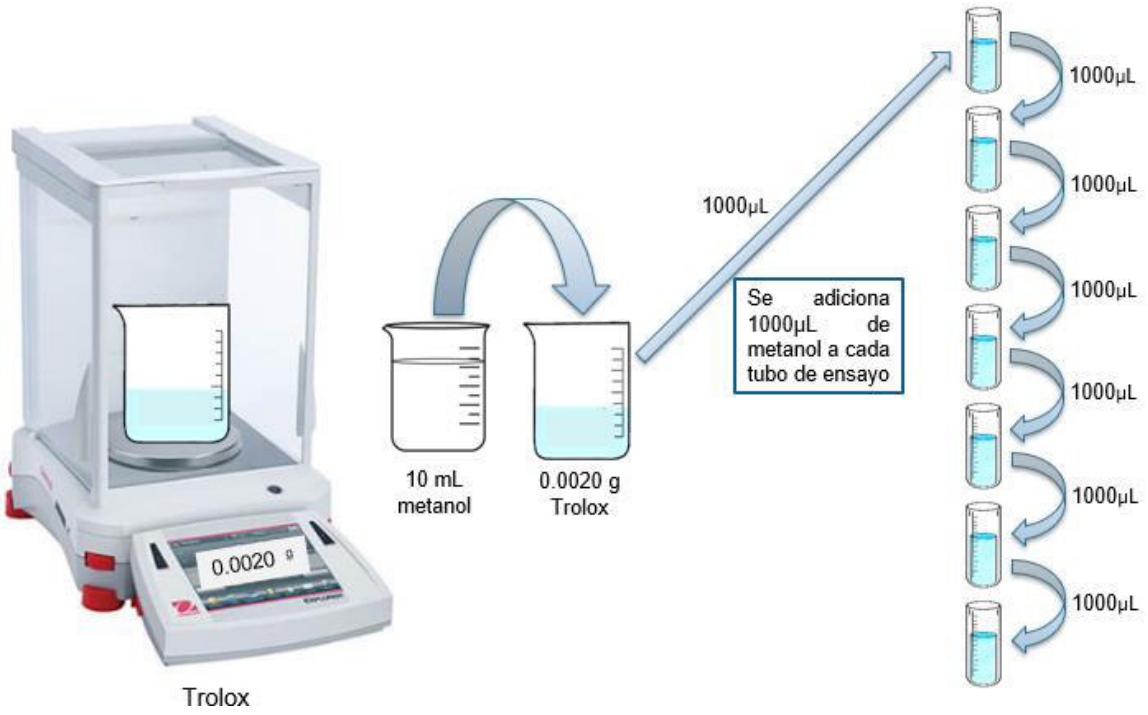


Figura 12. Preparación de diluciones del Trolox. (Fuente propia)

Tabla 8. Diluciones seriadas del trolox para evaluación por DPPH

Dilución	Trolox µL	Metanol µL	Volumen final µL	Concentración final µg/mL
Tubo 1	1000	1000	2000	125
Tubo 2	1000	1000	2000	63
Tubo 3	1000	1000	2000	31
Tubo 4	1000	1000	2000	16
Tubo 5	1000	1000	2000	8
Tubo 6	1000	1000	2000	4
Tubo 7	1000	1000	2000	2

Batería de reacción

Tabla 9. Batería de reacción del trolox para evaluación por DPPH

Muestra	DPPH µL	Trolox µL	Metanol µL	Volumen final µL	Concentración final µg/mL
Tubo 1	1800	200	0	2000	12,5
Tubo 2	1800	200	0	2000	6,25
Tubo 3	1800	200	0	2000	3,13
Tubo 4	1800	200	0	2000	1,56
Tubo 5	1800	200	0	2000	0,78
Tubo 6	1800	200	0	2000	0,39
Tubo 7	1800	0	200	2000	0

Lecturas por triplicado

Tabla 10. Resultados de la actividad antioxidante del trolox por el método del radical DPPH

Muestra	A1	A2	A3	Promedio	DE	% de inhibición	Ecuación de la recta
Tubo 1	0,043	0,040	0,038	0,040	0,003	93,90	
Tubo 2	0,050	0,055	0,052	0,052	0,003	92,09	y = -0,1903x + 0,6732
Tubo 3	0,078	0,082	0,075	0,078	0,004	88,16	
Tubo 4	0,364	0,360	0,364	0,363	0,002	45,19	CI_{50}
Tubo 5	0,546	0,548	0,550	0,548	0,002	17,18	
Tubo 6	0,602	0,600	0,598	0,600	0,002	9,32	1,80 µg/mL
Tubo 7 (control)	0,662	0,658	0,665	0,662	0,004	0	

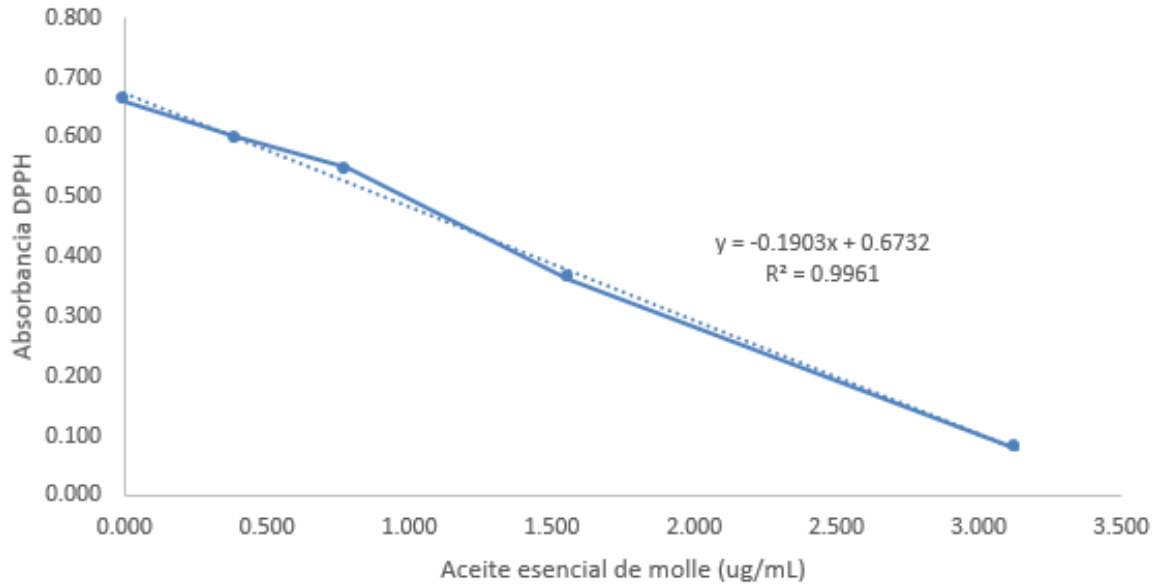


Figura 13. Curva de captación del radical DPPH por trolox (Fuente propia)

Tabla 11. Resultados de la actividad antioxidante frente al radical DPPH [TEAC-DPPH (µg ET/g aceite esencial)]

Muestra	CI_{50} (µg/mL) Media	TEAC-DPPH (µg ET/g aceite esencial)
Aceite esencial de molle	8690.83	207.11
Trolox	1.80	-

V.4. Actividad antioxidante por ABTS

Aceite esencial molle

Se pesó 1,2147 g de aceite esencial de molle en un Beaker y se le incorporó tres (3) mL de metanol químicamente puro (QP). A partir de esta solución madre (404,90 mg/mL) se prepararon diluciones seriadas como se muestra en la tabla a continuación

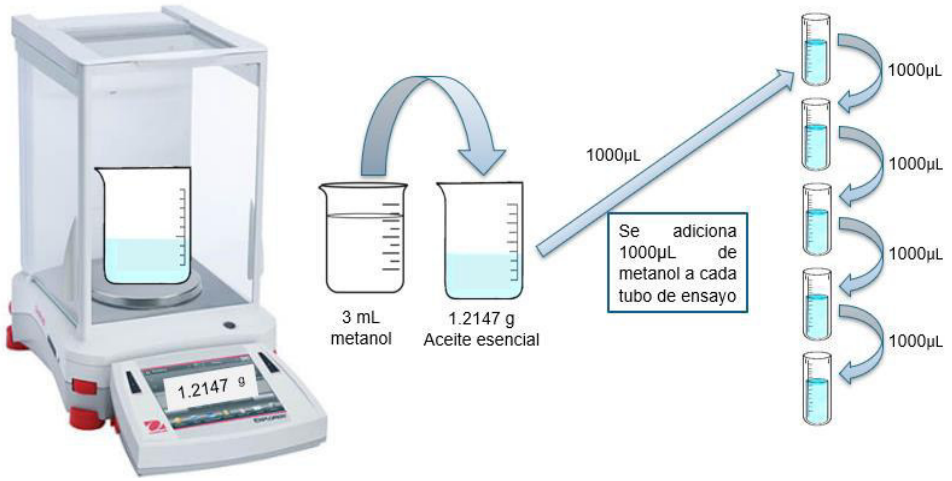


Figura 14. Preparación de diluciones del aceite esencial para evaluación por ABTS. (Fuente propia)

Tabla 12. Diluciones seriadas del AESM para evaluación por ABTS

Dilución	Extracto µL	Metanol µL	Volumen final µL	Concentración final µg/mL
Tubo 1	1000 (solución madre)	1000	2000	202450
Tubo 2	1000 (del tubo 1)	1000	2000	101225
Tubo 3	1000 (del tubo 2)	1000	2000	50613
Tubo 4	1000 (del tubo 3)	1000	2000	25306
Tubo 5	1000 (del tubo 4)	1000	2000	12653

Tabla 13. Batería de reacción del AESM para evaluación por ABTS

Muestra	ABTS µL	Extracto µL	Metanol µL	Volumen final µL	Concentración final µg/mL
Tubo 1	1960	40	0	2000	4049,00
Tubo 2	1960	40	0	2000	2024,50
Tubo 3	1960	40	0	2000	1012,25
Tubo 4	1960	40	0	2000	506,13
Tubo 5	1960	40	0	2000	253,06
Tubo 6 (control)	1960	-	40	2000	0

Lecturas por triplicado

Tabla 14. Resultados de la actividad antioxidante del AESM por el método del radical ABTS

Muestra	A1	A2	A3	Promedio	DE	% de inhibición	Ecuación de la recta
Tubo 1	0,010	0,020	0,016	0,015	0,005	97,83%	
Tubo 2	0,110	0,120	0,115	0,115	0,005	83,69%	y = -0,0003x + 0,6985
Tubo 3	0,443	0,441	0,440	0,441	0,002	37,40%	
Tubo 4	0,532	0,540	0,536	0,536	0,004	23,97%	CI_{50}
Tubo 5	0,621	0,620	0,614	0,618	0,004	12,29%	1153,33 µg/mL
Tubo 6 (control)	0,700	0,705	0,710	0,705	0,005	0,00%	

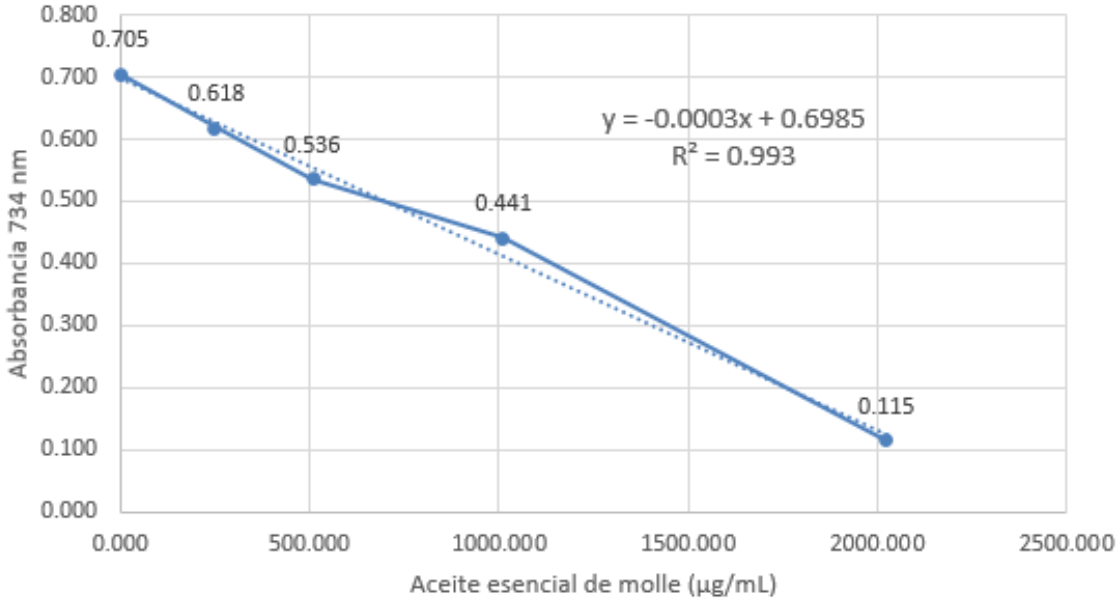


Figura 15. Curva de captación del radical ABTS por AESM (Fuente propia)

Trolox

Se pesó 0,0024 g de Trolox en un Beaker y se le incorporó diez (10) mL de metanol químicamente puro (QP). A partir de esta solución madre (0,24 mg/mL) se prepararon diluciones seriadas como se muestra en la tabla a continuación

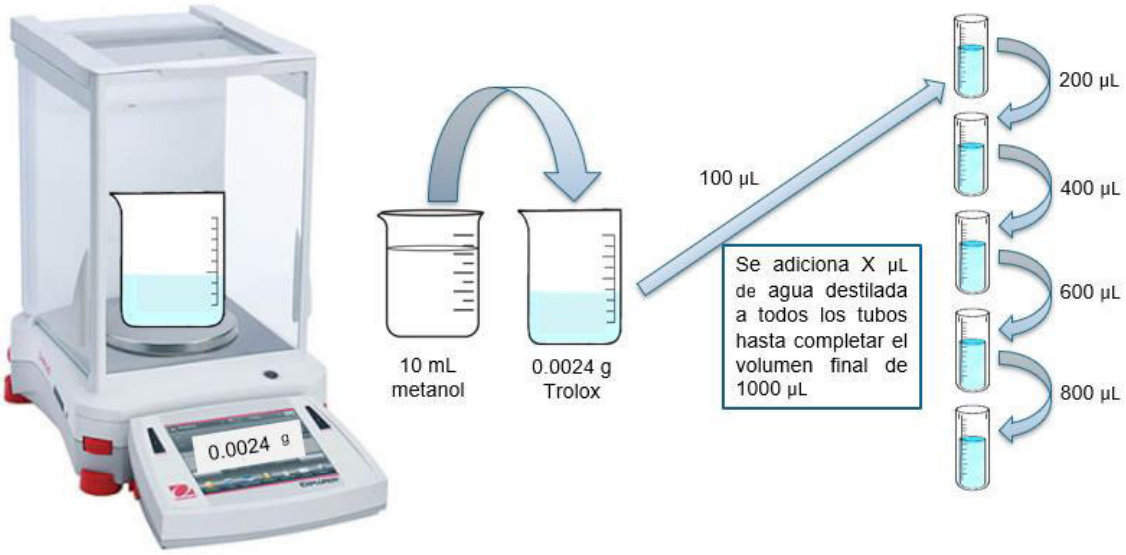


Figura 16. Preparación de diluciones del Trolox para evaluación por ABTS. (Fuente propia)

Tabla 15. Diluciones seriadas del trolox para evaluación por ABTS

Dilución	Trolox Ml	Agua destilada µL	Volumen final µL	Concentración final µg/mL
Tubo 1	100	900	1000	24
Tubo 2	200	800	1000	48
Tubo 3	400	600	1000	96
Tubo 4	600	400	1000	144
Tubo 5	800	200	1000	192

Tabla 16. Batería de reacción del trolox para evaluación por ABTS

Muestra	ABTS µL	Trolox µL	Metanol µL	Volumen final µL	Concentración final µg/mL
Tubo 1	1960	40	0	2000	0,48
Tubo 2	1960	40	0	2000	0,96
Tubo 3	1960	40	0	2000	1,92
Tubo 4	1960	40	0	2000	2,88
Tubo 5	1960	40	0	2000	3,84
Tubo 6	1960	0	40	2000	0

Tabla 17. Resultados de la actividad antioxidante del trolox por el método del radical ABTS

Muestra	A1	A2	A3	Promedio	DE	% de inhibición	Ecuación de la recta
Tubo 6	0,721	0,716	0,705	0,714	0,006	0	
Tubo 1	0,668	0,66	0,672	0,667	0,006	6,63	y = -0,1047x + 0,7219
Tubo 2	0,630	0,635	0,628	0,631	0,004	11,62	
Tubo 3	0,535	0,534	0,532	0,534	0,001	25,26	CI_{50}
Tubo 4	0,412	0,413	0,418	0,44	0,003	41,97	3,48 µg/mL
Tubo 5	0,320	0,312	0,316	0,316	0,002	55,74	

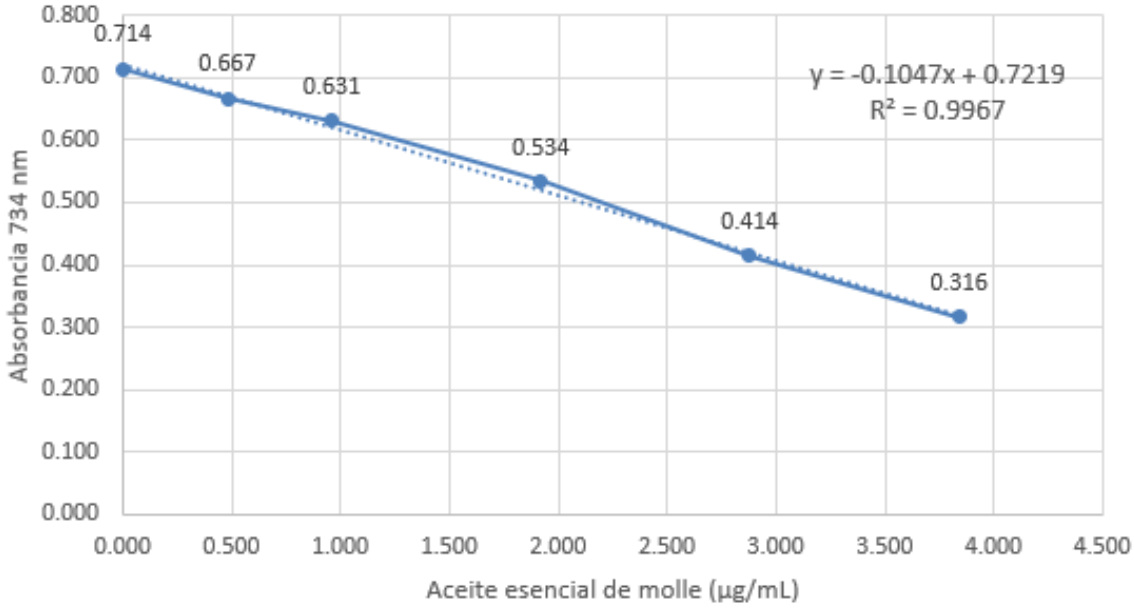


Figura 18. Curva de captación del radical ABTS por trolox (Fuente propia)

Tabla 17. Resultados de la actividad antioxidante frente al radical ABTS [TEAC-ABTS (µg ET/g aceite esencial)]

Muestra	CI_{50} (µg/mL) Media	TEAC-ABTS (µg ET/g aceite esencial)
Aceite esencial de molle	1153,33	3017,43
Trolox	3,48	-

V.5. Actividad antioxidante por FRAP

Trolox

Se pesó 0,0025 g de Trolox en un Beaker y y se disolvió en 10 mL de una solución hidroalcohólica (1:10). A partir de esta solución madre 0,25 mg/mL (250 ug/mL), se prepararon diluciones seriadas como se muestra en la tabla a continuación

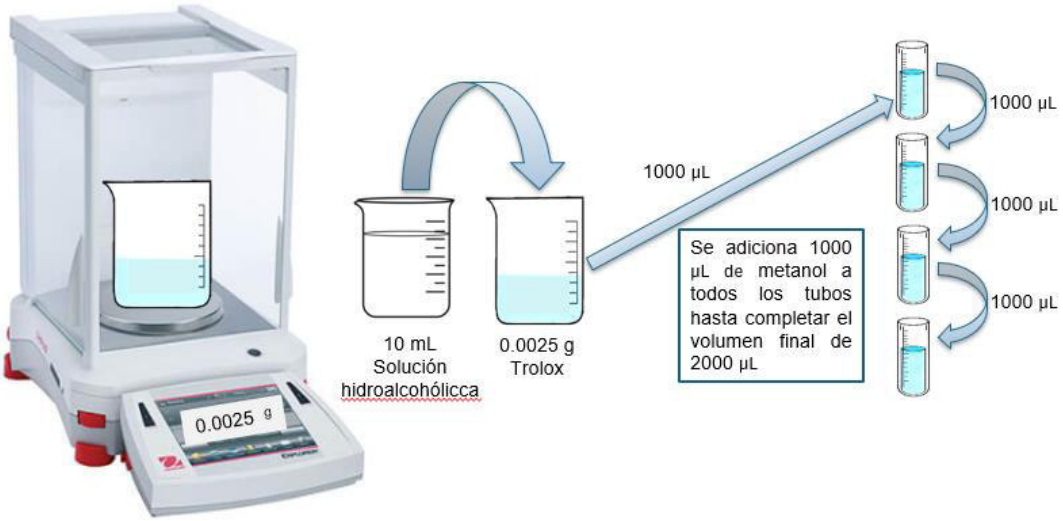


Figura 18. Preparación de diluciones del Trolox para evaluación por FRAP. (Fuente propia)

Tabla 19. Diluciones seriadas del trolox para evaluación por FRAP

Dilución	Trolox µL	Metanol µL	Volumen final µL	Concentración final µg/mL	Concentración final mmol/L
Tubo 1	1000	1000	2000	125	0,500
Tubo 2	1000	1000	2000	62,50	0,250
Tubo 3	1000	1000	2000	31,25	0,125
Tubo 4	1000	1000	2000	15,63	0,063

Tabla 20. Batería de reacción del trolox para evaluación por FRAP

Muestra	FRAP µL	Trolox µL	Metanol µL	Volumen final µL	Concentración final mmol/L
Tubo 1	1900	100	0	2000	0,0250
Tubo 2	1900	100	0	2000	0,0125
Tubo 3	1900	100	0	2000	0,0063
Tubo 4	1900	100	0	2000	0,0031
Tubo 5	1900	0	100	2000	0

Tabla 21. Resultados de la actividad antioxidante del trolox por la capacidad antioxidante reductor del hierro (FRAP).

[ ] mmol/L	A1	A2	A3	Promedio	DE	Ecuación de la recta
0,0250	0,842	0,85	0,86	0,851	0,009	
0,0125	0,423	0,428	0,432	0,428	0,005	y = 31,756x + 0,0489
0,0063	0,258	0,263	0,254	0,258	0,005	
0,0031	0,125	0,145	0,146	0,139	0,012	m
0	0,056	0,062	0,058	0,059	0,003	31,756

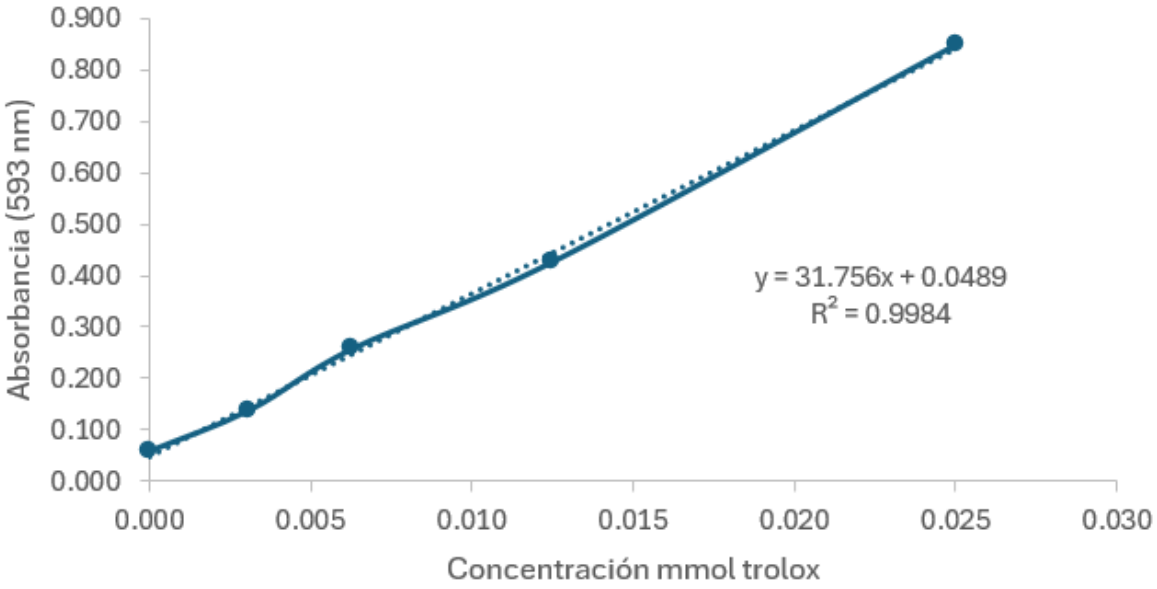


Figura 19. Curva de por la capacidad antioxidante reductor del hierro (FRAP) por trolox (Fuente propia)

Aceite esencial molle

Se pesó 0,956 g de aceite esencial de molle en un Beaker y se le incorporó cinco (5) mL de metanol químicamente puro (QP). A partir de esta solución madre (191,2 mg/mL) se hizo una dilución de 1 en 100 en metanol. Tomándose 100 uL de aceite y 1900 uL del reactivo FRAP, para dejar reaccionar durante 10 min.

Lecturas por triplicado

Tabla 22. Resultados de la actividad antioxidante del AESM por la capacidad antioxidante reductor del hierro (FRAP).

A1	A2	A3	Promedio	DE
0,356	0,345	0,348	0,350	0,001

Utilizamos la siguiente ecuación:

$$FRAP = \frac{\frac{mmol}{L} trolox}{\frac{mg}{mL}\ extracto} = \frac{1}{m} = ABS_{Ext} \times \frac{1}{2} \times Fd$$

Donde:

m	: pendiente de la recta a partir estándar trolox.	31,756
ABS_{ext}	: absorbancia del extracto	0,350
Z	: concentración de extracto	191,2 mg/mL
Fd	: Factor de dilución	100

Tabla 23. Resultados de la capacidad antioxidante reductor del hierro (FRAP). [TEAC-FRAP (mM ET/g de extracto)]

Muestra	TEAC-FRAP (mM ET/g de extracto)
Aceite esencial de molle	0,0058 ± 0,0001 mmol ET/g

VI. DISCUSIÓN

Como resultado de la Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas realizada al aceite esencial obtenido del fruto del molle se obtuvieron 46 espectros siendo los que presentan mayor área el aromadendreno (18,15%), δ-cadineno (12,65%), α-humuleno (11,92%) y β-cariofileno (10.88%). Para la discusión de estos resultados se revisaron 11 artículos internacionales (9 artículos fueron realizados sobre el fruto y 2 sobre las hojas) y 2 artículos nacionales (1 artículo sobre fruto y 1 sobre hojas). Los resultados hallados en los diferentes artículos difieren de lo entre ellos y difieren de lo obtenido en este estudio. Como se mencionó líneas arriba el principal compuesto obtenido en el presente estudio

fue el aromadendreno (18,15%), sin embargo, de los 13 artículos revisados, listados a continuación:

- Extracción y caracterización del aceite esencial de molle (*Schinus molle* L.) Realizado por Llanos, S. (21)
- GC-MS Profile, Antioxidant Activity, and In Silico Study of the Essential Oil from *Schinus molle* L. Leaves in the Presence of Mosquito Juvenile Hormone-Binding Protein (mJHBP) from Aedes aegypti." Realizado por Herrera, O., Chavez, H., Enciso, E., et al. (15)
- Chemical composition of the *Schinus molle* L. essential oil and their biological activities. Realizado por Doleski, P., Ferreira, C., Calil, J., et al. (54)
- *Schinus molle*: anatomy of leaves and stems, chemical composition and insecticidal activities of volatile oil against bed bug (Cimex lectularius). Realizado por Machado, C., Raman, V., Rehman, J., et al. (13)
- Volatiles composition and extraction kinetics from *Schinus terebinthifolius* and *Schinus molle* leaves and fruit. Realizado por dos Santos Cavalcantia, A., de Souza Alves, M., Paulo da Silva, L., et al. (27)
- Chemical Composition, Antioxidant, Insecticidal Activity, and Comparative Analysis of Essential Oils of Leaves and Fruits of *Schinus molle* and *Schinus terebinthifolius*. Realizado por Belhoussaine, O., El Kourchi, C., Harhar, H., et al. (55)
- Chemical composition of *Schinus molle* essential oil and its cytotoxic activity on tumour cell lines. Realizado por Díaz, C., Quesada, S., Brenes, O., et al. (56)
- *Schinus molle*: Chemical Analysis, Phenolic Compounds and Evaluation of Its Antioxidant Activity." Realizado por Kasmi A., Hammami M., Abderrabba M., et al. (57)
- Chemical characterization of *Schinus molle* L. essential oils from North Cyprus. Realizado por Alnawari, H., Demirci, B., Hanoğlu, A., et al. (58)
- Essential Oil of Wild Pepper Fruits (*Schinus molle*) From Morocco: Chemical Composition and Biological Activities. Realizado por Essabiri, H., Abdoul, F., Ainane, A., et al. (59)
- Chemical Composition and Biological Activity of Volatile Extracts from Leaves and Fruits of *Schinus terebinthifolius* Raddi from Tunisia. Realizado por Piras, A., Marzouki, H., Falconieri, D., et al. (60)

- Chemical Composition and Cytotoxic Activity of the Essential Oils of *Schinus molle* Growing in Egypt. Realizado por Hamdan, D., Al-Gendy, A., El-Shazly, A. (61)
- Chemical Composition, Antimicrobial and Antioxidant Properties of *Schinus molle* L. Essential Oil from Turkey. Realizado por Eryigit, T., Yildirim, B., Ekici, K., et al. (62)

Solo en el estudio realizado por Diaz, C., Quesada, S., Brenes, O., y otros se reportó un valor de 4% para aromadendreno. Los principales compuestos obtenidos por el autor fueron α-pineno (22,7%) y β-pineno (31,1%). (56)

El segundo compuesto más representativo hallado en el estudio es el δ-cadineno (12,65%) en la literatura se encontraron 4 artículos (27, 56, 63, 59) que en sus resultados obtuvieron un valor superior a 1% para el compuesto siendo el estudio realizado por Santos, A., Souza, M., Paulo, L., y otros el que obtuvo el valor más alto reportado en literatura (4,6%). Los componentes principales reportados por los autores son β-pineno (36,3%), α-pineno (20,3%), germacreno D (12,1%) y espatulanol (11,4%). (27) En el caso del α-humuleno (11,92%) el estudio realizado por Abir,K., Majdi, H., Manet, A., y otros se reportó un valor de 4.3% para α-humuleno. Los compuestos más abundantes descritos por los autores son 6-epi-shyobunol (16,22 %), d-limoneno (15,35 %), espatulenol (8,16 %) y 4-epi cubebol (7,84 %). (57) En cuanto al β-cariofileno (10,88%) se encontraron 5 artículos que describen un porcentaje mayor a uno. El estudio realizado por Doleski, P.,Ferreira, C., Calil, J., y otros reportó un valor de 19.7% para el β-cariofileno siendo uno de los compuestos principales encontrados junto con el biciclogermacreno (20,5 %) y el espatulanol (19,2%). (54)

Los 46 espectros obtenidos que corresponden a 37 componentes, de los cuales 2 son de estructura desconocida, el 91,24% son sesquiterpenos, el 1,08% son monoterpenos y el 7,66% pertenecen a otros grupos químicos. El estudio realizado por Doleski, P.,Ferreira, C., Calil, J., y otros reportó un valor de 92,2% para los sesquiterpenos y 2,8% de monoterpenos. (54)

Como resultado de la actividad antioxidante del aceite esencial de *Schinus molle* L. determinada por el método DPPH a una concentración de 10655,0 µg/mL se obtuvo

un 57% de captación de radicales libres con un IC50 de 8690,83 µg/mL y un TEAC-DPPH de 207,11µg ET/g aceite esencial.

En una investigación realizada por Abir K., y otros del aceite esencial de los frutos de S. molle obtenidos en Túnez empleando el método de extracción por hidrodestilación, se obtuvo que para la prueba de DPPH el IC50 fue mayor a 10000 µg/mL. (57)

En el trabajo desarrollado por Oumayma Belhoussaine et al., se llevó a cabo la extracción de aceites esenciales a partir de hojas y frutos de *Schinus molle* recolectados en Marruecos, empleando el método de hidrodestilación. La evaluación de la actividad antioxidante se realizó mediante el ensayo de captura del radical DPPH, obteniéndose un valor de IC_{50} de 4134 ± 0.41 µg/mL. (55)

En el estudio realizado por Marwa Ben Hmed et al., se evaluó la actividad antioxidante de *Schinus molle L.* a partir de extractos obtenidos por maceración en agua destilada de frutos recolectados en Gafsa (Túnez). La capacidad antioxidante, determinada mediante el ensayo DPPH, presentó un valor de IC_{50} de 217.63 µg/mL. (63)

Como resultado de la actividad antioxidante del aceite esencial de *Schinus molle* L. determinada por el método ABTS a una concentración de 2024,5 µg/mL se obtuvo un 83,69% de captación de radicales libres con un IC50 de 1153,33 µg/mL y un TEAC-ABTS de 3017,43 µg ET/g aceite esencial,

En una investigación realizada por Abir K., y otros del aceite esencial de los frutos de S. molle obtenidos en Túnez empleando el método de extracción por hidrodestilación, se obtuvo que para la prueba de ABTS el IC50 de 32,6 µg/mL. (57)

En el trabajo de Bendaoud Houcine et al., se evaluó la actividad antioxidante de aceites esenciales extraídos por destilación por vapor de las bayas de *Schinus molle L.* provenientes del sur de Túnez. La actividad antioxidante fue determinada mediante el ensayo ABTS, obteniéndose un valor de IC_{50} de 270.5 µg/mL. (64)

En el trabajo de Herrera O.et al., se estudió la actividad antioxidante de aceites esenciales extraídos por destilación por vapor de las hojas de *Schinus molle L.* provenientes del Ica. La actividad antioxidante determinada por el ensayo ABTS obtuvo un valor de IC_{50} de 205 µg/mL. (15)

Como resultado de la actividad antioxidante del aceite esencial de *Schinus molle* L. determinada por el método FRAP a una concentración de 95,6 µg/mL se obtuvo un

TEAC-FRAP de 0,0058 mM ET/g aceite esencial, en una investigación realizada por Herrera O., y otros del aceite esencial de las hojas de S. molle obtenidos en Perú, se obtuvo que el TEAC-FRAP fue de 65,16 mM ET/g.(15)

Los principales responsables de la actividad antioxidante del aceite esencial de *Schinus molle* son los sesquiterpenos mayoritarios que se identificaron por GC-MS —en especial el aromadendreno (18,15 %), el δ-cadineno (12,65 %) y el α-humuleno (11,92 %)— acompañados por β-cariofileno (10,88 %). Estos compuestos, por su estructura rica en dobles enlaces conjugados y átomos de oxígeno en algunos casos, son capaces de donar electrones u átomos de hidrógeno para neutralizar radicales libres, lo que explica la actividad antioxidante moderada observada. (65)

La marcada disparidad entre los IC_{50} obtenidos por DPPH y ABTS en el aceite esencial de *Schinus molle* se debe a varias diferencias metodológicas y fisicoquímicas, como la naturaleza y solubilidad del radical, la cinética de reacción y el acceso estérico al sitio reactivo. Dado que el radical DPPH tiene un centro más «enclaustrado», los sesquiterpenos mayores (aromadendreno, α-humuleno y δ-cadineno) encuentran más barreras estéricas para acercarse y donar un átomo de hidrógeno, lo que incrementa su IC_{50} en este ensayo. En cambio, el radical ABTS es menos restrictivo y facilita la reacción de moléculas voluminosas, lo que se refleja en un IC_{50} más bajo. (66)

VII. CONCLUSIONES

1. Se realizó la caracterización de los parámetros físicos del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L. obtenido por arrastre de vapor. El rendimiento obtenido fue del 4,171 %, la densidad a 20 °C fue de 0,9748 y el índice de refracción a 20 °C fue de 1,479.
2. Se determinó la composición química del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L. por Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas, obteniendo como principal componente al Aromadendreno, seguido del δ-cadineno y el α-humuleno.
3. Se evaluó la actividad antioxidante del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L. por 2,2-Difenil-1-Picrilhidrazilo (DPPH), obteniendo un TEAC-DPPH de 207,11 µg ET/g aceite esencial. Lo que indica poca eficacia.
4. Se evaluó la actividad antioxidante del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L. por la reacción del radical ácido 2,2'-azino-bis-3-etilbenzotiazolina-6-sulfónico (ABTS), obteniendo un TEAC-ABTS de 3017,43 µg ET/g aceite esencial. Lo que indica una capacidad moderada a buena.
5. Se evaluó la actividad antioxidante del aceite esencial del fruto de *Schinus molle* L. por la capacidad antioxidante reductor del hierro (FRAP), obteniendo TEAC-FRAP de 0,0058 mM ET/g de aceite esencia. Lo que indica que el aceite tiene muy poca capacidad reductora de hierro.

IX. RECOMENDACIONES

1. Ampliar el campo de investigación del aceite esencial de *Schinus molle* con la finalidad de aislar los componentes químicos responsables de su actividad antioxidante.
2. Ampliar el campo de investigación del aceite esencial de *Schinus molle* recolectando la muestra en distintas partes del Perú para poder realizar una comparativa y diferenciación.

X. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Organización Panamericana de Salud. Situación de las plantas medicinales en Perú. Informe de reunión del grupo de expertos en plantas medicinales. (Lima, 19 de marzo del 2018). Lima: OPS; 2019. [citado el 18 de abril del 2024]. Disponible en: https://iris.paho.org/handle/10665.2/50479
2. Segovia Huarcaya JJ, Valentin Soto LS. Capacidad antioxidante y antihiperglicemiante *in vitro* del arabinoxilano ferulado extraído a partir del residuo de bagazo en el proceso de elaboración de la "chicha de jora" [Internet]. [Lima]: Universidad Nacional Mayor de San Marcos; 2022 [citado el 5 de agosto del 2023]. Disponible en: https://cybertesis.unmsm.edu.pe/backend/api/core/bitstreams/b554e644-af96-41f1-8631-909f753dca23/content
3. Suárez Cunza S, Castro Luna A, Ale Borja N. Actividad antioxidante *in vitro* de un extracto acuoso de Allium Sativum variedad Huaralino. Rev Soc Quím Perú [Internet]. 2014 [citado el 4 de mayo del 2024];80(4):308–16. Disponible en: http://www.scielo.org.pe/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1810-634X2014000400010
4. PharmaOffer. Fabricantes de API de antioxidantes [Internet]. Pharmaoffer.com. [citado el 20 de abril del 2024]. Disponible en: https://pharmaoffer.com/es/api-excipient-supplier/antioxidants
5. Hien Thi H, Ju-Young M, Young-Chul L. Natural Antioxidants from Plant Extracts in Skincare Cosmetics: Recent Applications, Challenges and Perspectives. Cosmetics [Internet]. el 11 de octubre de 2021 [citado el el 20 de abril del 2024];8(4):106. Disponible en: https://www.mdpi.com/2079-9284/8/4/106
6. Calor y radiación: ¿por qué el Perú tiene el índice de rayos UV más alto del mundo? [informe] [Internet]. Elperuano.pe. 2024 [citado el 27 de abril de 2024]. Disponible en: https://www.elperuano.pe/noticia/234514-calor-y-radiacion-por-que-el-peru-tiene-el-indice-de-rayos-uv-mas-alto-del-mundo-informe
7. San-Miguel A, Martin-Gil FJ. Importancia de las especies reactivas al oxigeno (radicales libres) y los antioxidantes en clinica. Gac médica Bilbao

[Internet]. 2009 [citado el 8 de mayo de 2023];106(3):106–13. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1016/s0304-4858(09)74661-x

8. Revilla Tafur L. SITUACION DEL CÁNCER EN EL PERÚ, 2021 [Internet]. Gob.pe. 2021 [citado el 5 de agosto de 2023]. Disponible en: https://www.dge.gob.pe/portal/docs/tools/teleconferencia/2021/SE252021/03.pdf
9. Ministerio de Salud. Semana Epidemiológica (del 23 al 29 de enero del 2022). Boletín Epidemiológico [Internet]. 2022 [citado el 5 de agosto de 2023];31(4):92–122. Disponible en: https://www.dge.gob.pe/epipublic/uploads/boletin/boletin_20214_16_203924.pdf
10. Instituto Nacional del Cáncer. El Cáncer: Causas y prevención [Internet]. Cancer.gov. 2014 [citado el 5 de agosto de 2023]. Disponible en: https://www.cancer.gov/espanol/cancer/causas-prevencion
11. *Schinus molle* [Internet]. Arbolapp. Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC); 2015 [citado el 13 de agosto de 2023]. Disponible en: https://www.arbolapp.es/especies/ficha/schinus-molle/
12. MOLLE (*Schinus molle*) [Internet]. ONG PERÚ ECOLÓGICO 2012. 2012 [citado el 13 de agosto de 2023]. Disponible en: https://peruecologico.com.pe/flo_molle_1.htm
13. Machado CD, Raman V, Rehman JU, Maia BHLNS, Meneghetti EK, Almeida VP, et al. *Schinus molle*: anatomy of leaves and stems, chemical composition and insecticidal activities of volatile oil against bed bug (Cimex lectularius). Rev Bras Farmacogn [Internet]. 2019 [citado el 20 de agosto de 2023];29(1):1–10. Disponible en: https://www.scielo.br/j/rbfar/a/H8Syf9QNgKcGYzyP9b8HthN/
14. Martins M do R, Arantes S, Candeias F, Tinoco MT, Cruz-Morais J. Antioxidant, antimicrobial and toxicological properties of *Schinus molle* L. essential oils. J Ethnopharmacol [Internet]. 2014; [citado el 20 de agosto de 2023]; 151(1):485–92. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1016/j.jep.2013.10.063
15. Herrera-Calderon O, Chavez H, Enciso-Roca EC, Común-Ventura PW, Hañari-Quispe RD, Figueroa-Salvador L, et al. GC-MS profile, antioxidant

activity, and in silico study of the essential oil from *Schinus molle* L. leaves in the presence of mosquito juvenile hormone-binding protein (mJHBP) from Aedes aegypti. Biomed Res Int [Internet]. 2022 [citado el 20 de agosto de 2023];2022:5601531. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1155/2022/5601531

16. Vasquez Gonzales AA. Actividad antioxidante y antimicrobiana *in vitro* del complejo de inclusión del aceite esencial de *Schinus molle* con 2 tipos de ciclodextrinas [Internet]. [Lima]: Universidad Nacional Mayor de San Marco; 2021 [citado el 20 de agosto de 2023]. Disponible en: https://cybertesis.unmsm.edu.pe/backend/api/core/bitstreams/4c821800-9cec-42cd-b4f4-a2d647f6807e/content
17. Bendaoud H, Romdhane M, Souchard JP, Cazaux S, Bouajila J. Chemical composition and anticancer and antioxidant activities of *Schinus molle* L. and *Schinus terebinthifolius* Raddi berries essential oils. J Food Sci [Internet]. 2010 [citado el 20 de agosto de 2023];75(6):C466-72. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1111/j.1750-3841.2010.01711.x
18. Hosni K, Jemli M, Dziri S, M'rabet Y, Ennigrou A, Sghaier A, et al. Changes in phytochemical, antimicrobial and free radical scavenging activities of the Peruvian pepper tree (*Schinus molle* L.) as influenced by fruit maturation. Ind Crops Prod [Internet]. 2011 [citado el 20 de agosto de 2023]; 34(3):1622–8. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1016/j.indcrop.2011.06.004
19. Min Jeong K, Dae Won K, Gyeong KSJ, Keun JKS. Analysis of the Chemical, Antioxidant, and Anti-Inflammatory Properties of Pink Pepper (*Schinus molle* L.). MDPI. 2021 [citado el 20 de agosto de 2023];10(7):1062. Disponible en: https://www.mdpi.com/2076-3921/10/7/1062
20. Rebolledo V, Otero MC, Delgado JM, Torres F, Herrera M, Ríos M, et al. Phytochemical profile and antioxidant activity of extracts of the peruvian peppertree *Schinus areira* L. from Chile. Saudi J Biol Sci [Internet]. 2021 [citado el 20 de agosto de 2023]; 28(1):1052–62. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1016/j.sjbs.2020.10.043
21. Llanos S. Extracción Y Caracterización Del Aceite Esencial De Molle (*Schinus molle* L.). [Perú]: Universidad Nacional Jorge Basadre Grohmann; 2012.

22. Oliveira MBS, Valentim IB, Rocha TS, Santos JC, Pires KSN, Tanabe ELL, et al. *Schinus terebenthifolius* Raddi extracts: From sunscreen activity toward protection of the placenta to Zika virus infection, new uses for a well-known medicinal plant. Ind Crops Prod [Internet]. 2020 [citado el 20 de agosto de 2023]; 152(112503):112503. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1016/j.indcrop.2020.112503
23. Volpini-Klein AF, Silva C, Fernandes S, Nicolau C, Cardoso C, Fiorucci A, et al. Effect of leaf and fruit extracts of *Schinus molle* on oxidative stability of some vegetables oils under accelerated oxidation. Dialnet [Internet]. 2020 [citado el 20 de agosto de 2023]; 71(3). Disponible en: https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=7542471
24. Regina da Silva E, Pawlowski Â, Lazarotto D, Gonçalves Soares G. Antioxidant activity of essential oils from leaves of *Schinus lentiscifolius* Marchand. Revista Cubana de Plantas Medicinales [Internet]. 2019 [citado el 20 de agosto de 2023];24(2):783. Disponible en: https://www.medigraphic.com/cgi-bin/new/resumenI.cgi?IDARTICULO=102518
25. Feriani A, Tir M, Hamed M, Sila A, Nahdi S, Alwasel S, et al. Multidirectional insights on polysaccharides from *Schinus terebinthifolius* and *Schinus molle* fruits: Physicochemical and functional profiles, *in vitro* antioxidant, anti-genotoxicity, antidiabetic, and antihemolytic capacities, and in vivo anti-inflammatory and anti-nociceptive properties. Int J Biol Macromol [Internet]. 2020; [citado el 20 de agosto de 2023]; 165(Pt B):2576–87. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2020.10.123
26. Bernardes NR, Heggdorne-Araújo M, Borges IFJC, Almeida FM, Amaral EP, Lasunskaia EB, et al. Nitric oxide production, inhibitory, antioxidant and antimycobacterial activities of the fruits extract and flavonoid content of *Schinus terebinthifolius*. Rev Bras Farmacogn [Internet]. 2014 [citado el 20 de agosto de 2023];24(6):644–50. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1016/j.bjp.2014.10.012
27. Dos Santos Cavalcanti A, de Souza Alves M, da Silva LCP, dos Santos Patrocínio D, Sanches MN, Chaves DS de A, et al. Volatiles composition and extraction kinetics from *Schinus terebinthifolius* and *Schinus molle* leaves

and fruit. Rev Bras Farmacogn [Internet]. 2015 [citado el 20 de agosto de 2023];25(4):356–62. Disponible en: https://www.scielo.br/j/rbfar/a/w79rRQVFcVsMw6vCQGzhKXt/?lang=en

28. Tlili N, Yahia Y, Feriani A, Labidi A, Ghazouani L, Nasri N, et al. *Schinus terebinthifolius* vs *Schinus molle*: A comparative study of the effect of species and location on the phytochemical content of fruits. Ind Crops Prod [Internet]. 2018 [citado el 20 de agosto de 2023]; 122:559–65. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1016/j.indcrop.2018.05.080
29. Abderrahim A, Belhamel K, Chalard P, Figuérédo G. Correlation between chemical composition and antioxidant activity of the essential oils from leaves and berries of *Schinus molle* L. growing in two areas of Bejaia (Algeria). J Food Meas Charact [Internet]. 2018 [citado el 20 de agosto de 2023];12(2):1123–34. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1007/s11694-018-9727-2
30. Ríos J. Chapter 1 - Essential Oils: What They Are and How the Terms Are Used and Defined. In: Essential Oils in Food Preservation, Flavor and Safety [Internet]. Preddy, Victor; 2016 [citado el 20 de agosto de 2023]. p. 3–10. Disponible en: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780124166417000018
31. Essential oils [Internet]. National Institute of Environmental Health Sciences. [citado el 20 de agosto de 2023]. Disponible en: https://www.niehs.nih.gov/health/topics/agents/essential-oils/index.cfm
32. Cerutti, M., & Neumayer, F. Aceite Esencial De Limón Mariano. Revista de investigación académica. INVENIO. 2004.149–155.
33. Romero D. Estudio De La Extracción A Alta Presión De Activos De Piel De Limón Y Su Posible Uso En La Impregnación De Co2 Supercrítico En La Obtención De Envases Activos Para Su Uso Alimentario. [Cádiz]: Universidad de Cádiz; 2020.
34. Stashenko, E. Aceites Esenciales. División de Publicaciones UIS. 2009.,180
35. Gil Zanón, F. Mejora de una instalación de extracción con CO2 supercrítico: Diseño del software de control e incorporación de una bomba diafragma. Trabajo Fin de Grado. Universidad Politécnica de Valencia. 2016

36. Navarrete, C., Gil, J., Durango, D., & Garcia, C. Extracción y caracterización del aceite esencial de mandarina obtenido de residuos agroindustriales. DYNA (Colombia), 2010, 77(162), 85–92.
37. Machado CA, Oliveira F, Antônio de Andrade M, Saraiva Hodel KV, Lepikson H, Aparecida Souza B. Steam Distillation for Essential Oil Extraction: An Evaluation of Technological Advances Based on an Analysis of Patent Documents. Sustainability [Internet]. 2022 [citado el 27 de abril de 2024];14(12):7119. Disponible en: https://www.mdpi.com/2071-1050/14/12/7119#B20-sustainability-14-07119
38. Ruiz C, Díaz C, Rojas R. Composición química de aceites esenciales de 10 plantas aromáticas peruanas. Rev Soc Quím Perú [Internet]. 2015 [citado el 10 de enero de 2024];81(2):81–94. Disponible en: http://www.scielo.org.pe/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1810-634X2015000200002
39. Brainina K, Stozhko N, Vidrevich M. Antioxidants: Terminology, methods, and future considerations. Antioxidants (Basel) [Internet]. 2019 [citado el 10 de enero de 2024];8(8):297. Disponible en: http://dx.doi.org/10.3390/antiox8080297
40. Shaoping N, Steve WC, Mingyong X. Bioactive Polysaccharides [Internet]. 1a ed. 2017 [citado el 10 de enero de 2024]. Disponible en: https://www.sciencedirect.com/book/9780128094181/bioactive-polysaccharides
41. Sánchez-Valle V, Méndez-Sánchez N. Estrés oxidativo, antioxidantes y enfermedad. Rev Invest Med Sur Mex [Internet]. 2013 [citado el 10 de enero de 2024];20(3):161–8. Disponible en: https://www.medigraphic.com/pdfs/medsur/ms-2013/ms133e.pdf
42. Viada Pupo E, Gómez Robles L, Campaña Marrero IR. Estrés oxidativo. CCH Correo cient Holguín [Internet]. 2017 [citado el 10 de enero de 2024];21(1):171–86. Disponible en: http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1560-43812017000100014
43. Avello M, Suwalsky M. Radicales libres, antioxidantes naturales y mecanismos de protección*. Atenea (Concepc) [Internet]. 2006 [citado el 10

de enero de 2024]; 494:161–72. Disponible en: https://www.scielo.cl/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0718-04622006000200010

44. Paredes Salido F, Roca Fernández JJ. Influencia de los radicales libres en el envejecimiento celular. Offarm: farmacia y sociedad [Internet]. 2002 [citado el 10 de enero de 2024];21(7):96–100. Disponible en: https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=5325635
45. Aparcana Ataurima IM, Villarreal Inca LS. Evaluación de la capacidad antioxidante de los extractos etanólicos del fruto de Physalis peruviana "aguaymanto" de diferentes lugares geográfficos del Perú [Internet]. [Lima]: Universidad Nacional Mayor de San Marcos; 2014 [citado el 10 de enero de 2024]. Disponible en: https://cybertesis.unmsm.edu.pe/backend/api/core/bitstreams/cff382f1-5c6a-4cbd-b13c-7c606b400fe2/content
46. Ilyasov IR, Beloborodov VL, Selivanova IA, Terekhov RP. ABTS/PP Decolorization Assay of Antioxidant Capacity Reaction Pathways. Int J Mol Sci [Internet]. 2020 [citado el 10 de enero de 2024];21(3):1131. Disponible en: http://dx.doi.org/10.3390/ijms21031131
47. Kedare SB, Singh RP. Genesis and Development of DPPH Method of Antioxidant Assay. J Food Sci Technol [Internet]. 2011 [citado el 17 de enero de 2024]; 48(4):412–22. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1007/s13197-011-0251-1
48. Fernandes RPP, Trindade MA, Tonin FG, Lima CG, Pugine SMP, Munekata PES, et al. Evaluation of antioxidant capacity of 13 plant extracts by three different methods: cluster analyses applied for selection of the natural extracts with higher antioxidant capacity to replace synthetic antioxidant in lamb burgers. J Food Sci Technol [Internet]. 2016 [citado el 17 de enero de 2024];53(1):451–60. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1007/s13197-015-1994-x
49. Payne AC, Mazzer A, Clarkson GJJ, Taylor G. Antioxidant assays - consistent findings from FRAP and ORAC reveal a negative impact of organic cultivation on antioxidant potential in spinach but not watercress or rocket

leaves. Food Sci Nutr [Internet]. 2013 [citado el 17 de enero de 2024];1(6):439–44. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1002/fsn3.71

50. Agilent. 5977C GC/MSD [Internet]. Agilent.com. [citado el 17 de enero de 2024]. Disponible en: https://www.agilent.com/en/product/gas-chromatography-mass-spectrometry-gc-ms/gc-ms-instruments/5977c-gc-msd
51. Mettler-Toledo International Inc. all rights reserved. ¿Qué es la densidad? [Internet]. Mettler-Toledo International Inc. all rights reserved. 2024 [citado el 17 de enero de 2024]. Disponible en: https://www.mt.com/mx/es/home/applications/Application_Browse_Laboratory_Analytics/Density/density-measurement.html
52. Mettler-Toledo International Inc. all rights reserved. Índice de Refracción: Definición y Cómo Calcularlo [Internet]. Mettler-Toledo International Inc. all rights reserved. 2023 [citado el 17 de enero de 2024]. Disponible en: https://www.mt.com/es/es/home/applications/Application_Browse_Laboratory_Analytic
53. Laura Oshin RO. Caracterización fisicoquímica , actividad antioxidante y toxicidad del aceite de fruto Mauritia flexuosa “aguaje” de Iquitos y Tingo María [Internet]. [Lima]: Universidad Nacional Mayor de San Marcos ; 2024 [citado el 17 de enero de 2024]. Disponible en: https://alicia.concytec.gob.pe/vufind/Record/UNMS_435fa7a5677dc2e8fe42019e66d757e2/Details
54. Doleski MuhdI PS, Ferreira Cuelhol CH, Calil BrondaniI J, Palermo Manfron M. Chemical composition of the *Schinus molle* L. essential oil and their biological activities. Revista Cubana de Farmacia [Internet]. 2015 [citado el 17 de enero de 2024];49(1):132–43. Disponible en: http://scielo.sld.cu/pdf/far/v49n1/far13115.pdf
55. Belhoussaine O, El Kourchi C, Harhar H, Bouyahya A, El Yadini A, Fozia F, et al. Chemical composition, antioxidant, insecticidal activity, and comparative analysis of essential oils of leaves and fruits of *Schinus molle* and *Schinus terebinthifolius*. Evid Based Complement Alternat Med [Internet]. 2022 [citado el 27 de abril de 2025]; 2022:4288890. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1155/2022/4288890

56. Díaz C, Quesada S, Brenes O, Aguilar G, Cicció JF. Chemical composition of *Schinus molle* essential oil and its cytotoxic activity on tumour cell lines. Nat Prod Res [Internet]. 2008 [citado el 17 de enero de 2024];22(17):1521–34. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1080/14786410701848154
57. Kasmi A, Hammami M, Abderrabba M, Ayadi S. *Schinus molle* : Chemical analysis, phenolic compounds and evaluation of its antioxidant activity. Journal of Chemical and Pharmaceutical Research [Internet]. 2016 [citado el 17 de enero de 2024];8(5):93–101. Disponible en: https://www.jocpr.com/articles/schinus-molle-chemical-analysis-phenolic-compounds-and-evaluation-of-its-antioxidant-activity.pdf
58. Alnawari H, Demirci B, et al., Chemical characterization of *Schinus molle* L. essential oils from North Cyprus. Nat Volatiles Essent Oils [Internet]. 2018 [citado el 4 de agosto de 2025];5:7–12. Disponible en: https://www.nveo.org/index.php/journal/article/view/64
59. Essabiri H a., Fatouma MA-L, Ayoub A, Ma BO, Sanaa C, Adnane EY, et al. Essential oil of wild pepper fruits (*Schinus molle*) from morocco: Chemical composition and biological activities [Internet]. Silae.it. [citado el 4 de agosto de 2025]. Disponible en: https://pharmacologyonline.silae.it/files/archives/2021/vol2/PhOL_2021_2_A056_ESSABIRI.pdf
60. Acgpubs.org. Chemical Composition and Biological Activity of Volatile Extracts from Leaves and Fruits of *Schinus terebinthifolius* Raddi from Tunisia [İnternet]. [citado el 4 de agosto de 2025]. Disponible en: https://www.acgpubs.org/article/records-of-natural-products/2017/1-january-february/chemical-composition-and-biological-activity-of-volatile-extracts-from-leaves-and-fruits-of-schinusterebinthifolius-raddi-from-tunisia
61. Hamdan D., Al-Gendy, A, and El Sahzly, A. Chemical Composition and Cytotoxic Activity of the Essential Oils of *Schinus molle* Growing in Egypt. Journal of Pharmaceutical Sciences and Research. 2016. 8. 779-793.
62. Eryİgİt T., Yİldİrİm B., Ekİcİ K., Çİrka M. Chemical composition, antimicrobial and antioxidant properties of *Schinus molle* L. essential oil from Turkey. Journal of Essential Oil-Bearing Plants [Internet]. 2017 [citado el 4 de agosto

de 2025]; 20:570–7. Disponible en: https://www.cabidigitallibrary.org/doi/full/10.5555/2017322731

63. Hmed MB, Rigane G, Salem RB, Zouari N, Cherif S. Phytochemical and antioxidant activities of *Schinus molle* L. extract. 2020 [citado el 27 de abril de 2025]. 64(2): 173–8. Disponible en: https://revroum.lew.ro/wp-content/uploads/2020/02/Art%2006.pdf
64. Bendaoud H, Romdhane M, Souchard JP, Cazaux S, Bouajila J. Chemical composition and anticancer and antioxidant activities of *Schinus molle* L. and Schinus terebinthifolius Raddi berries essential oils. J Food Sci [Internet]. 2010 [citado el 4 de 2025]; 75(6):C466-72. Disponible en: http://dx.doi.org/10.1111/j.1750-3841.2010.01711.x
65. Zhang W, Shi B. A theoretical study on autoxidation of unsaturated fatty acids and antioxidant activity of phenolic compounds. Journal of The American Leather Chemists Association [Internet]. 2007 [citado el 28 de abril de 2025];102(03):99–105. Disponible en: https://journals.uc.edu/index.php/JALCA/article/view/2332
66. Gulcin İ, Alwasel SH. DPPH Radical Scavenging Assay. Processes [Internet]. 2023 [citado el 27 de abril de 2025];11(8):2248. Disponible en: http://dx.doi.org/10.3390/pr11082248

XII. ANEXOS (*)

CONSTANCIA CLASIFICACIÓN TAXONÓMICA

UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS
(Universidad del Perú, DECANA DE AMÉRICA)
MUSEO DE HISTORIA NATURAL

"Año del Fortalecimiento de la Soberanía Nacional"

CONSTANCIA N° 089-USM-MHN-2022

LA JEFA DEL HERBARIO SAN MARCOS (USM) DEL MUSEO DE HISTORIA NATURAL, DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS, DEJA CONSTANCIA QUE:

La muestra vegetal (con fruto) recibida de **Vianella Lizet Curay Carhuamaca y Alberto Alan Ariza Alva,** ha sido estudiada y clasificada como: *Schinus molle* L. y tiene la siguiente posición taxonómica, según el Sistema de Clasificación APG IV (2016).

ORDEN : Sapindales

FAMILIA : ANACARDIACEAE

GÉNERO : *Schinus*

ESPECIE : *Schinus molle* L.

Nombre vulgar: "Molle"

Procedencia: Churín

Determinado por: MSc. Hamilton Beltrán Santiago.

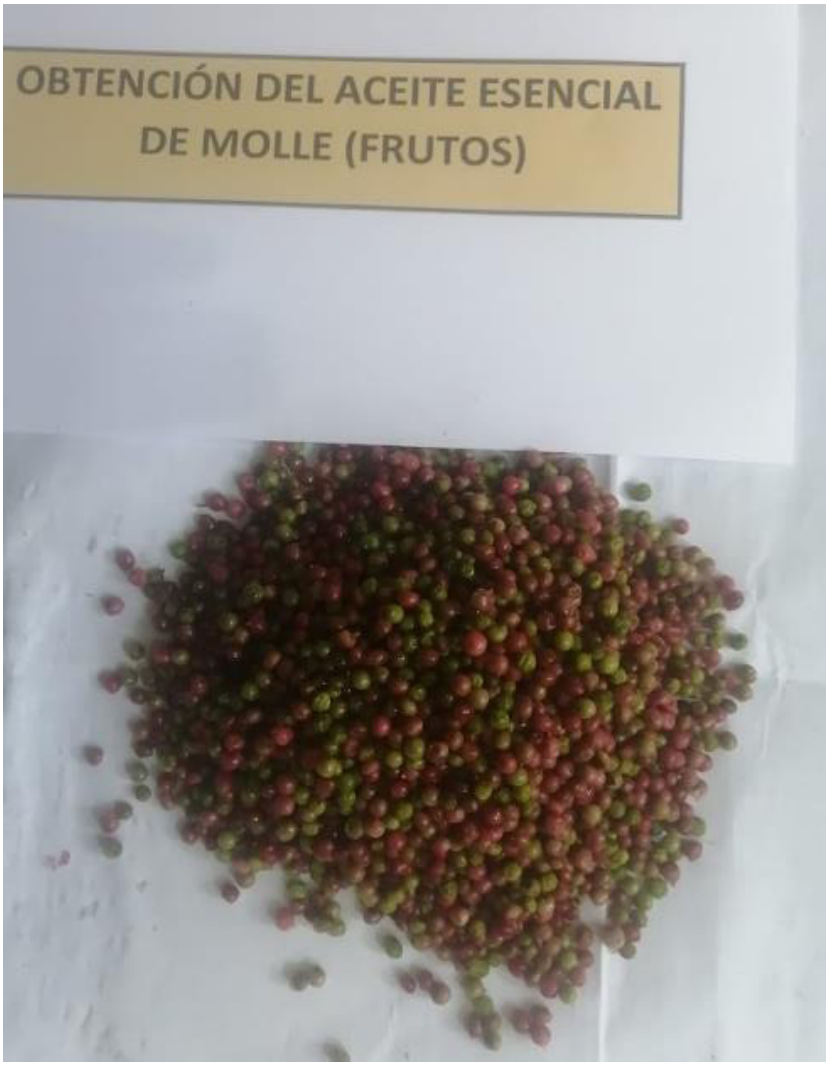
Se extiende la presente constancia a solicitud de la parte interesada, para los fines que estime conveniente.

Lima, 8 de noviembre de 2022

Dra. Joaquina Albán Castillo
JEFA DEL HERBARIO SAN MARCOS (USM)

Av. Arenales 1256, Jesús María
Apdo. 14-034, Lima 14, Perú
Telfs. (511)471-0117, 470-4471
265-6819, 619-7000 anexo 5703
e-mail: herbariousm@unmsm.edu.pe
https://museo hn.unmsm.edu.pe

Obtención del aceite esencial de molle





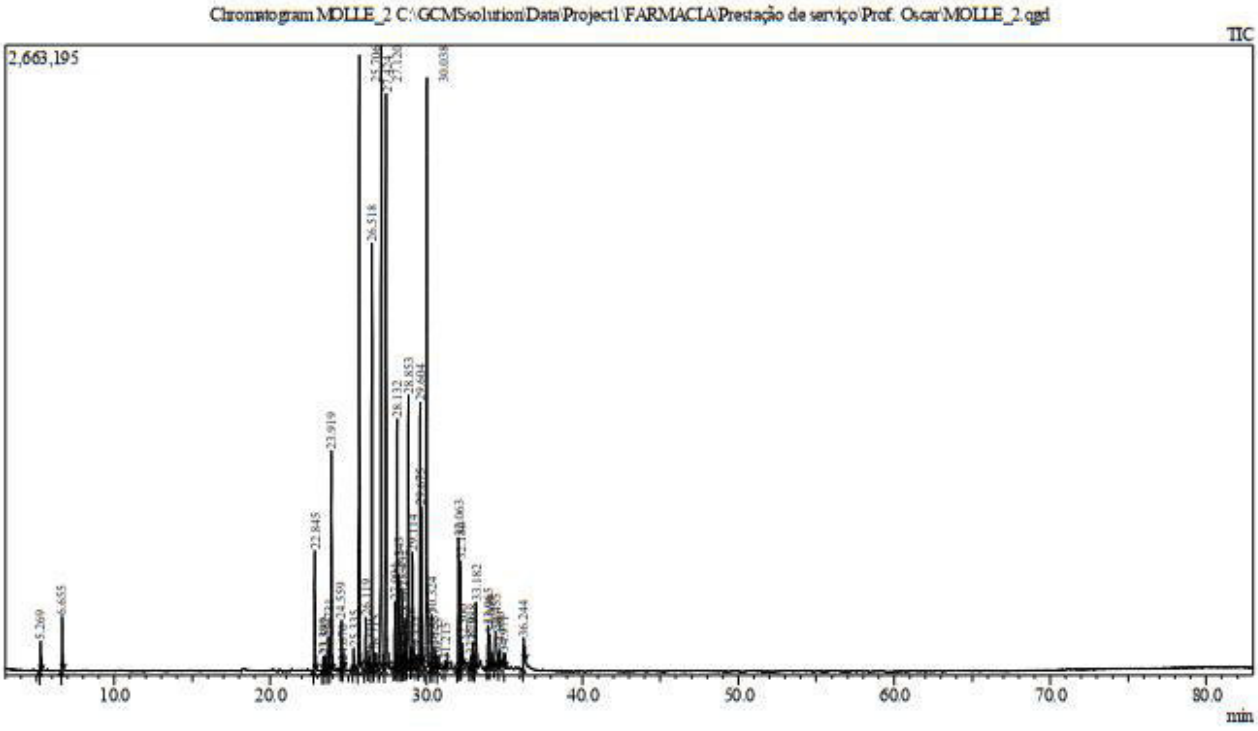

OBTENCIÓN DEL ACEITE ESENCIAL
DE MOLLE (FRUTOS)

Resultados de la composición química del aceite esencial del molle por Cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas.

Sample Information

Analyzed by	: Admin
Analyzed	: 22/11/2022 14:19:19
Sample Type	: Unknown
Level #	: 1
Sample Name	: MOLLE_2
Sample ID	: MOLLE_2
IS Amount	: [1]=1
Sample Amount	: 1
Dilution Factor	: 1
Vial #	: 1
Injection Volume	: 1.00
Data File	: C:\GCMSsolution\Data\Project1\FARMACIA\Prestação de serviço\Prof. Oscar\MOLLE_2.qgd
Org Data File	: C:\GCMSsolution\Data\Project1\FARMACIA\Prestação de serviço\Prof. Oscar\MOLLE_2.qgd
Method File	: C:\GCMSsolution\Data\Project1\FARMACIA\Suzana\Simony\Adams_10min_Split_50.qgm
Org Method File	: C:\GCMSsolution\Data\Project1\FARMACIA\Suzana\Simony\Adams_10min_Split_50.qgm
Report File	: C:\GCMSsolution\Data\Project1\Relatorio\Report_Template.qgr
Tuning File	: C:\GCMSsolution\Data\Project1\Tuning\2022\11.NOV\2022_11_22.qgt
Modified by	: Admin
Modified	: 22/11/2022 15:42:19

Chromatogram MOLLE_2 C:\GCMSsolution\Data\Project1\FARMACIA\Prestação de serviço\Prof. Oscar\MOLLE_2.qgd



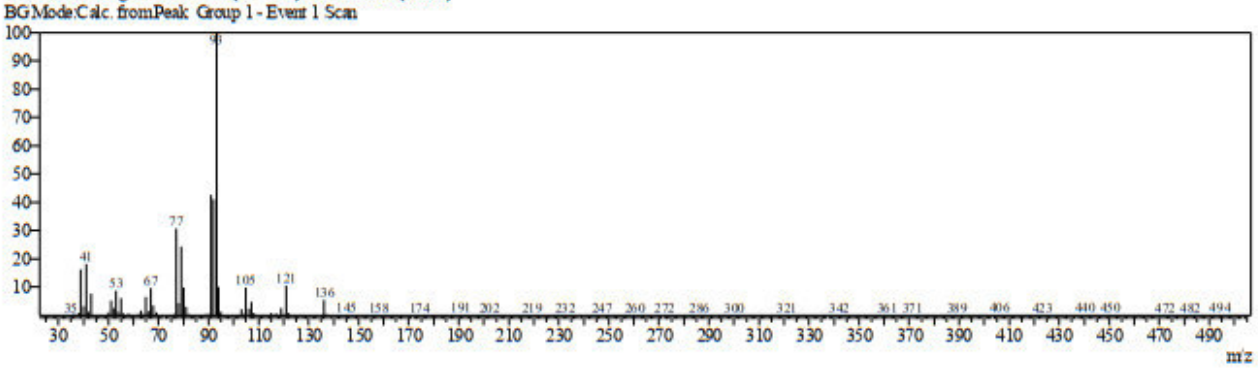
Peak Report TIC

Peak#	R.Time	I.Time	F.Time	Area	Area%	Height	Height%	A/H	Mark	Name
1	5.269	5.215	5.335	316316	0.35	125000	0.54	2.53		.ALPHA.-PINENE, (-)-
2	6.655	6.600	6.735	654625	0.73	228784	0.99	2.86		beta.-Pinene
3	22.845	22.765	22.945	1804704	2.02	505733	2.19	3.57		.alpha.-Cubebene
4	23.399	23.335	23.455	222896	0.25	61455	0.27	3.63		(+)-Cycloisosativene
5	23.512	23.455	23.590	254177	0.29	63652	0.28	3.99	V	(+)-CYCLOISOSATIVENE
6	23.731	23.670	23.805	511542	0.57	139785	0.61	3.66		.alpha.-Ylangene
7	23.919	23.805	24.015	3370501	3.78	925669	4.02	3.64	V	.alpha.-Copaene
8	24.559	24.495	24.635	706100	0.79	199856	0.87	3.53		GERMACRENE-D
9	24.670	24.635	24.725	71716	0.08	24443	0.11	2.93	V	Cyclohexane, 1-ethenyl-1-methyl-2,4-bis(1
10	25.335	25.270	25.415	333818	0.37	89841	0.39	3.72		.alpha.-Gurjunene
11	25.706	25.600	25.795	9699171	10.88	2588117	11.23	3.75		Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimeth
12	26.119	26.020	26.185	917925	1.03	210572	0.91	4.36		GERMACRENE-D
13	26.319	26.260	26.385	149183	0.17	45269	0.20	3.30		Selina-3,7(11)-diene
14	26.518	26.420	26.635	6790103	7.61	1799687	7.81	3.77		1H-Cycloprop[e]azulene, decahydro-1,1,7-t
15	26.715	26.635	26.815	300937	0.34	65570	0.28	4.59	V	1,4-Methano-1H-indene, octahydro-4-meth
16	27.120	26.950	27.220	10633158	11.92	2631501	11.42	4.04		.alpha.-Humulene
17	27.424	27.315	27.575	9401911	10.54	2426290	10.52	3.88		1H-Cycloprop[e]azulene, decahydro-1,1,7-t
18	27.994	27.920	28.050	1018487	1.14	278924	1.21	3.65		.delta.-Cadinene
19	28.132	28.050	28.195	3963958	4.45	1050584	4.56	3.77	V	Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7

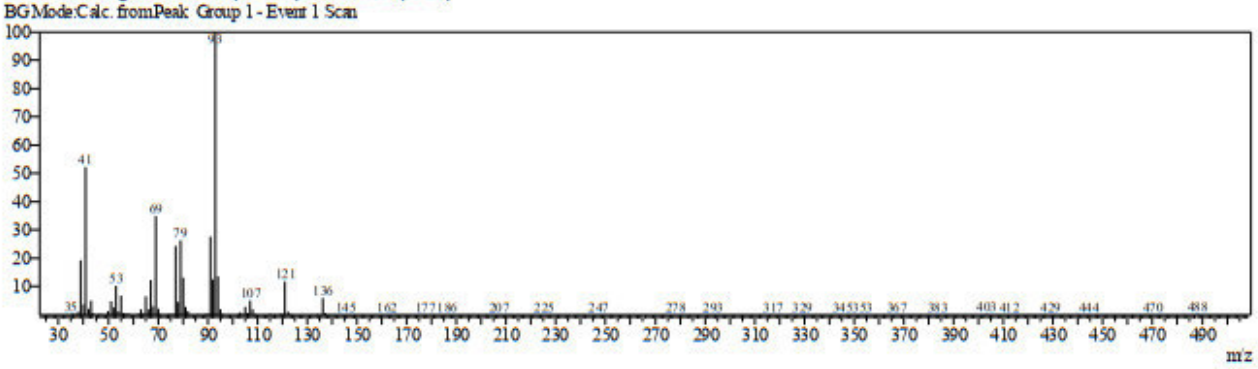
Peak#	R.Time	I.Time	F.Time	Area	Area%	Height	Height%	A/H	Mark	Name
20	28.243	28.195	28.355	1587372	1.78	393571	1.71	4.03	V	1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-
21	28.432	28.355	28.505	1261699	1.41	337693	1.46	3.74		.beta.-Selinene
22	28.549	28.505	28.600	164765	0.18	50954	0.22	3.23	V	(-)-DEHYDROAROMADENDRANE
23	28.662	28.600	28.750	740330	0.83	197462	0.86	3.75	V	1H-Cyclopenta[1,3]cyclopropa[1,2]benzene
24	28.853	28.750	28.965	4841888	5.43	1142871	4.96	4.24	V	Ledene
25	29.026	28.965	29.055	244864	0.27	76158	0.33	3.22		EPIZONAREN
26	29.114	29.055	29.220	1744325	1.96	472824	2.05	3.69	V	.alpha.-Muurolene
27	29.371	29.315	29.440	186175	0.21	54904	0.24	3.39		.delta.-Cadinene
28	29.604	29.515	29.645	4079432	4.57	1109541	4.81	3.68		.alpha.-Amorphene
29	29.675	29.645	29.775	2291650	2.57	661400	2.87	3.46	V	
30	30.038	29.880	30.160	10073352	11.30	2491461	10.81	4.04		.delta.-Cadinene
31	30.324	30.260	30.425	820436	0.92	226906	0.98	3.62		Naphthalene, 1,2,3,4,4a,7-hexahydro-1,6-di
32	30.537	30.425	30.615	321337	0.36	92668	0.40	3.47		.alpha.-Muurolene-(-)
33	30.755	30.695	30.825	201944	0.23	55267	0.24	3.65		.ALPHA.-CALACORENE
34	31.215	31.175	31.330	82773	0.09	25691	0.11	3.22		Germacrene B (CAS) 1,5-Cyclodecadiene,
35	32.063	31.985	32.120	2047695	2.30	550005	2.39	3.72		1H-Cycloprop[e]azulen-7-ol, decahydro-1,1
36	32.180	32.120	32.250	1716111	1.92	449352	1.95	3.82	V	(-)-Caryophyllene oxide
37	32.300	32.250	32.380	388003	0.44	97913	0.42	3.96	V	GLOBULOL
38	32.879	32.775	32.930	289569	0.32	51195	0.22	5.66		Guaiol
39	32.988	32.930	33.070	407743	0.46	108167	0.47	3.77	V	1H-Cycloprop[e]azulen-4-ol, decahydro-1,1
40	33.182	33.070	33.300	1126138	1.26	278828	1.21	4.04	V	HUMULENE OXIDE
41	33.965	33.885	34.030	657053	0.74	169706	0.74	3.87		
42	34.069	34.030	34.240	732975	0.82	133373	0.58	5.50	V	Dillapiole
43	34.455	34.350	34.615	1121227	1.26	144622	0.63	7.75		.tau.-Cadinol
44	34.680	34.625	34.745	225850	0.25	65554	0.28	3.45		Torreyol
45	34.971	34.925	35.065	138447	0.16	41603	0.18	3.33		.alpha.-Cadinol
46	36.244	36.180	36.340	560060	0.63	112579	0.49	4.97		1,3-Benzodioxole, 4,7-dimethoxy-5-(2-pro
				89174441	100.00	23053000	100.00			

Spectrum

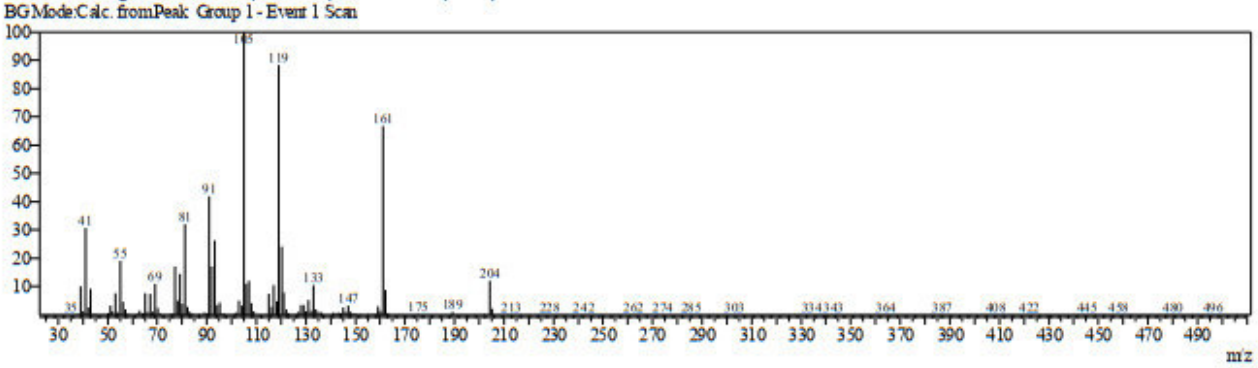
Line#:1 R.Time:5.270(Scan#:455)
MassPeaks:258
RawMode:Averaged 5.265-5.275(454-456) BasePeak:93(29186)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



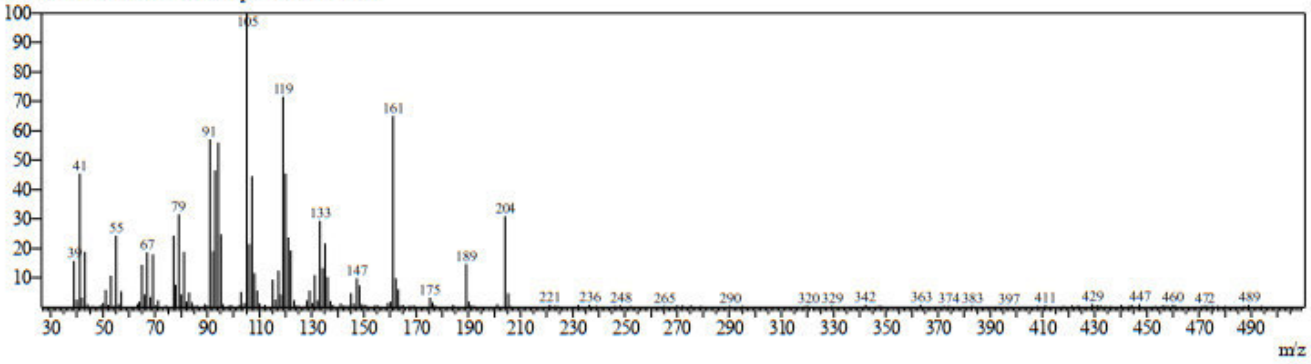
Line#:2 R.Time:6.655(Scan#:732)
MassPeaks:253
RawMode:Averaged 6.650-6.660(731-733) BasePeak:93(50454)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



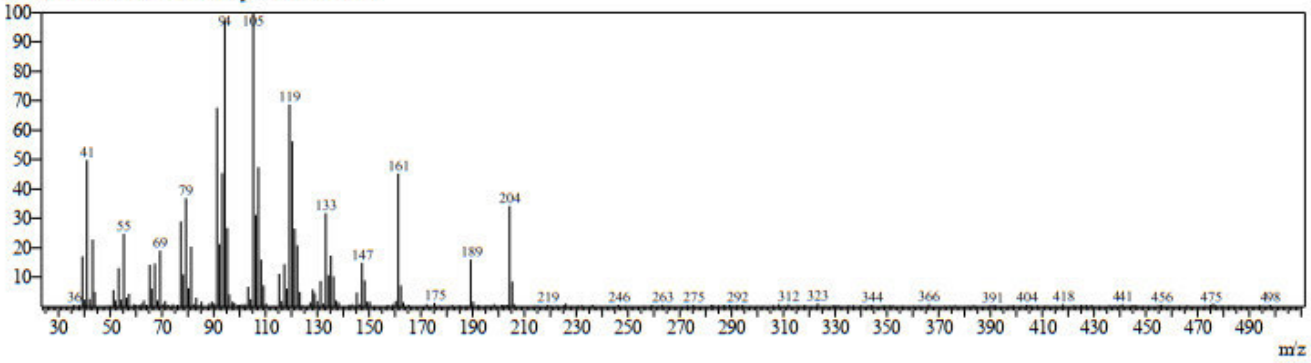
Line#:3 R.Time:22.845(Scan#:3970)
MassPeaks:288
RawMode:Averaged 22.840-22.850(3969-3971) BasePeak:105(68167)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



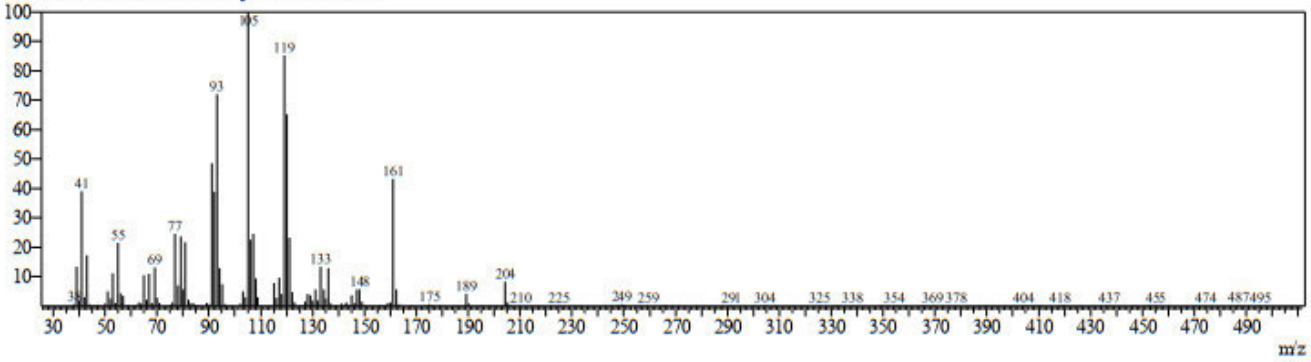
Line#:4 R.Time:23.400(Scan#:4081)
MassPeaks:286
RawMode:Averaged 23.395-23.405(4080-4082) BasePeak:105(4331)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



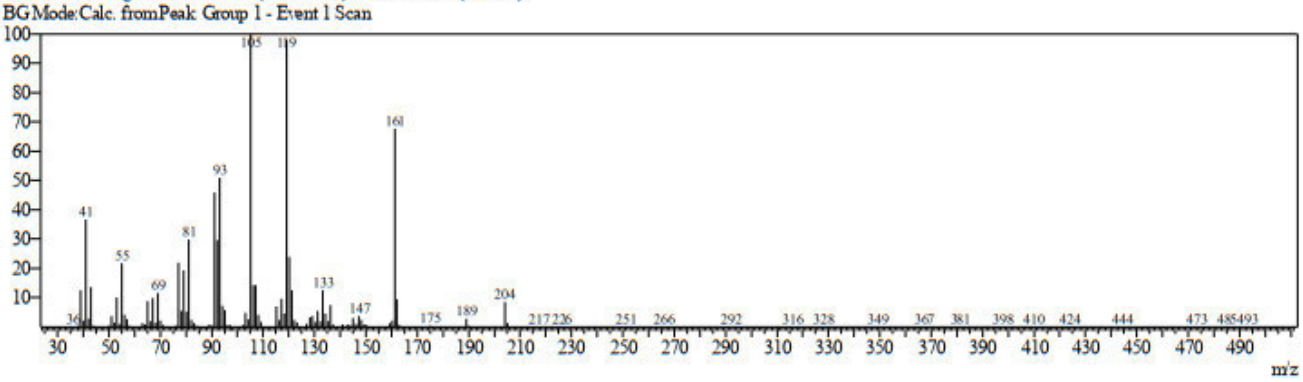
Line#:5 R.Time:23.510(Scan#:4103)
MassPeaks:277
RawMode:Averaged 23.505-23.515(4102-4104) BasePeak:105(4245)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



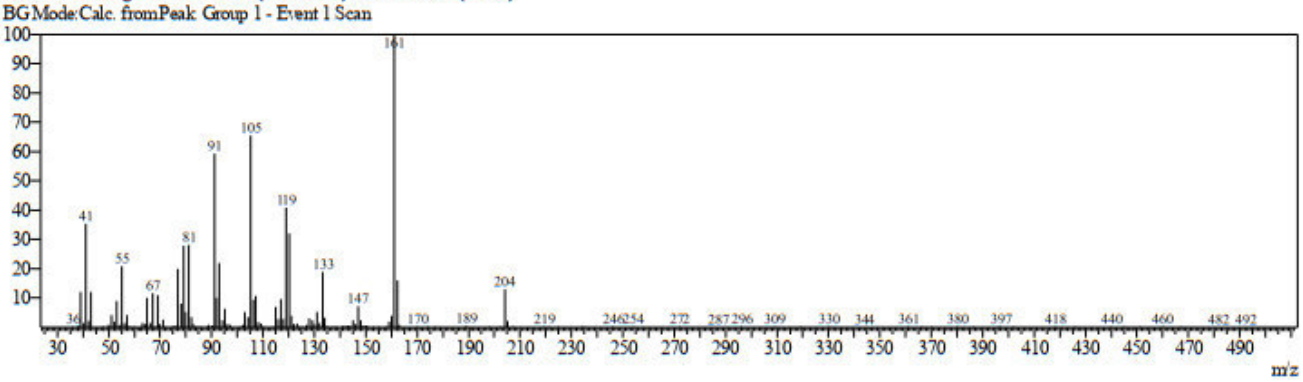
Line#:6 R.Time:23.730(Scan#:4147)
MassPeaks:319
RawMode:Averaged 23.725-23.735(4146-4148) BasePeak:105(13357)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



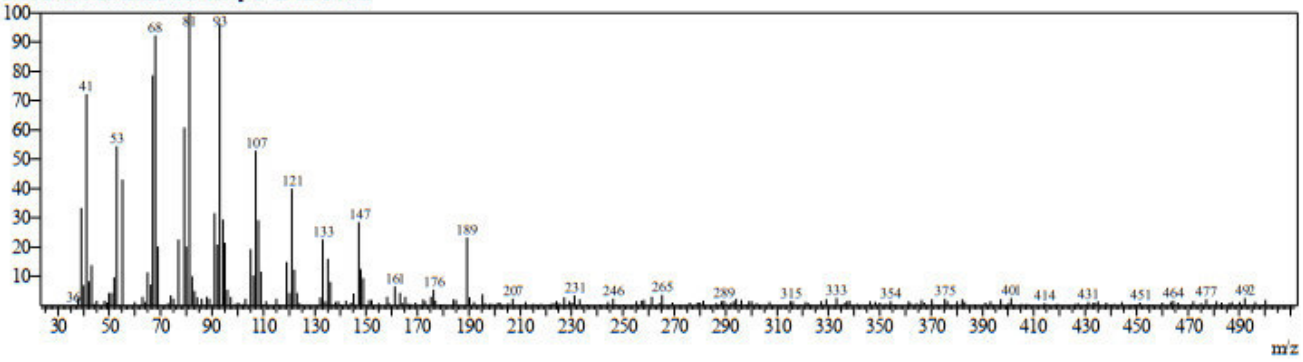
Line#:7 R.Time:23.920(Scan#:4185)
MassPeaks:348
RawMode:Averaged 23.915-23.925(4184-4186) BasePeak:105(106764)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



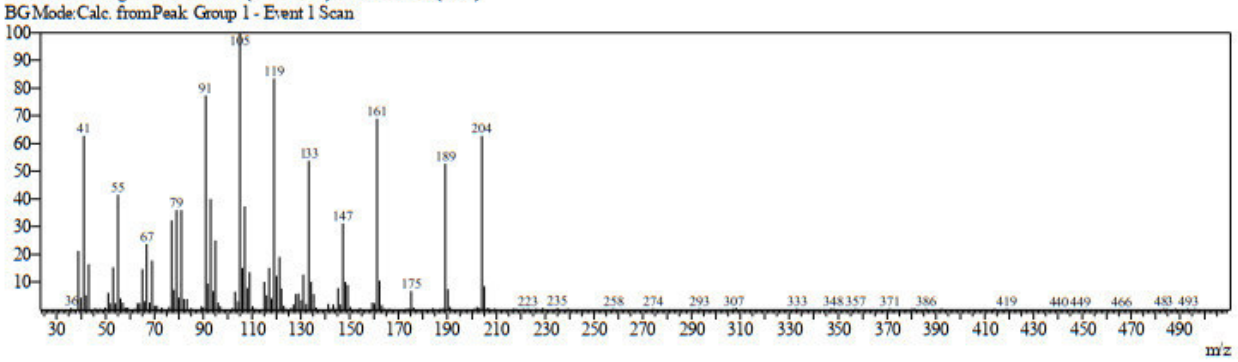
Line#:8 R.Time:24.560(Scan#:4313)
MassPeaks:313
RawMode:Averaged 24.555-24.565(4312-4314) BasePeak:161(25972)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



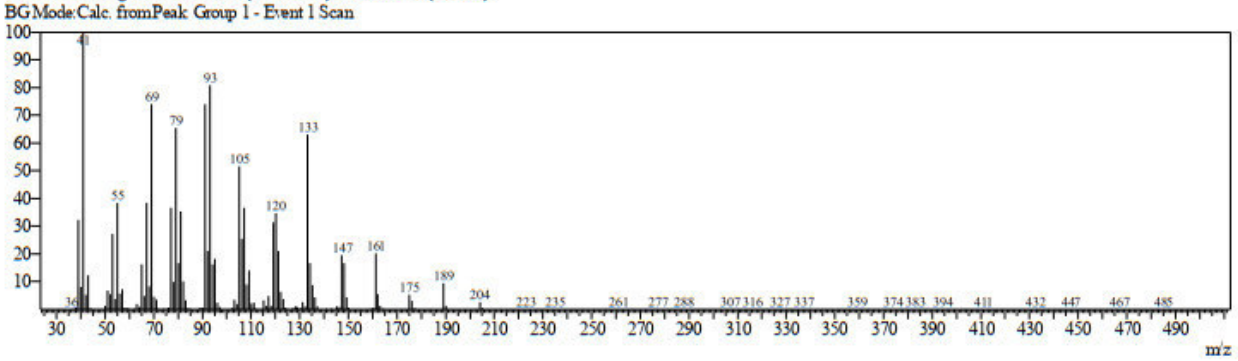
Line#:9 R.Time:24.670(Scan#:4335)
MassPeaks:268
RawMode:Averaged 24.665-24.675(4334-4336) BasePeak:81(1466)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



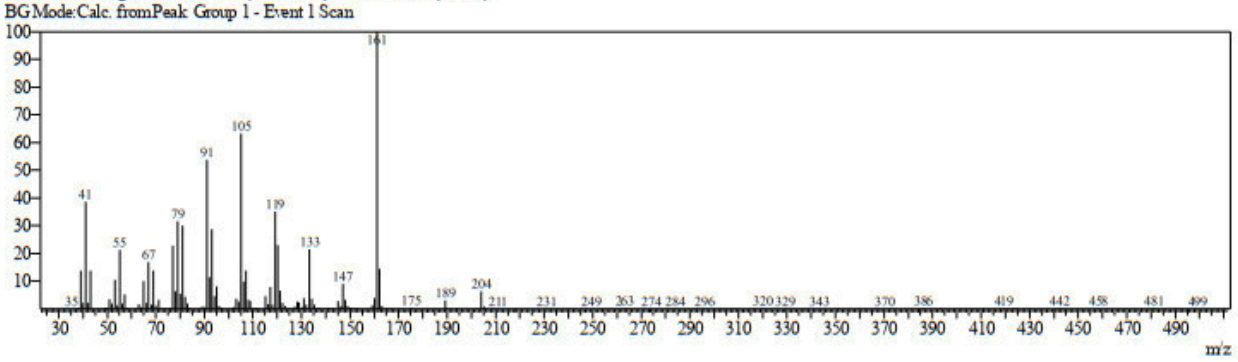
Line#:10 R.Time:25.335(Scan#:4468)
MassPeaks:276
RawMode:Averaged 25.330-25.340(4467-4469) BasePeak:105(6927)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



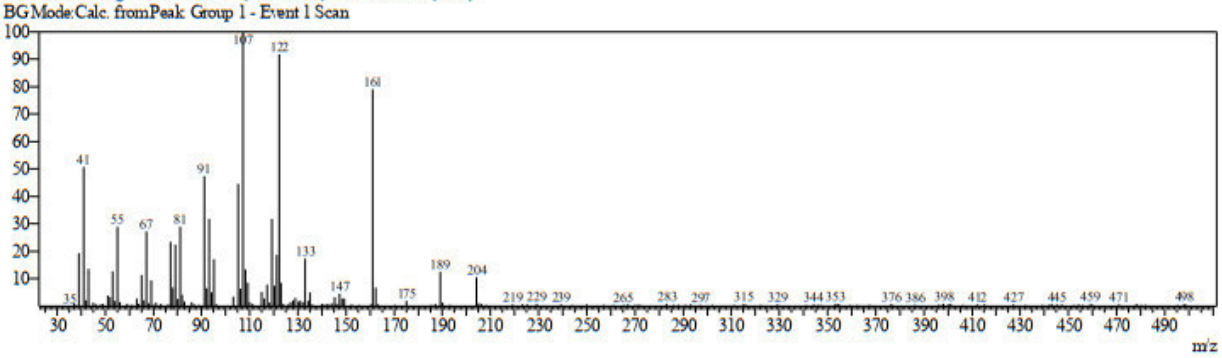
Line#:11 R.Time:25.705(Scan#:4542)
MassPeaks:323
RawMode:Averaged 25.700-25.710(4541-4543) BasePeak:41(202092)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



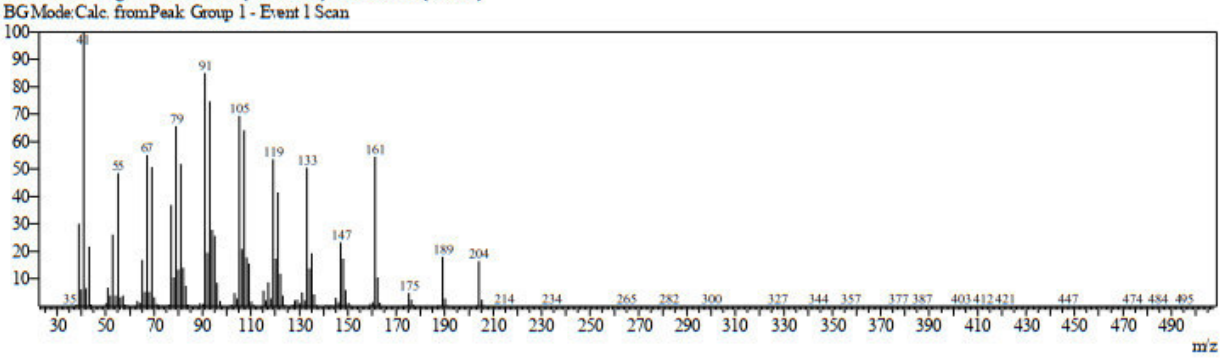
Line#:12 R.Time:26.120(Scan#:4625)
MassPeaks:301
RawMode:Averaged 26.115-26.125(4624-4626) BasePeak:161(27345)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



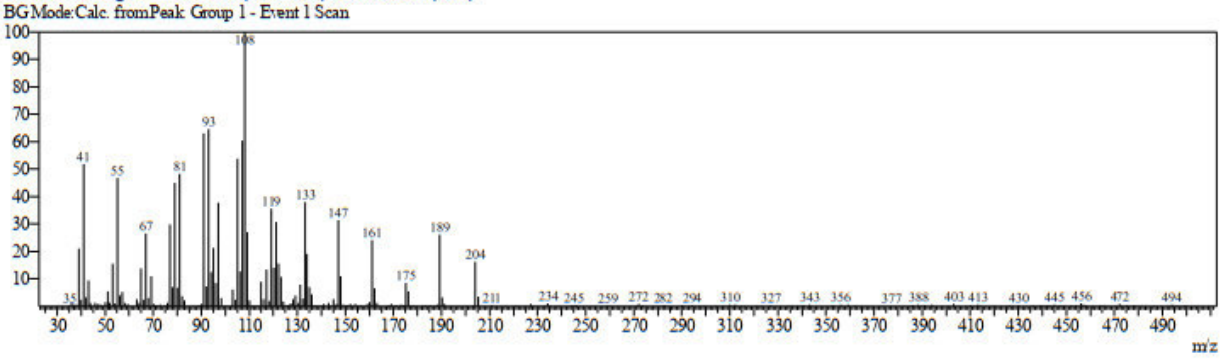
Line#:13 R.Time:26.320(Scan#:4665)
MassPeaks:269
RawMode:Averaged 26.315-26.325(4664-4666) BasePeak:107(4663)
BG Mode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



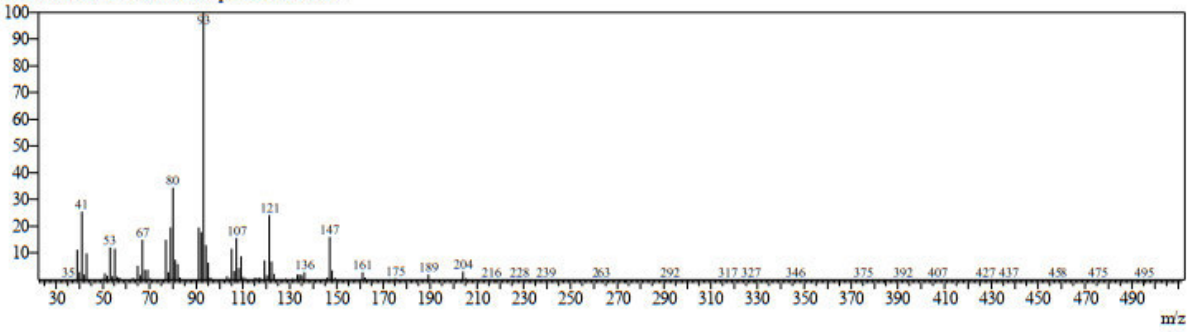
Line#:14 R.Time:26.520(Scan#:4705)
MassPeaks:282
RawMode:Averaged 26.515-26.525(4704-4706) BasePeak:41(120134)
BG Mode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



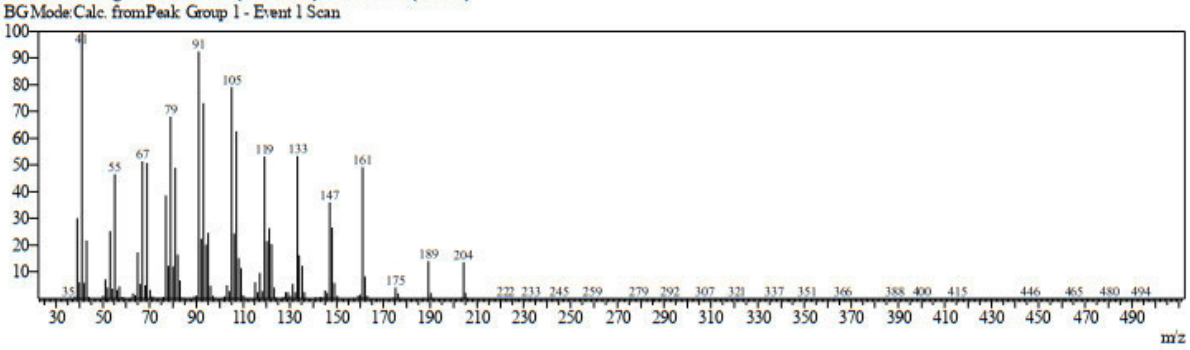
Line#:15 R.Time:26.715(Scan#:4744)
MassPeaks:252
RawMode:Averaged 26.710-26.720(4743-4745) BasePeak:108(4927)
BG Mode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



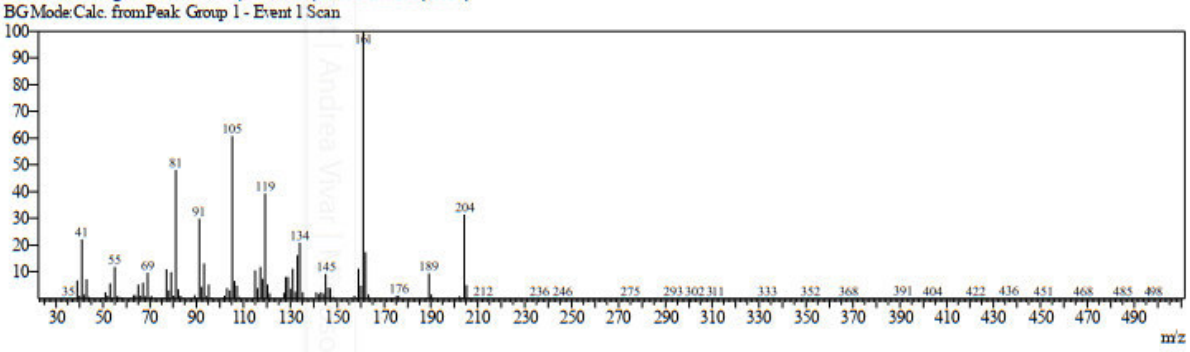
Line#:16 R.Time:27.120(Scan#:4825)
MassPeaks:321
RawMode:Averaged 27.115-27.125(4824-4826) BasePeak:93(523643)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



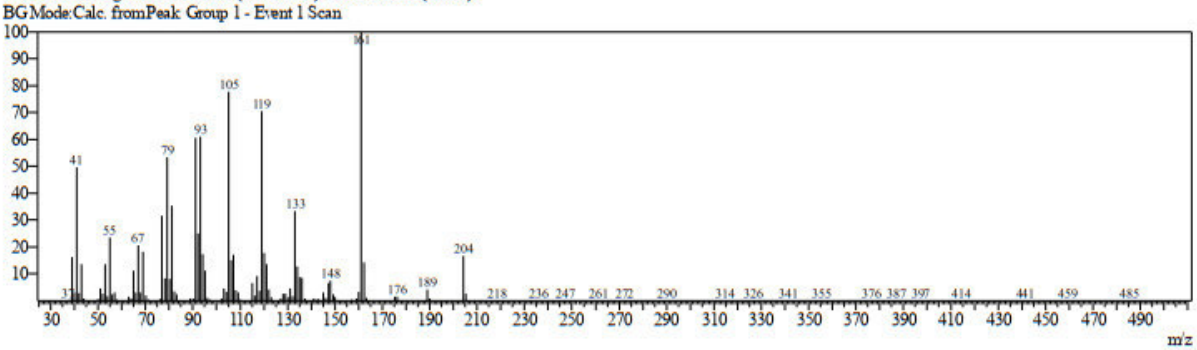
Line#:17 R.Time:27.425(Scan#:4886)
MassPeaks:312
RawMode:Averaged 27.420-27.430(4885-4887) BasePeak:41(160668)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



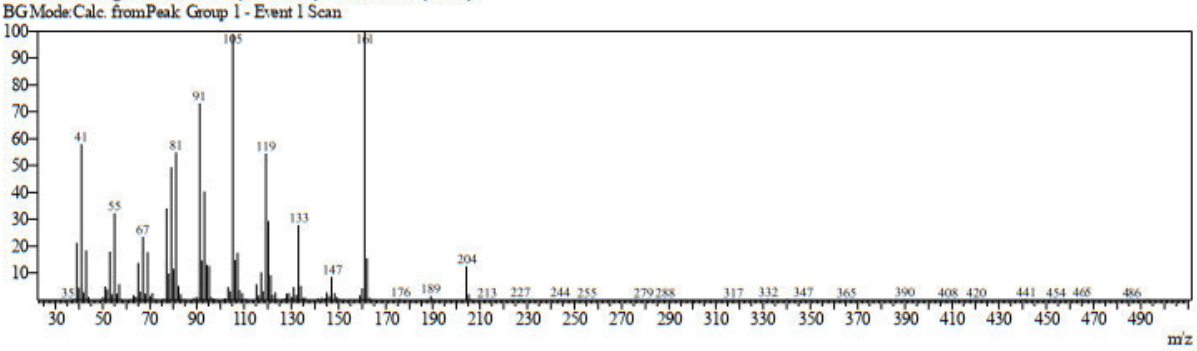
Line#:18 R.Time:27.995(Scan#:5000)
MassPeaks:270
RawMode:Averaged 27.990-28.000(4999-5001) BasePeak:161(36339)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



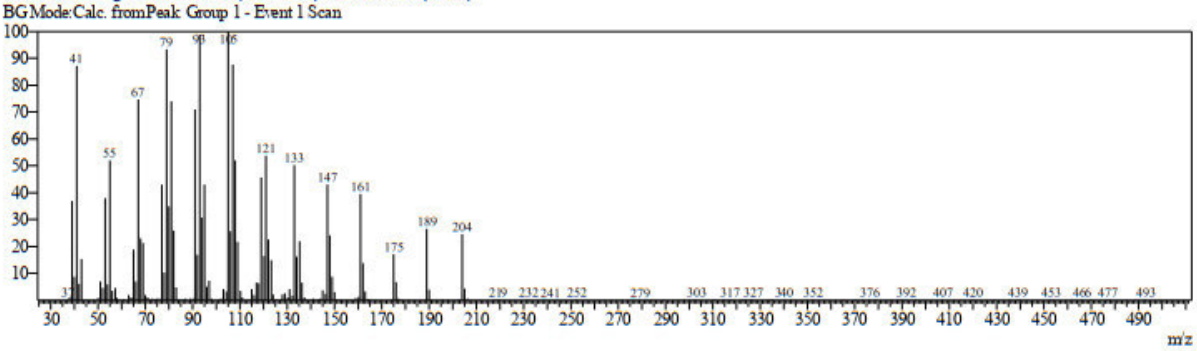
Line#:19 R.Time:28.130(Scan#:5027)
MassPeaks:328
RawMode:Averaged 28.125-28.135(5026-5028) BasePeak:161(92995)
BGMode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



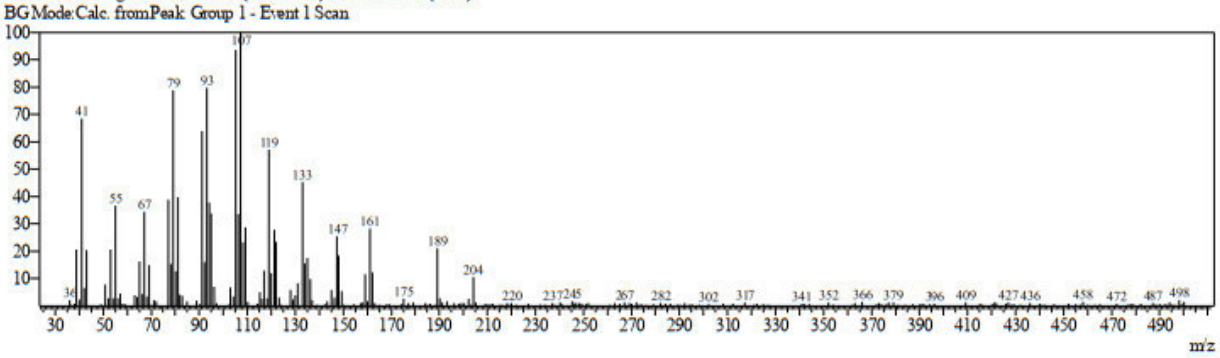
Line#:20 R.Time:28.245(Scan#:5050)
MassPeaks:286
RawMode:Averaged 28.240-28.250(5049-5051) BasePeak:161(31227)
BGMode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



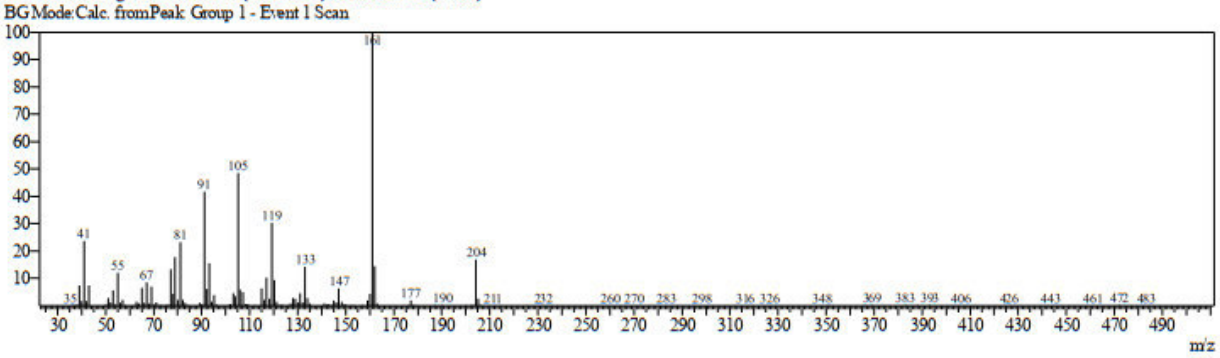
Line#:21 R.Time:28.430(Scan#:5087)
MassPeaks:316
RawMode:Averaged 28.425-28.435(5086-5088) BasePeak:105(17965)
BGMode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



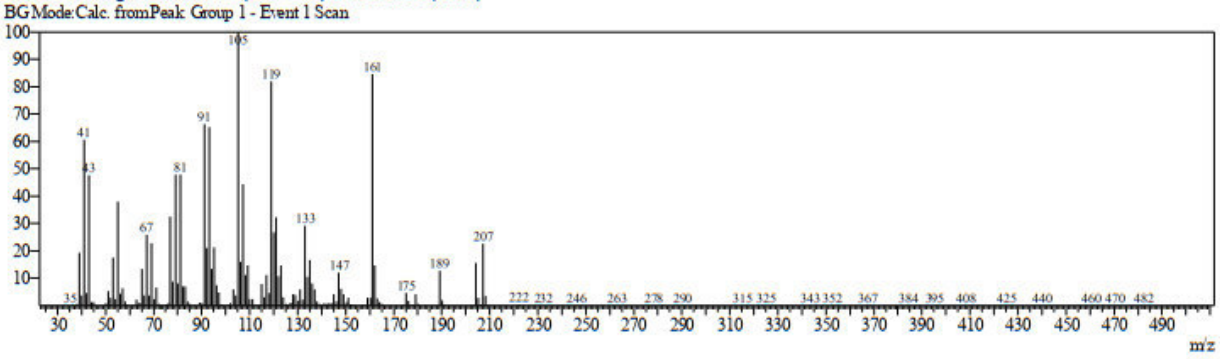
Line#:22 R.Time:28.550(Scan#:5111)
MassPeaks:301
RawMode:Averaged 28.545-28.555(5110-5112) BasePeak:107(2764)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



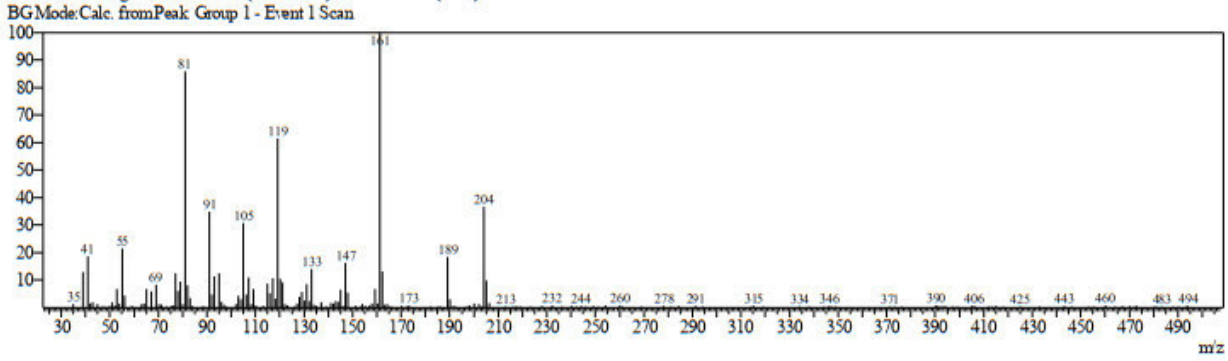
Line#:23 R.Time:28.660(Scan#:5133)
MassPeaks:310
RawMode:Averaged 28.655-28.665(5132-5134) BasePeak:161(34061)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



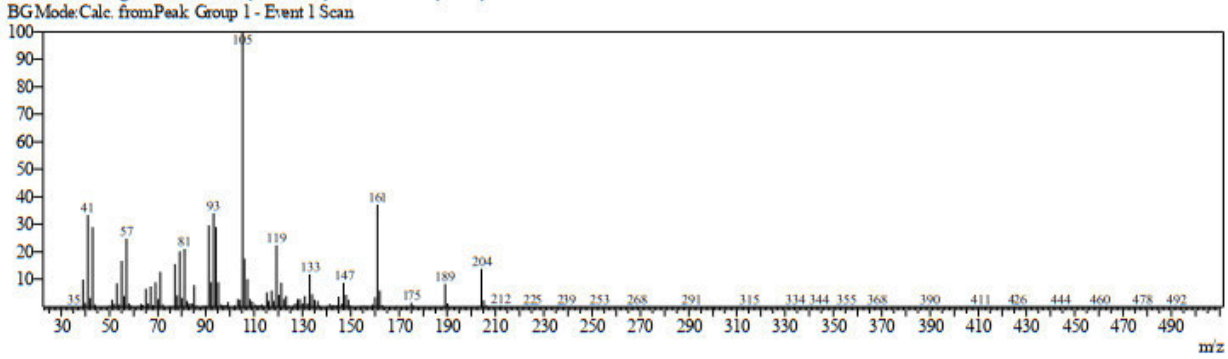
Line#:24 R.Time:28.855(Scan#:5172)
MassPeaks:308
RawMode:Averaged 28.850-28.860(5171-5173) BasePeak:105(81321)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



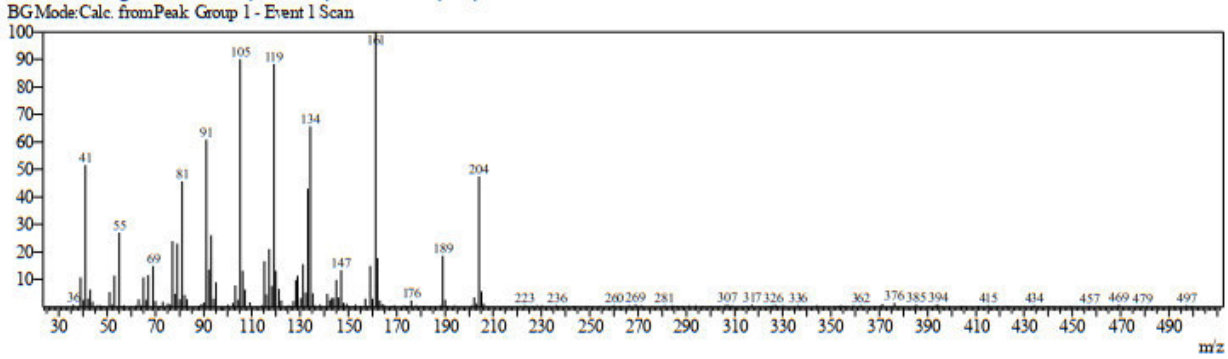
Line#:25 R.Time:29.025(Scan#:5206)
MassPeaks:277
RawMode:Averaged 29.020-29.030(5205-5207) BasePeak:161(5430)
BGMode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



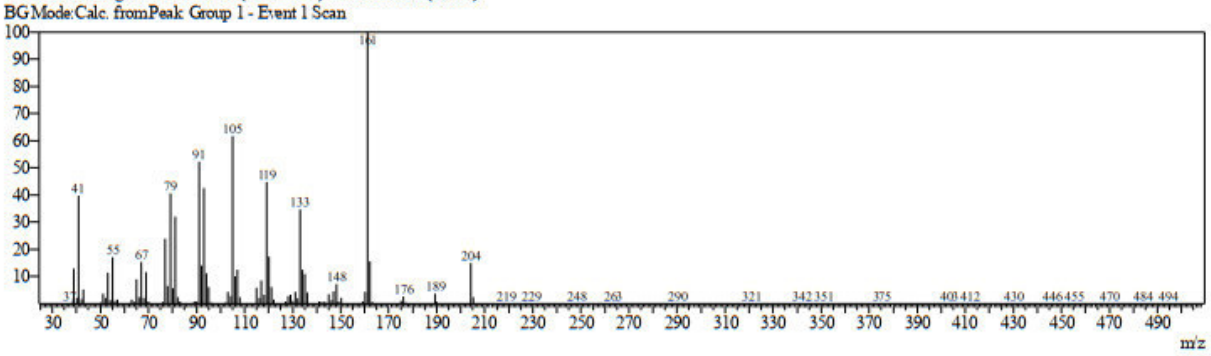
Line#:26 R.Time:29.115(Scan#:5224)
MassPeaks:307
RawMode:Averaged 29.110-29.120(5223-5225) BasePeak:105(60211)
BGMode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



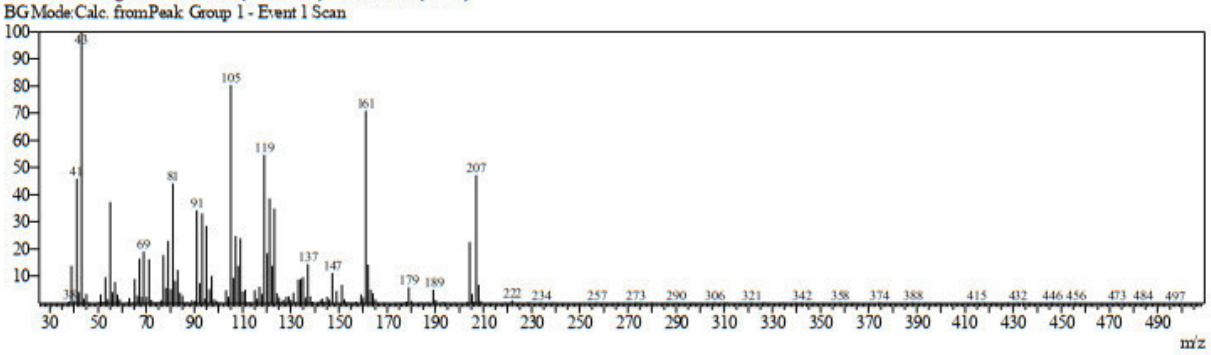
Line#:27 R.Time:29.370(Scan#:5275)
MassPeaks:282
RawMode:Averaged 29.365-29.375(5274-5276) BasePeak:161(4819)
BGMode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



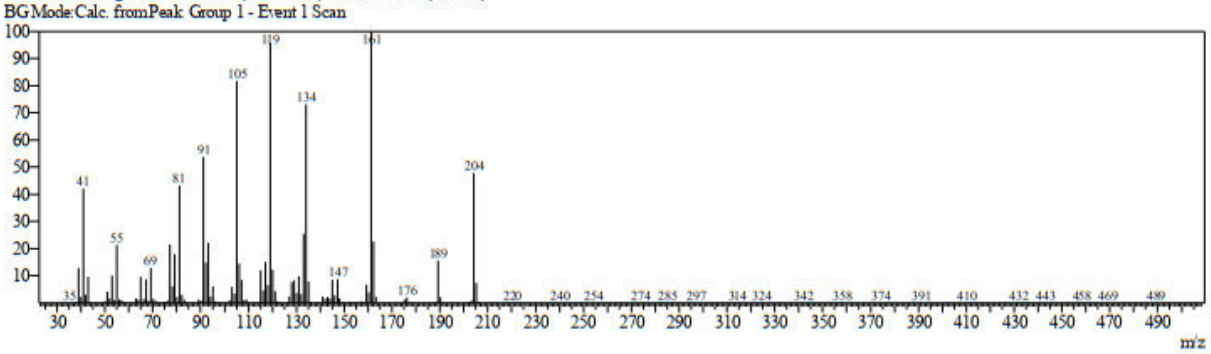
Line#:28 R.Time:29.605(Scan#:5322)
MassPeaks:287
RawMode:Averaged 29.600-29.610(5321-5323) BasePeak:161(96017)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



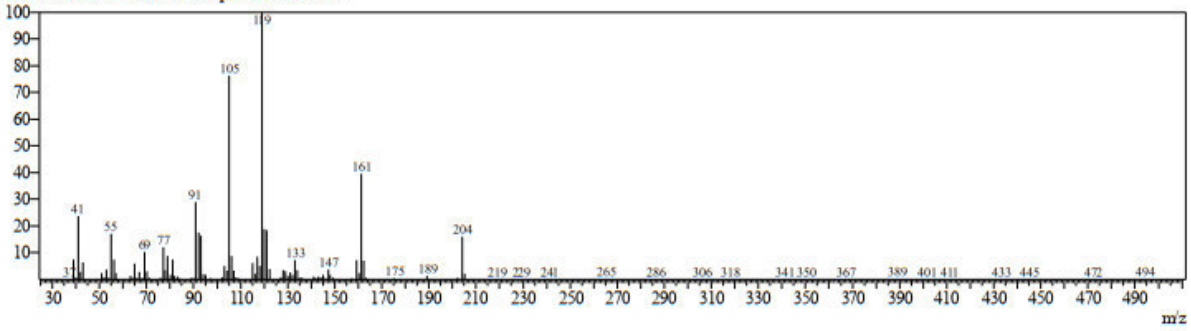
Line#:29 R.Time:29.675(Scan#:5336)
MassPeaks:316
RawMode:Averaged 29.670-29.680(5335-5337) BasePeak:43(24410)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



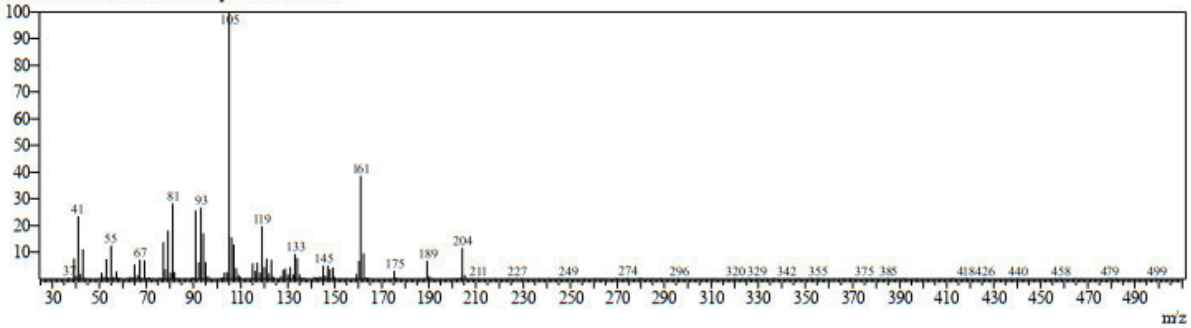
Line#:30 R.Time:30.040(Scan#:5409)
MassPeaks:336
RawMode:Averaged 30.035-30.045(5408-5410) BasePeak:161(241314)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



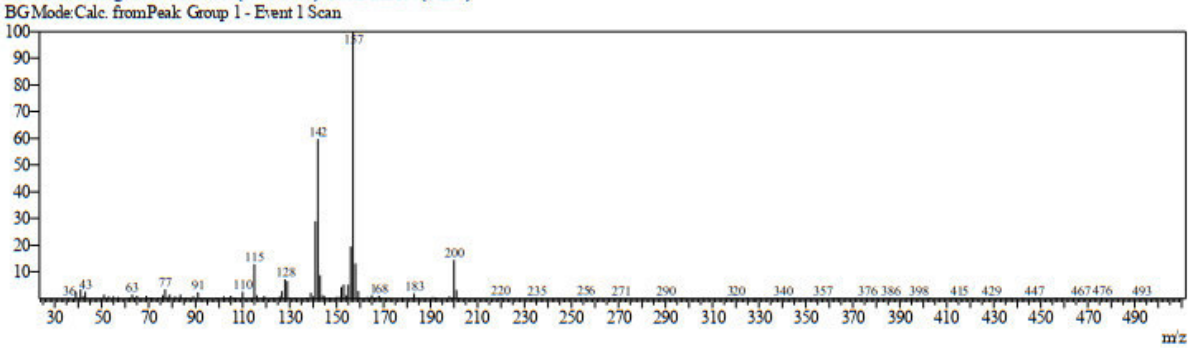
Line#:31 R.Time:30.325(Scan#:5466)
MassPeaks:278
RawMode:Averaged 30.320-30.330(5465-5467) BasePeak:119(38019)
BGMode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



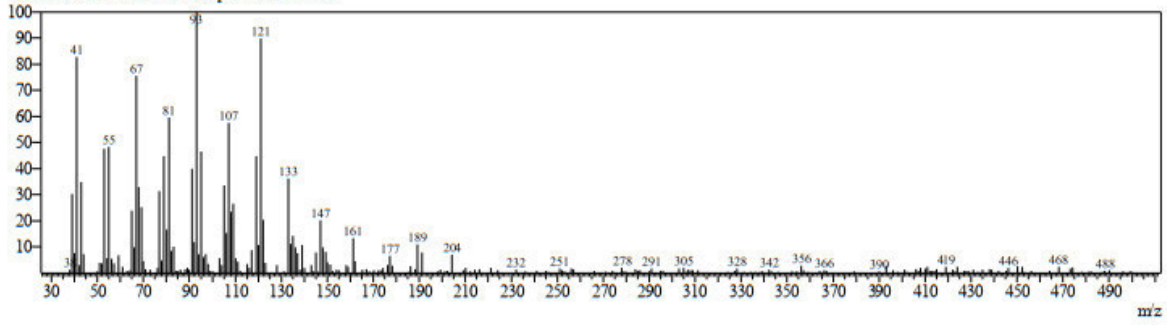
Line#:32 R.Time:30.535(Scan#:5508)
MassPeaks:275
RawMode:Averaged 30.530-30.540(5507-5509) BasePeak:105(15214)
BGMode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



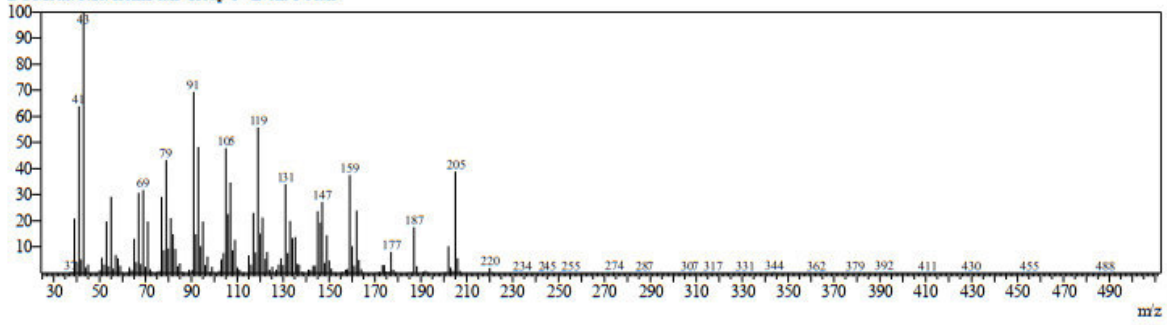
Line#:33 R.Time:30.755(Scan#:5552)
MassPeaks:314
RawMode:Averaged 30.750-30.760(5551-5553) BasePeak:157(14257)
BGMode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



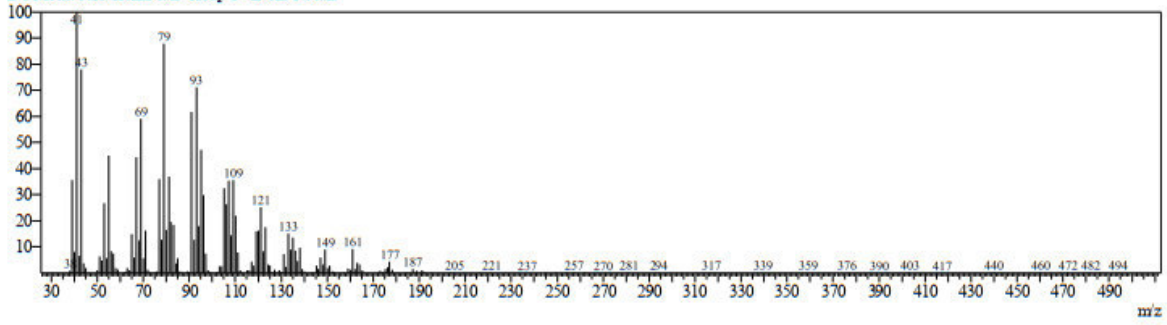
Line#:34 R.Time:31.215(Scan#:5644)
MassPeaks:250
RawMode:Averaged 31.210-31.220(5643-5645) BasePeak:93(1803)
BGMode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



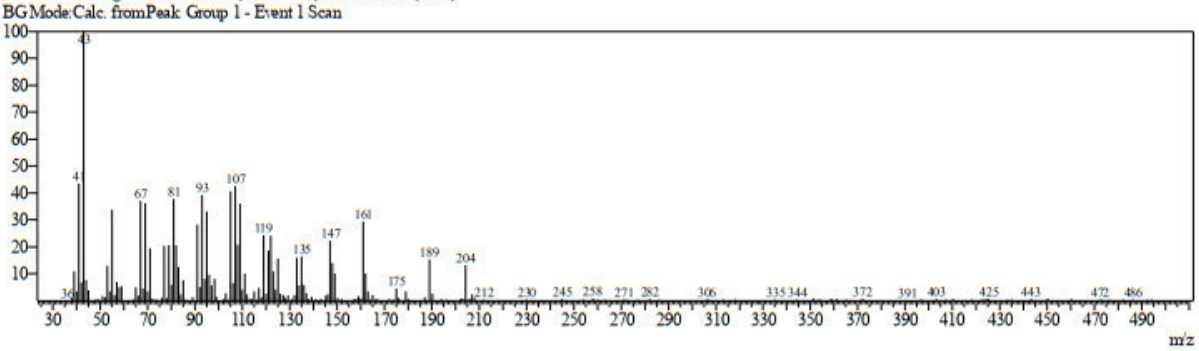
Line#:35 R.Time:32.065(Scan#:5814)
MassPeaks:302
RawMode:Averaged 32.060-32.070(5813-5815) BasePeak:43(34633)
BGMode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



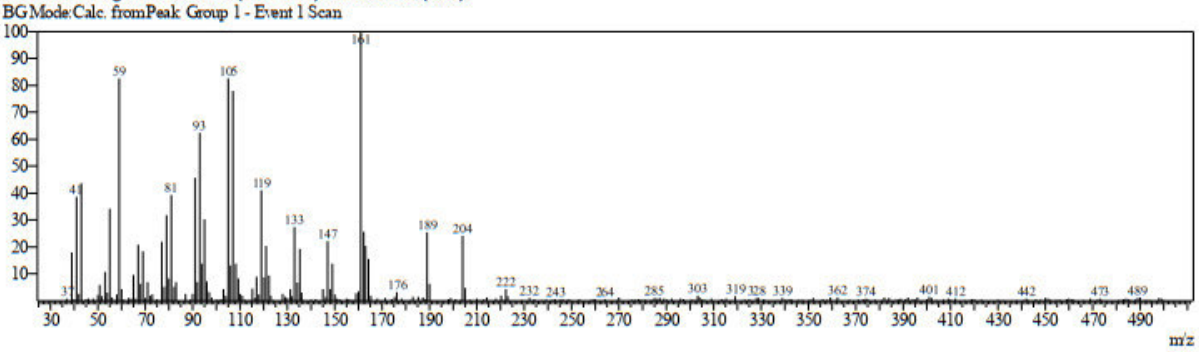
Line#:36 R.Time:32.180(Scan#:5837)
MassPeaks:307
RawMode:Averaged 32.175-32.185(5836-5838) BasePeak:41(26693)
BGMode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



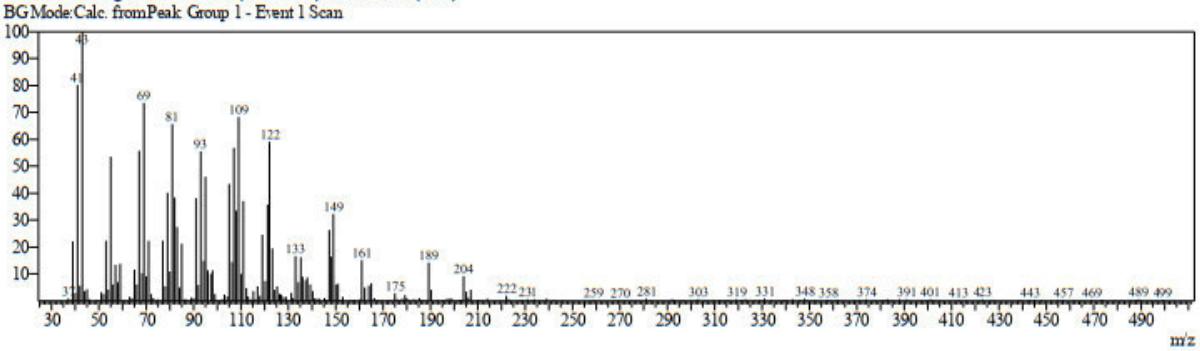
Line#:37 R.Time:32.300(Scan#:5861)
MassPeaks:314
RawMode:Averaged 32.295-32.305(5860-5862) BasePeak:43(6527)
BG Mode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



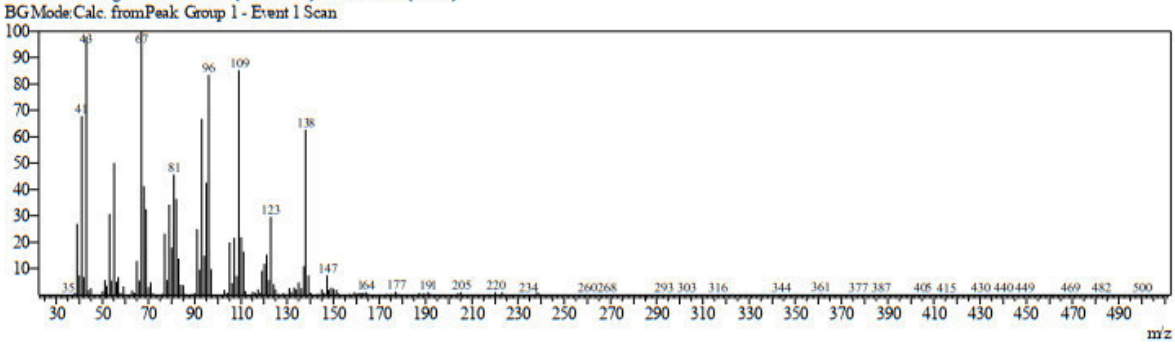
Line#:38 R.Time:32.880(Scan#:5977)
MassPeaks:292
RawMode:Averaged 32.875-32.885(5976-5978) BasePeak:161(3063)
BG Mode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



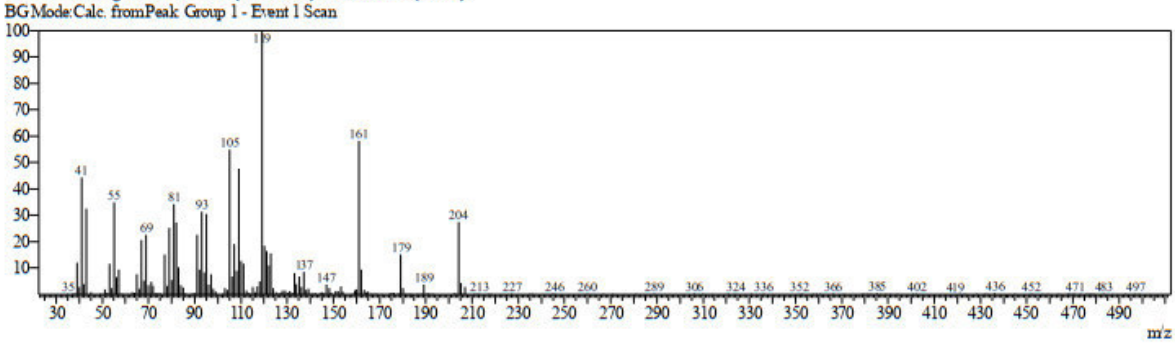
Line#:39 R.Time:32.990(Scan#:5999)
MassPeaks:299
RawMode:Averaged 32.985-32.995(5998-6000) BasePeak:43(5737)
BG Mode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



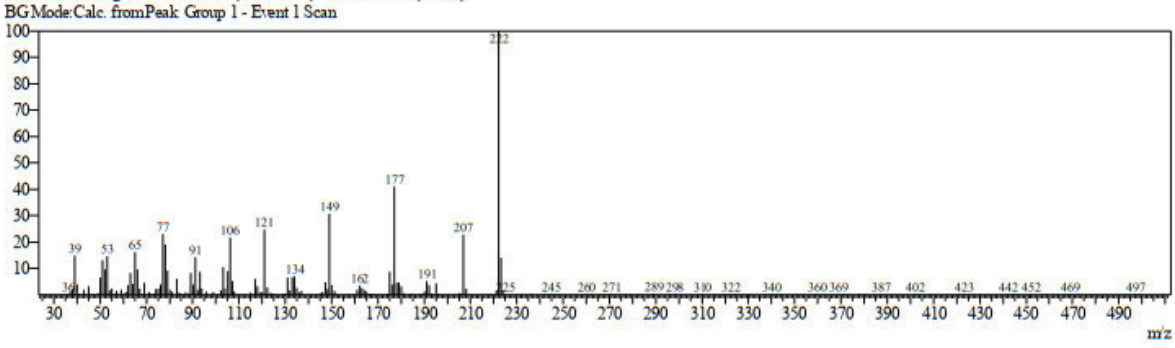
Line#:40 R.Time:33.180(Scan#:6037)
MassPeaks:344
RawMode:Averaged 33.175-33.185(6036-6038) BasePeak:67(19557)
BG Mode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



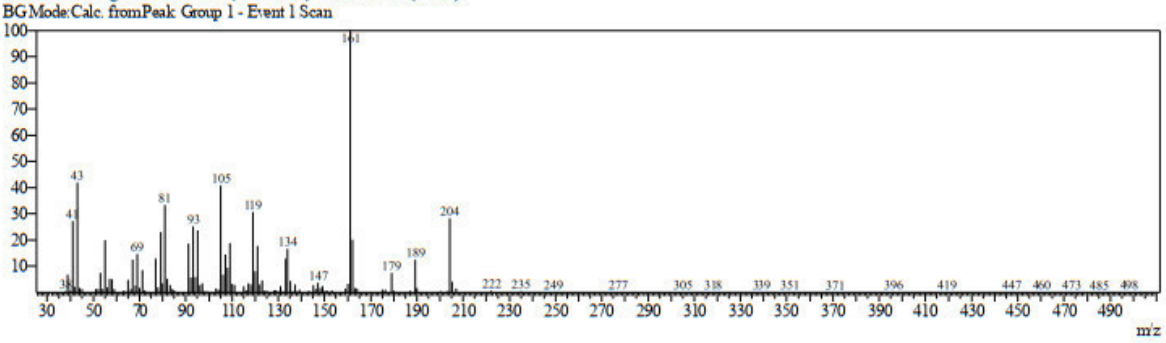
Line#:41 R.Time:33.965(Scan#:6194)
MassPeaks:304
RawMode:Averaged 33.960-33.970(6193-6195) BasePeak:119(14920)
BG Mode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



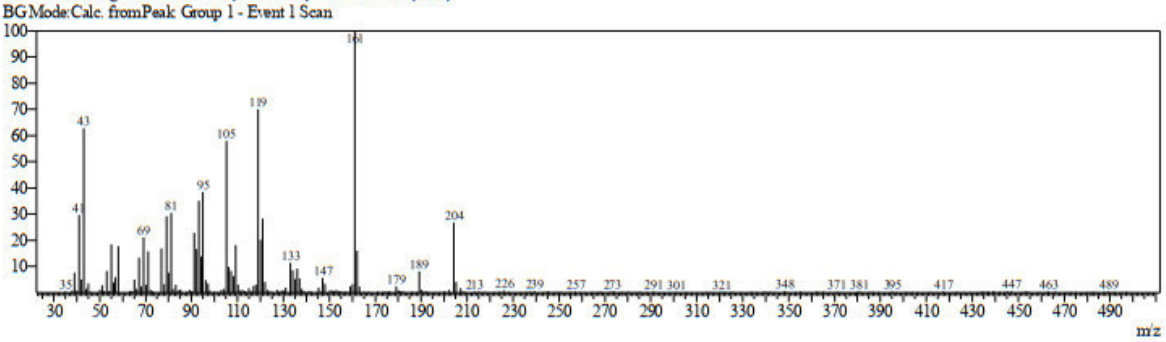
Line#:42 R.Time:34.070(Scan#:6215)
MassPeaks:269
RawMode:Averaged 34.065-34.075(6214-6216) BasePeak:222(17488)
BG Mode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



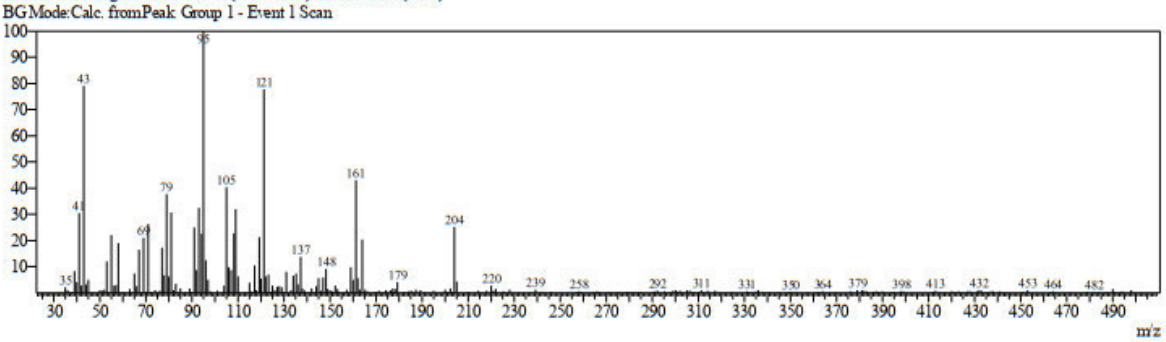
Line#:43 R.Time:34.455(Scan#:6292)
MassPeaks:269
RawMode:Averaged 34.450-34.460(6291-6293) BasePeak:161(18635)
BG Mode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



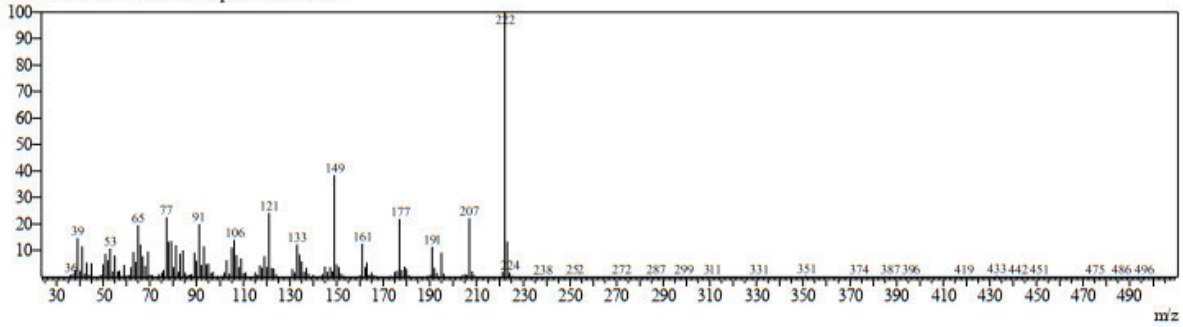
Line#:44 R.Time:34.680(Scan#:6337)
MassPeaks:310
RawMode:Averaged 34.675-34.685(6336-6338) BasePeak:161(6741)
BG Mode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



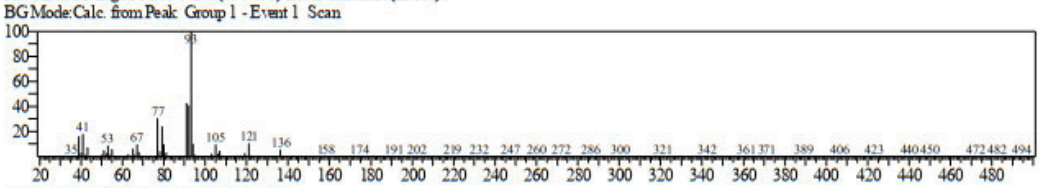
Line#:45 R.Time:34.970(Scan#:6395)
MassPeaks:285
RawMode:Averaged 34.965-34.975(6394-6396) BasePeak:95(3670)
BG Mode:Calc. fromPeak Group 1 - Event 1 Scan



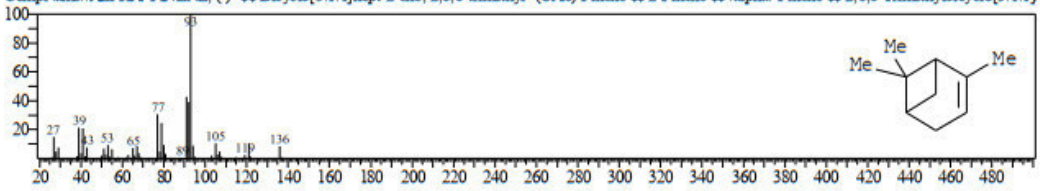
Line#:46 R.Time:36.245(Scan#:6650)
MassPeaks:315
RawMode:Averaged 36.240-36.250(6649-6651) BasePeak:222(13729)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



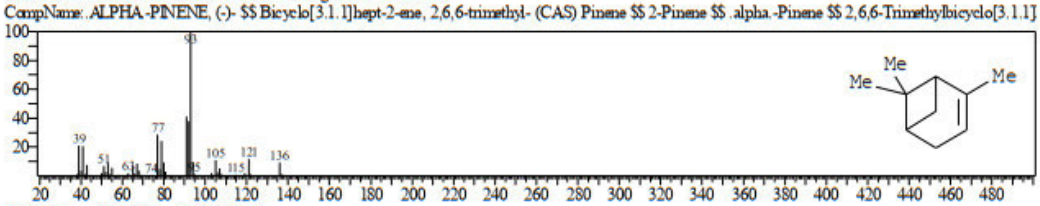
Library
<< Target >>
Line#:1 R.Time:5.270(Scan#:455) MassPeaks:258
RawMode:Averaged 5.265-5.275(454-456) BasePeak:93.10(29186)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



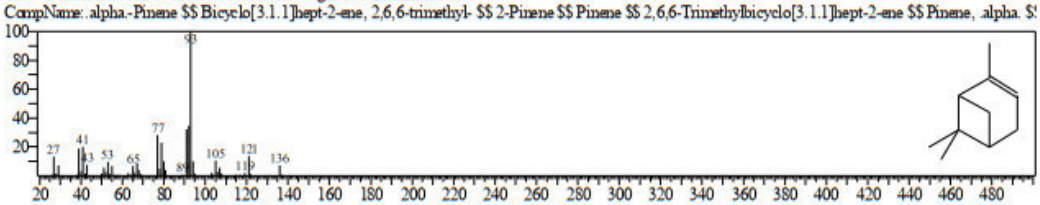
Hit#:1 Entry:26444 Library:WILEY7.LIB
SI:98 Formula:C10 H16 CAS:80-56-8 MolWeight:136 RetIndex:0
CompName: .ALPHA.-PINENE, (-)- $$ Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6,6-trimethyl- (CAS) Pinene $$ 2-Pinene $$ .alpha.-Pinene $$ 2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]



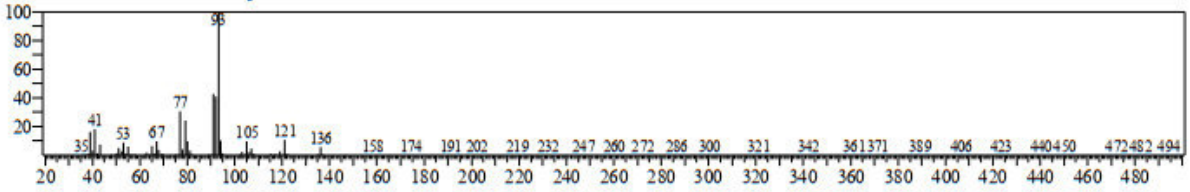
Hit#:2 Entry:26447 Library:WILEY7.LIB
SI:98 Formula:C10 H16 CAS:80-56-8 MolWeight:136 RetIndex:0
CompName: .ALPHA.-PINENE, (-)- $$ Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6,6-trimethyl- (CAS) Pinene $$ 2-Pinene $$ .alpha.-Pinene $$ 2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]



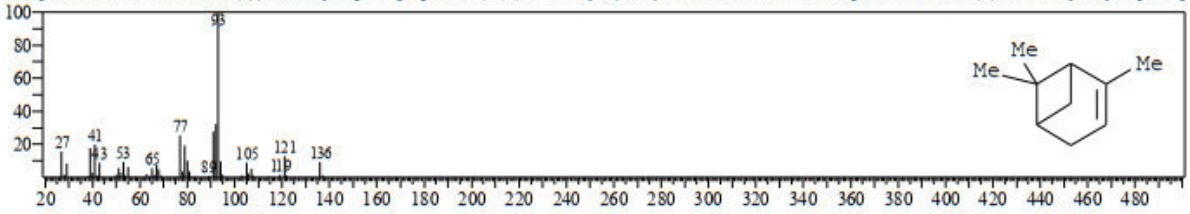
Hit#:3 Entry:9787 Library:NIST08.LIB
SI:97 Formula:C10H16 CAS:80-56-8 MolWeight:136 RetIndex:948
CompName: .alpha.-Pinene $$ Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6,6-trimethyl- $$ 2-Pinene $$ Pinene $$ 2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]hept-2-ene $$ Pinene, .alpha. $



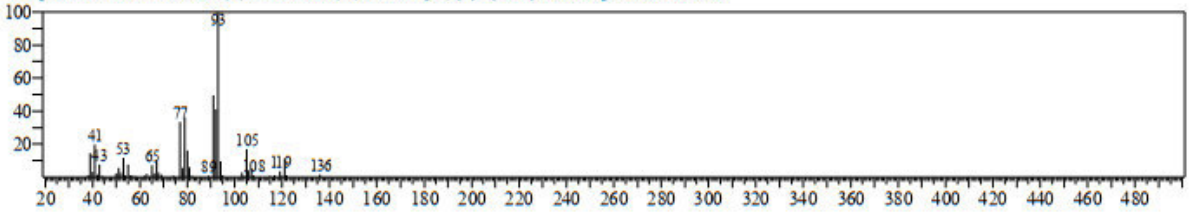
<< Target >>
Line#:1 R.Time:5.270(Scan#:455) MassPeaks:258
RawMode:Averaged 5.265-5.275(454-456) BasePeak:93.10(29186)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



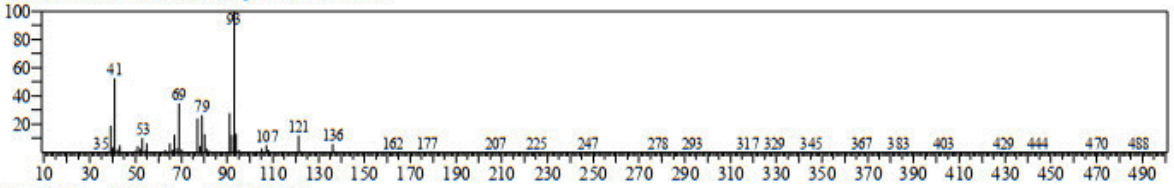
Hit#:4 Entry:26441 Library:WILEY7.LIB
SI:96 Formula:C10 H16 CAS:80-56-8 MolWeight:136 RetIndex:0
CompName:.ALPHA.-PINENE, (-)- $$ Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6,6-trimethyl- (CAS) Pinene $$ 2-Pinene $$ .alpha.-Pinene $$ 2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]



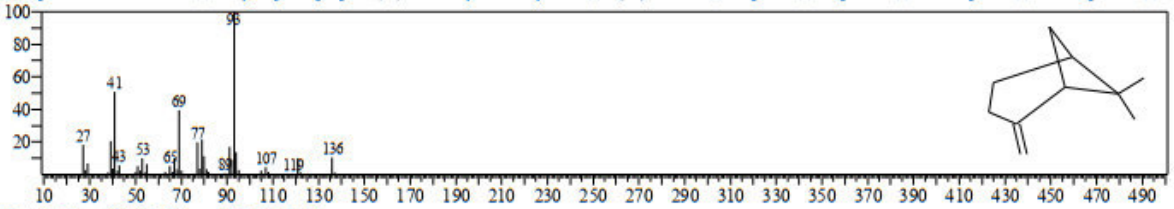
Hit#:5 Entry:26174 Library:WILEY7.LIB
SI:96 Formula:C10 H16 CAS:6874-10-8 MolWeight:136 RetIndex:0
CompName:cis-Ocimene $$ 1,3,7-Octatriene, 3,7-dimethyl-, (E)- (CAS) trans-.alpha.-Ocimene $$



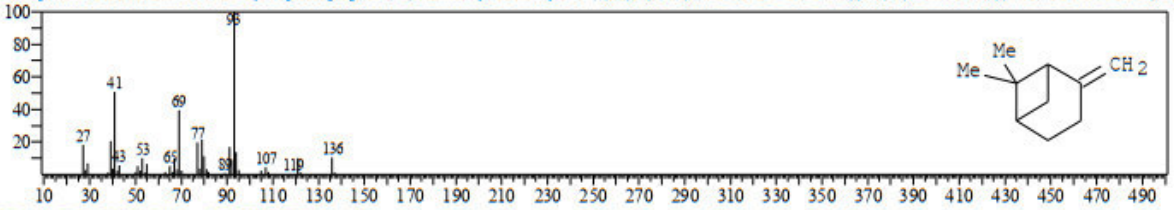
<< Target >>
Line#:2 R.Time:6.655(Scan#:732) MassPeaks:253
RawMode:Averaged 6.650-6.660(731-733) BasePeak:93.05(50454)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



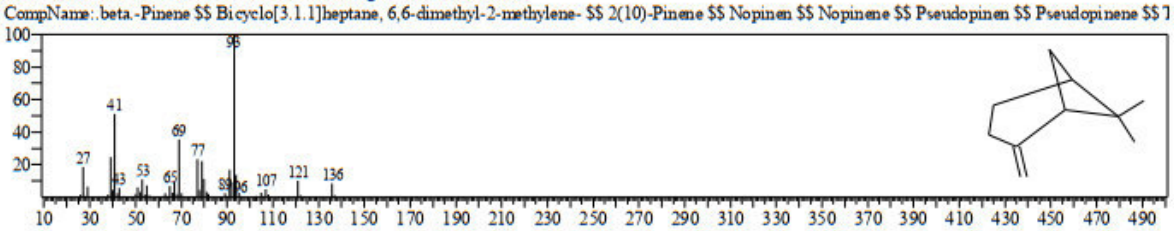
Hit#:1 Entry:6428 Library:NIST08s.LIB
SI:97 Formula:C10H16 CAS:127-91-3 MolWeight:136 RetIndex:943
CompName:.beta.-Pinene $$ Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene- $$ 2(10)-Pinene $$ Nopinen $$ Nopinene $$ Pseudopinen $$ Pseudopinene $$ T



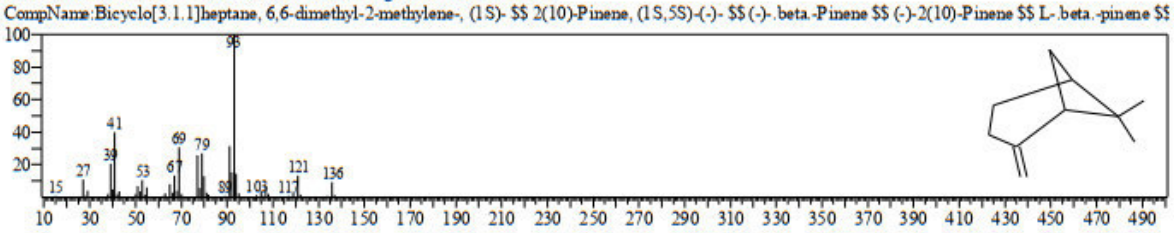
Hit#:2 Entry:26459 Library:WILEY7.LIB
SI:97 Formula:C10H16 CAS:18172-67-3 MolWeight:136 RetIndex:0
CompName:l-.beta.-Pinene $$ Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene-, (1S)- (CAS) .BETA.-PINENE $$ (-)-2(10)-Pinene $$ (-)-.beta.-Pinene $$ 2(10



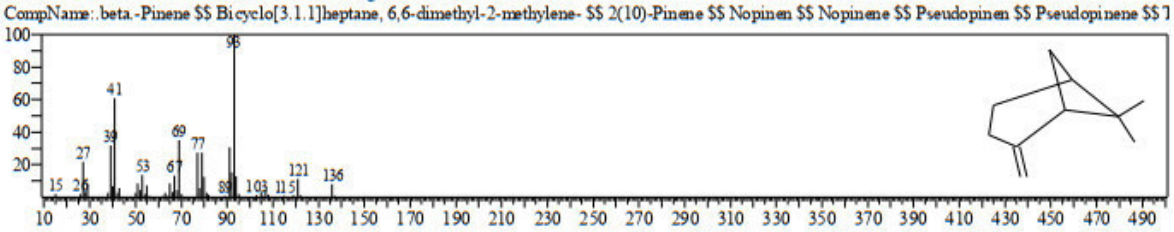
Hit#:3 Entry:6427 Library:NIST08s.LIB
SI:97 Formula:C10H16 CAS:127-91-3 MolWeight:136 RetIndex:943
CompName:.beta.-Pinene $$ Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene- $$ 2(10)-Pinene $$ Nopinen $$ Nopinene $$ Pseudopinen $$ Pseudopinene $$ T



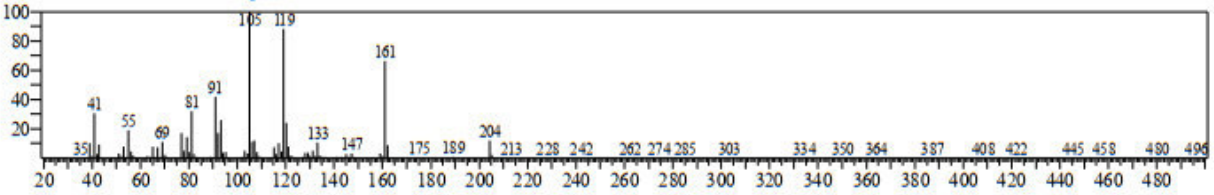
Hit#:4 Entry:6435 Library:NIST08s.LIB
SI:97 Formula:C10H16 CAS:18172-67-3 MolWeight:136 RetIndex:943
CompName:Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene-, (1S)- $$ 2(10)-Pinene, (1S,5S)-(-)- $$ (-)-.beta.-Pinene $$ (-)-2(10)-Pinene $$ L-.beta.-pinene $$



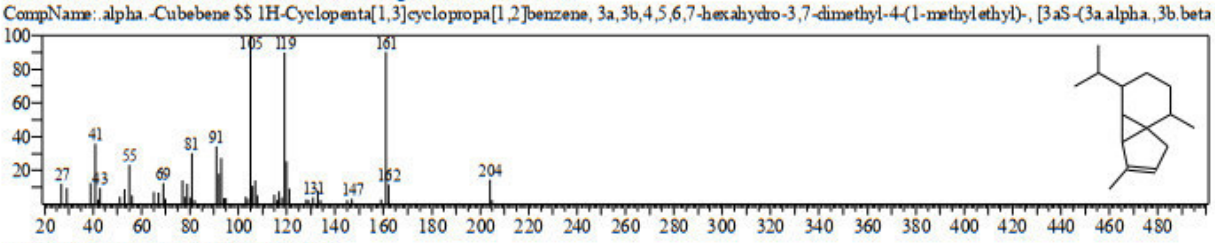
Hit#:5 Entry:9748 Library:NIST08.LIB
SI:96 Formula:C10H16 CAS:127-91-3 MolWeight:136 RetIndex:943
CompName:.beta.-Pinene $$ Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene- $$ 2(10)-Pinene $$ Nopinen $$ Nopinene $$ Pseudopinen $$ Pseudopinene $$ T



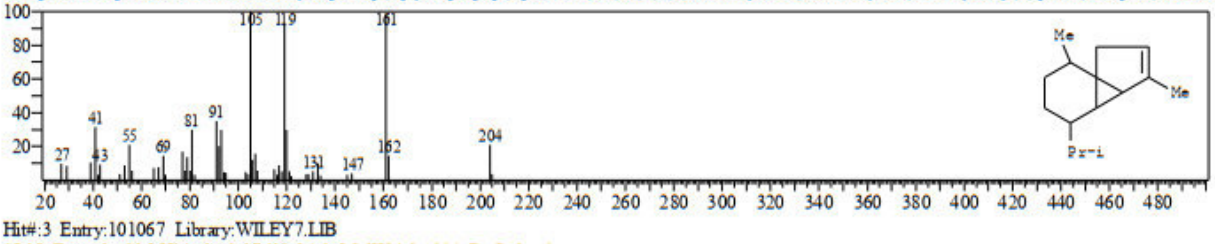
<< Target >>
Line#:3 R.Time:22.845(Scan#:3970) MassPeaks:288
RawMode:Averaged 22.840-22.850(3969-3971) BasePeak:105.10(68167)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



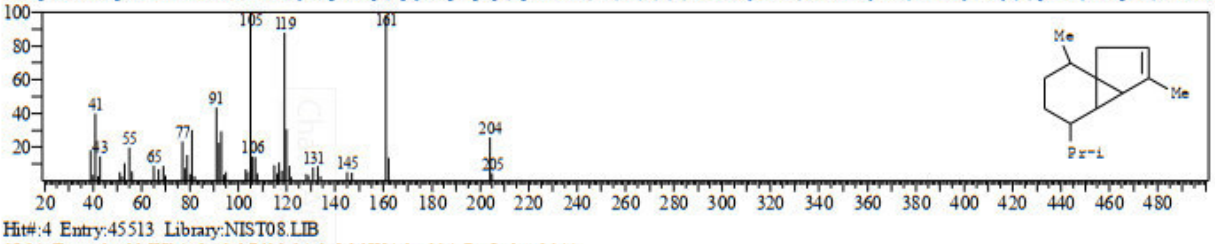
Hit#:1 Entry:17125 Library:NIST08s.LIB
SI:97 Formula:C15H24 CAS:17699-14-8 MolWeight:204 RetIndex:1344
CompName:.alpha.-Cubebene $$ 1H-Cyclopenta[1,3]cyclopropa[1,2]benzene, 3a,3b,4,5,6,7-hexahydro-3,7-dimethyl-4-(1-methylethyl)-, [3aS-(3a.alpha.,3b.beta



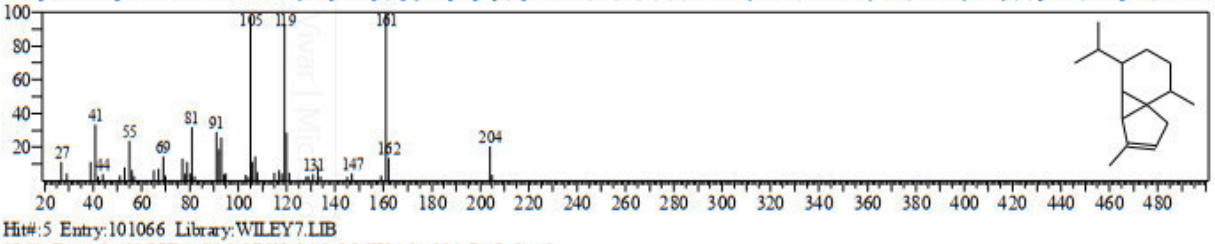
Hit#:2 Entry:101065 Library:WILEY7.LIB
SI:96 Formula:C15H24 CAS:17699-14-8 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Cubebene $$ 1H-Cyclopenta[1,3]cyclopropa[1,2]benzene, 3a,3b,4,5,6,7-hexahydro-3,7-dimethyl-4-(1-methylethyl)-, [3aS-(3a.alpha.,3b.beta



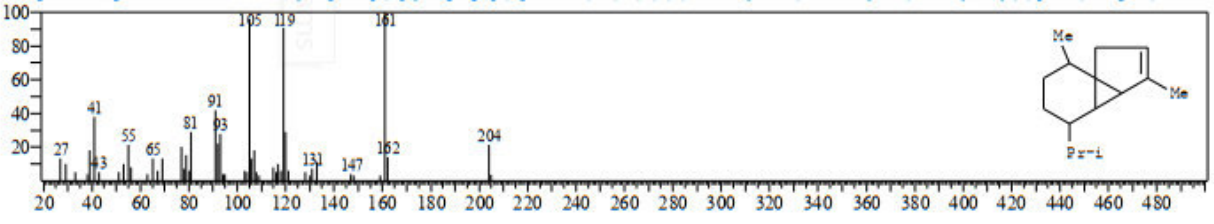
Hit#:3 Entry:101067 Library:WILEY7.LIB
SI:95 Formula:C15H24 CAS:17699-14-8 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Cubebene $$ 1H-Cyclopenta[1,3]cyclopropa[1,2]benzene, 3a,3b,4,5,6,7-hexahydro-3,7-dimethyl-4-(1-methylethyl)-, [3aS-(3a.alpha.,3b.beta



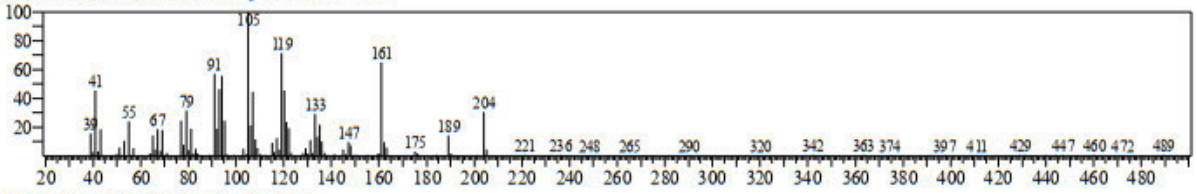
Hit#:4 Entry:45513 Library:NIST08.LIB
SI:94 Formula:C15H24 CAS:17699-14-8 MolWeight:204 RetIndex:1344
CompName:.alpha.-Cubebene $$ 1H-Cyclopenta[1,3]cyclopropa[1,2]benzene, 3a,3b,4,5,6,7-hexahydro-3,7-dimethyl-4-(1-methylethyl)-, [3aS-(3a.alpha.,3b.beta



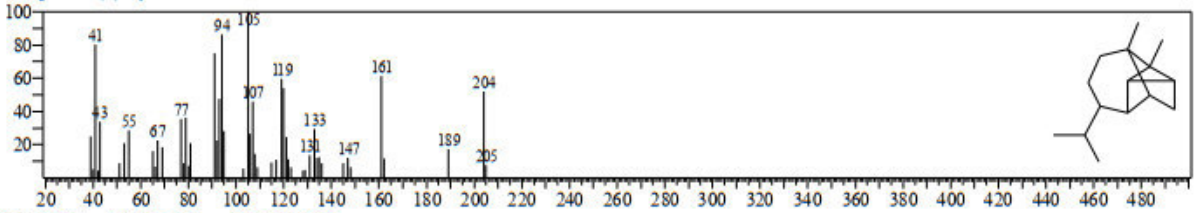
Hit#:5 Entry:101066 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C15H24 CAS:17699-14-8 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Cubebene $$ 1H-Cyclopenta[1,3]cyclopropa[1,2]benzene, 3a,3b,4,5,6,7-hexahydro-3,7-dimethyl-4-(1-methylethyl)-, [3aS-(3a.alpha.,3b.beta



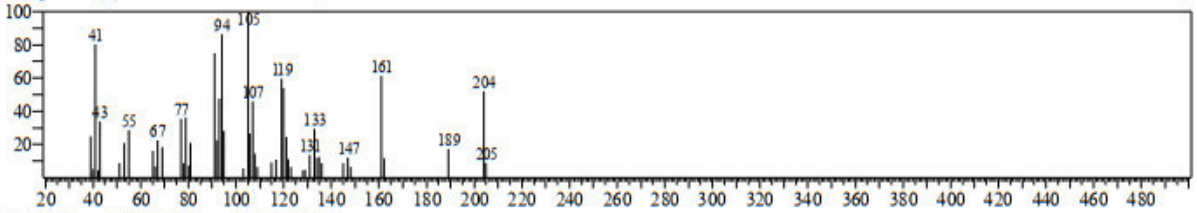
<< Target >>
Line#:4 R.Time:23.400(Scan#:4081) MassPeaks:286
RawMode:Averaged 23.395-23.405(4080-4082) BasePeak:105.10(4331)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



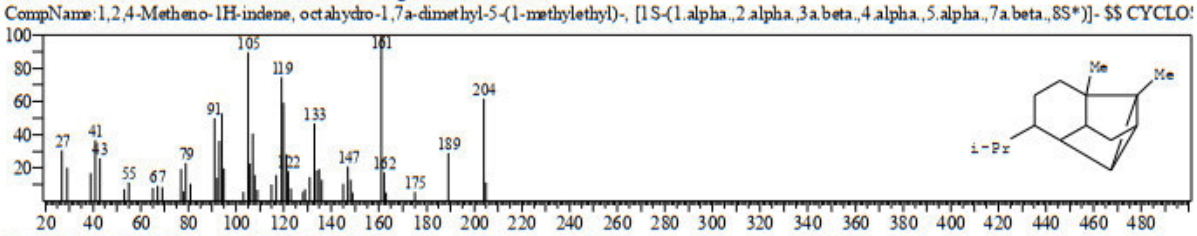
Hit#:1 Entry:45445 Library:NIST08.LIB
SI:93 Formula:C15H24 CAS:0-00-0 MolWeight:204 RetIndex:1125
CompName:(+)-Cycloisosativene



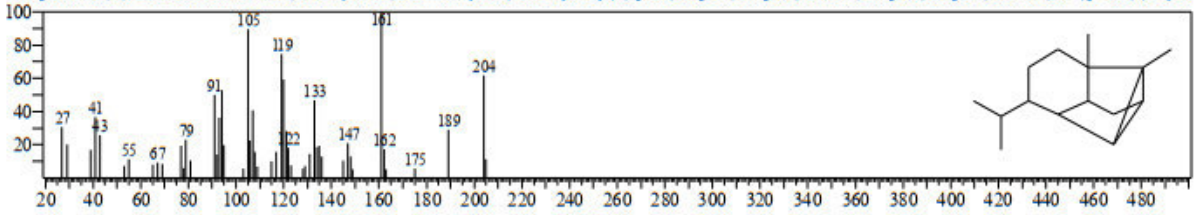
Hit#:2 Entry:100335 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C15 H24 CAS:0-00-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:(+)-CYCLOISOSATIVENE $$



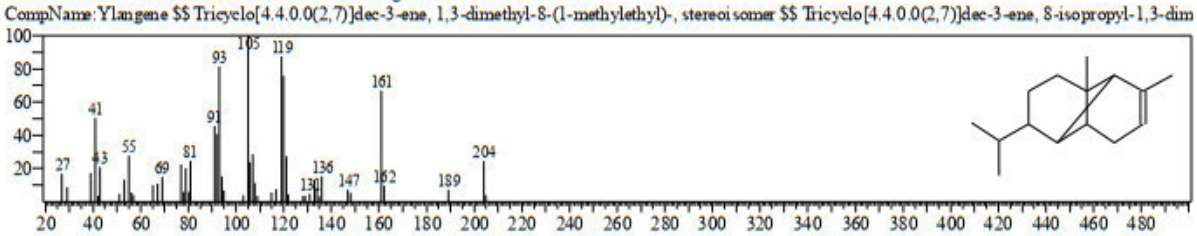
Hit#:3 Entry:100805 Library:WILEY7.LIB
SI:91 Formula:C15 H24 CAS:22469-52-9 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:1,2,4-Metheno-1H-indene, octahydro-1,7a-dimethyl-5-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,2.alpha.,3a.beta.,4.alpha.,5.alpha.,7a.beta.,8S*)]- $$ CYCLO



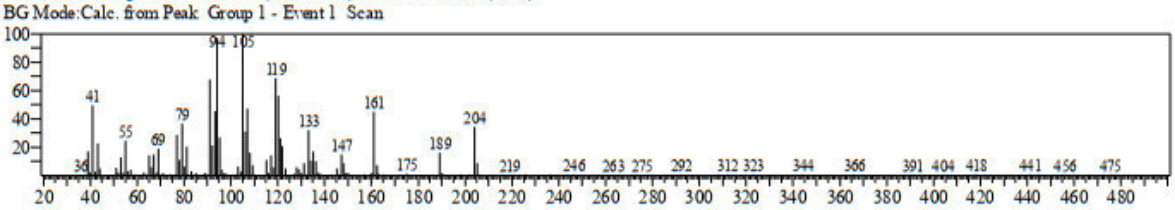
Hit#:4 Entry:45515 Library:NIST08.LIB
SI:91 Formula:C15H24 CAS:22469-52-9 MolWeight:204 RetIndex:1125
CompName:1,2,4-Metheno-1H-indene, octahydro-1,7a-dimethyl-5-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,2.alpha.,3a.beta.,4.alpha.,5.alpha.,7a.beta.,8S*)]- $$ (+)-Cycl



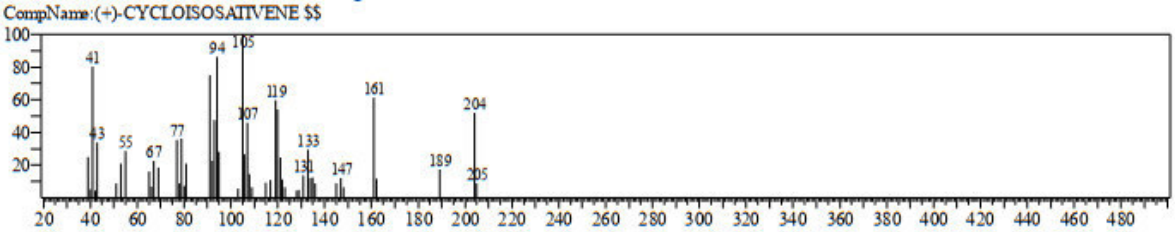
Hit#:5 Entry:45448 Library:NIST08.LIB
SI:90 Formula:C15H24 CAS:14912-44-8 MolWeight:204 RetIndex:1221
CompName:Ylangene $$ Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, stereoisomer $$ Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 8-isopropyl-1,3-dim



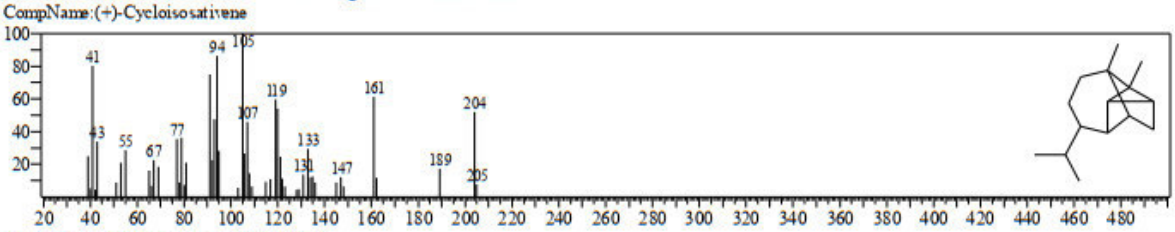
<< Target >>
Line#:5 R.Time:23.510(Scan#:4103) MassPeaks:277
RawMode:Averaged 23.505-23.515(4102-4104) BasePeak:105.05(4245)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



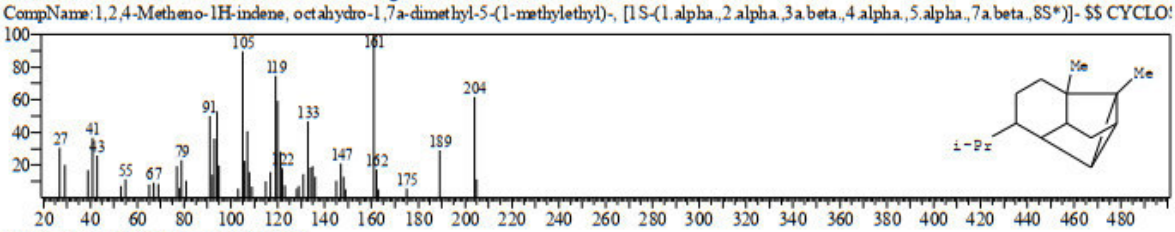
Hit#:1 Entry:100335 Library:WILEY7.LIB
SI:95 Formula:C15 H24 CAS:0-00-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:(+)-CYCLOISOSATIVENE $$



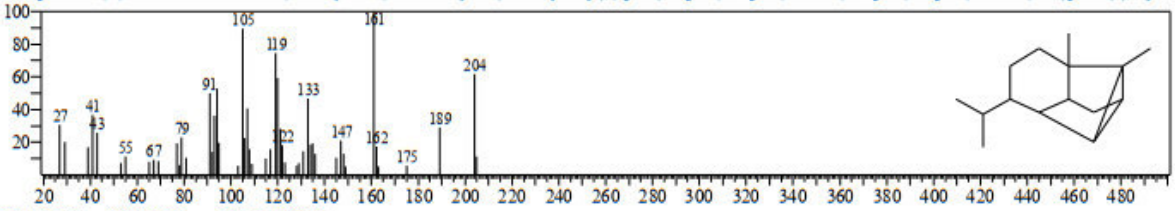
Hit#:2 Entry:45445 Library:NIST08.LIB
SI:95 Formula:C15H24 CAS:0-00-0 MolWeight:204 RetIndex:1125
CompName:(+)-Cycloisosativene



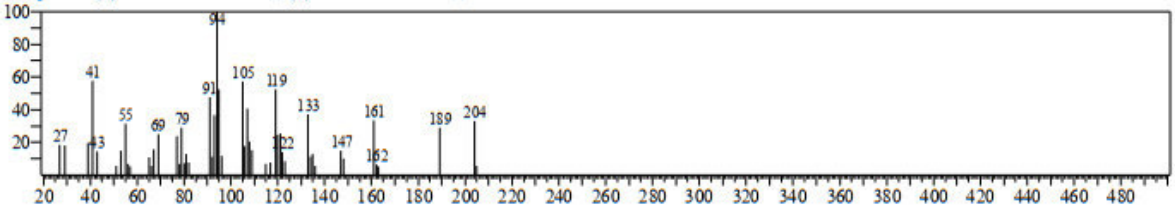
Hit#:3 Entry:100805 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C15 H24 CAS:22469-52-9 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:1,2,4-Metheno-1H-indene, octahydro-1,7a-dimethyl-5-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,2.alpha.,3a.beta.,4.alpha.,5.alpha.,7a.beta.,8S*)]- $$ CYCLO



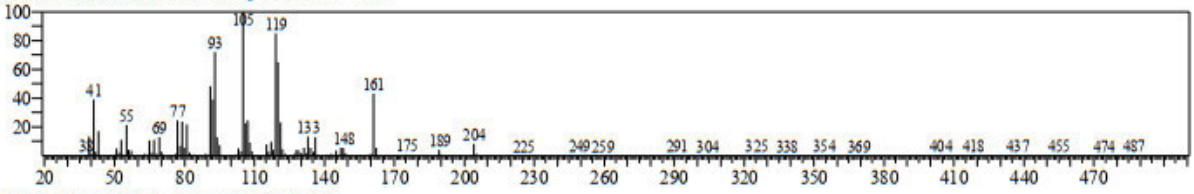
Hit#:4 Entry:45515 Library:NIST08.LIB
SI:90 Formula:C15H24 CAS:22469-52-9 MolWeight:204 RetIndex:1125
CompName:1,2,4-Metheno-1H-indene, octahydro-1,7a-dimethyl-5-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,2.alpha.,3a.beta.,4.alpha.,5.alpha.,7a.beta.,8S*)]- $$ (+)-Cycl



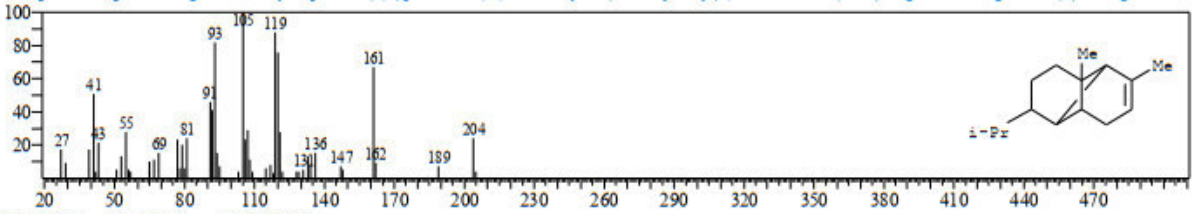
Hit#:5 Entry:101155 Library:WILEY7.LIB
SI:89 Formula:C15 H24 CAS:0-00-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:(+)-LONGICYCLENE $$ (+)-LONGICYCLEN $$



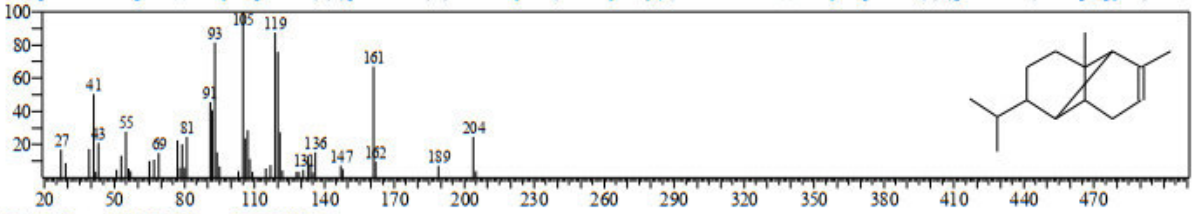
<< Target >>
Line#:6 R.Time:23.730(Scan#:4147) MassPeaks:319
RawMode:Averaged 23.725-23.735(4146-4148) BasePeak:105.10(13357)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



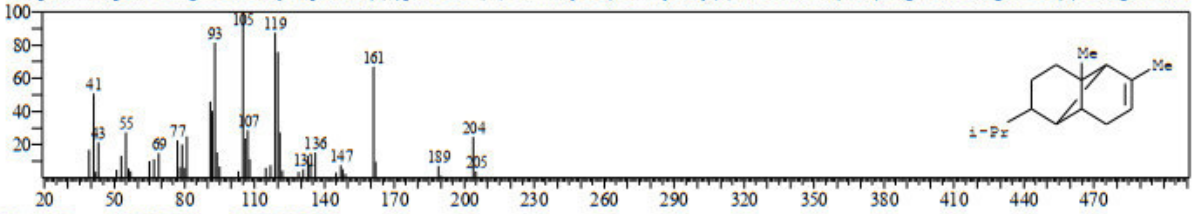
Hit#:1 Entry:101051 Library:WILEY7.LIB
SI:96 Formula:C15 H24 CAS:14912-44-8 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Ylangene $$ Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, stereoisomer (CAS) Ilagen $$ Ylangene $$ (+)-Ylangene $$ T



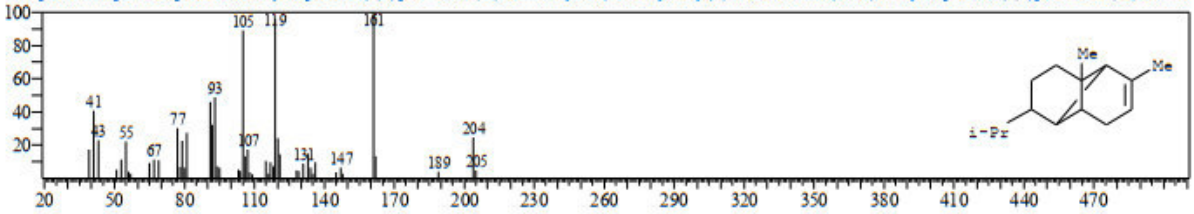
Hit#:2 Entry:45448 Library:NIST08.LIB
SI:95 Formula:C15H24 CAS:14912-44-8 MolWeight:204 RetIndex:1221
CompName:Ylangene $$ Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, stereoisomer $$ Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 8-isopropyl-1,3-dim



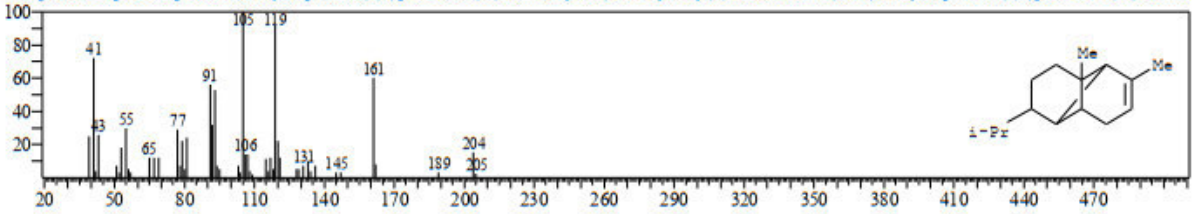
Hit#:3 Entry:101053 Library:WILEY7.LIB
SI:95 Formula:C15 H24 CAS:14912-44-8 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Ylangene $$ Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, stereoisomer (CAS) Ilagen $$ Ylangene $$ (+)-Ylangene $$ T



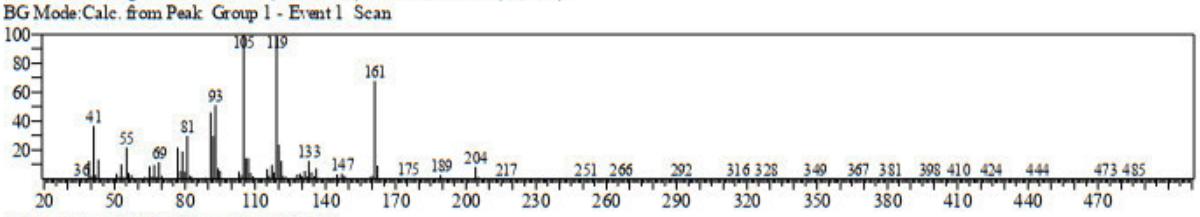
Hit#:4 Entry:101057 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C15 H24 CAS:3856-25-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Copaene $$ Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, stereoisomer (CAS) Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimet



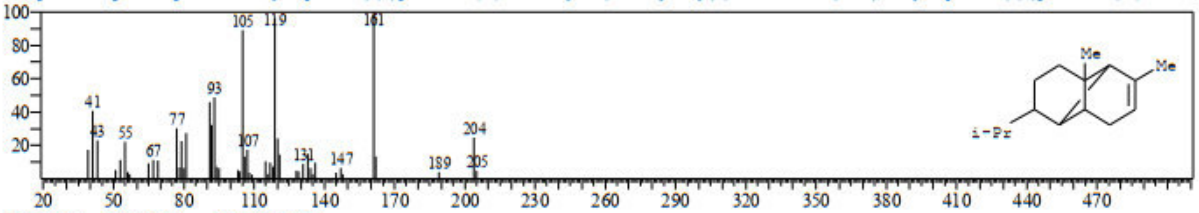
Hit#:5 Entry:101059 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C15 H24 CAS:3856-25-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Copaene $$ Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, stereoisomer (CAS) Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimet



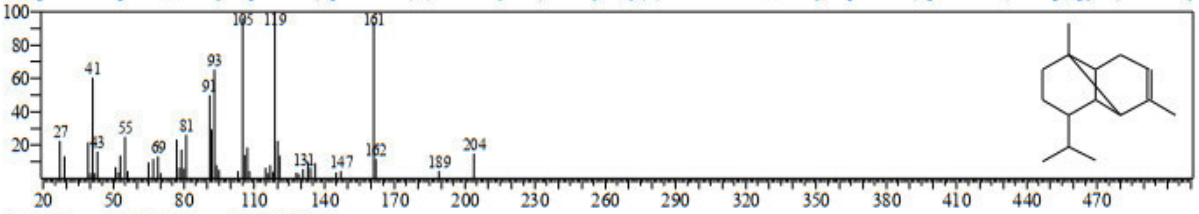
<< Target >>
Line#:7 R.Time:23.920(Scan#:4185) MassPeaks:348
RawMode:Averaged 23.915-23.925(4184-4186) BasePeak:105.10(106764)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



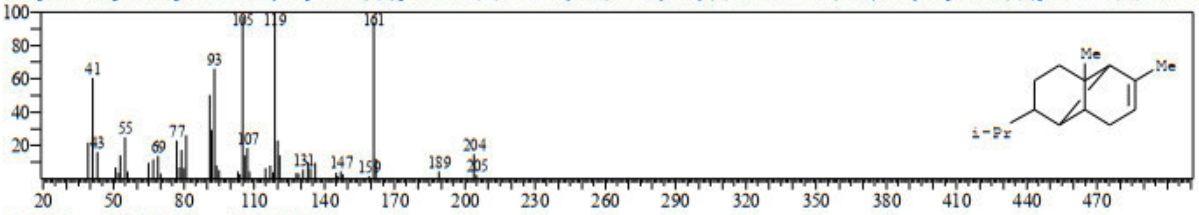
Hit#:1 Entry:101057 Library:WILEY7.LIB
SI:95 Formula:C15 H24 CAS:3856-25-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Copaene $$ Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, stereoisomer (CAS) Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimet



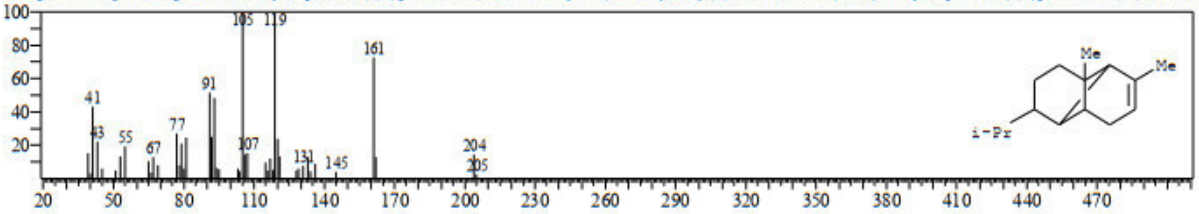
Hit#:2 Entry:17139 Library:NIST08s.LIB
SI:95 Formula:C15H24 CAS:3856-25-5 MolWeight:204 RetIndex:1221
CompName:Copaene $$ Tricyclo[4.4.0.02,7]dec-3-ene, 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, stereoisomer $$ Tricyclo[4.4.0.02,7]dec-3-ene, 8-isopropyl-1,3-dimethy



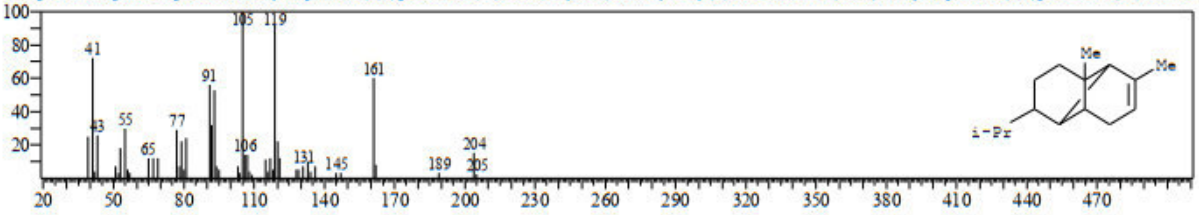
Hit#:3 Entry:101060 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H24 CAS:3856-25-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Copaene $$ Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, stereoisomer (CAS) Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimet



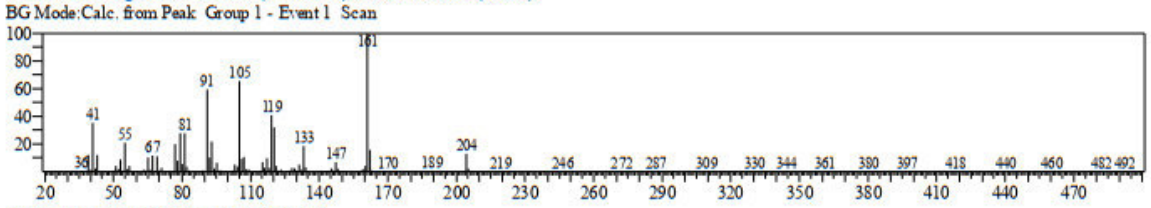
Hit#:4 Entry:101061 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H24 CAS:3856-25-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Copaene $$ Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, stereoisomer (CAS) Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimet



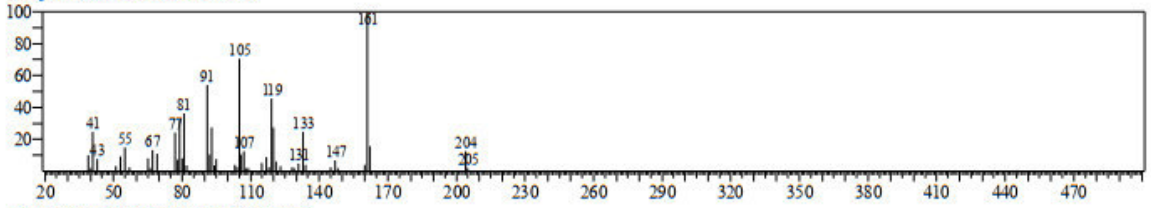
Hit#:5 Entry:101059 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H24 CAS:3856-25-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Copaene $$ Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, stereoisomer (CAS) Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimet



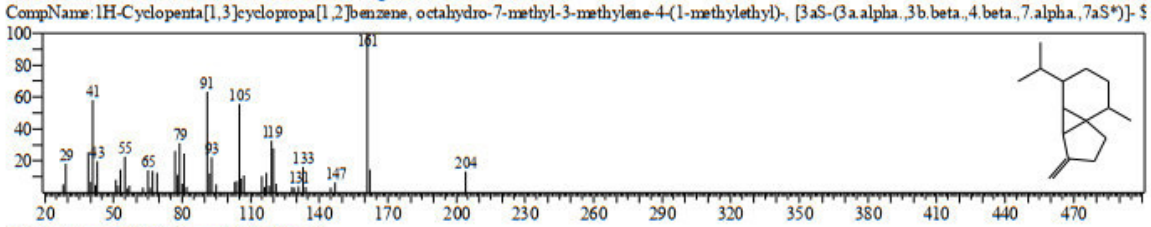
<< Target >>
Line#:8 R.Time:24.560(Scan#:4313) MassPeaks:313
RawMode:Averaged 24.555-24.565(4312-4314) BasePeak:161.15(25972)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



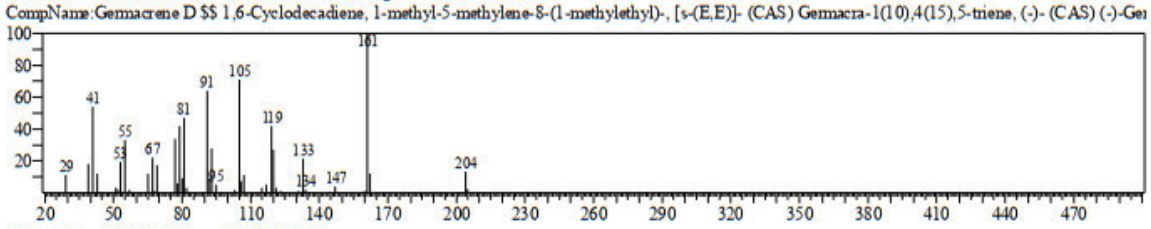
Hit#:1 Entry:100272 Library:WILEY7.LIB
SI:95 Formula:C15 H24 CAS:23986-74-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:GERMACRENE-D $$



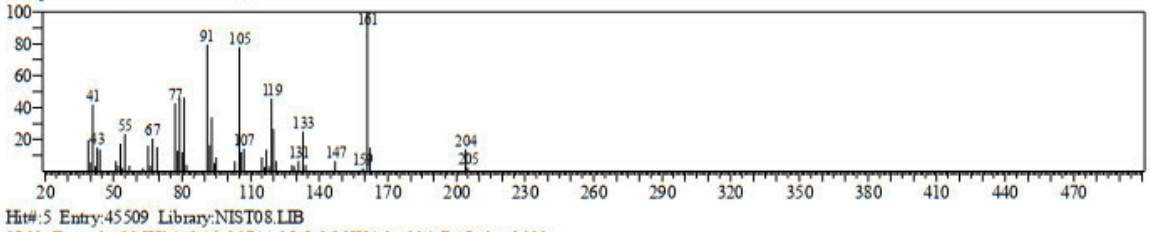
Hit#:2 Entry:17158 Library:NIST08s.LIB
SI:93 Formula:C15H24 CAS:13744-15-5 MolWeight:204 RetIndex:1339
CompName:1H-Cyclopenta[1,3]cyclopropa[1,2]benzene, octahydro-7-methyl-3-methylene-4-(1-methylethyl)-, [3aS-(3a.alpha.,3b.beta.,4.beta.,7.alpha.,7aS*)]- $



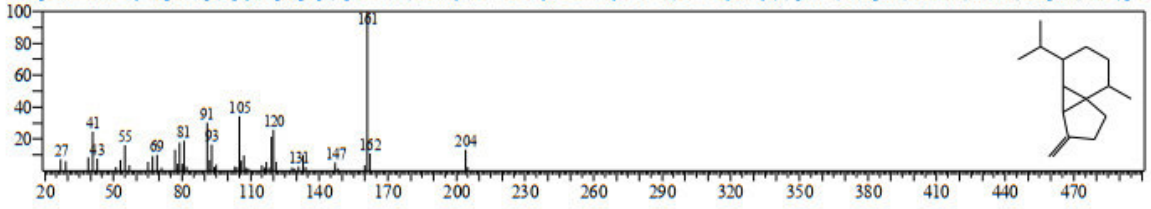
Hit#:3 Entry:101086 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C15 H24 CAS:23986-74-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Germacrene D $$ 1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-8-(1-methylethyl)-, [s-(E,E)]- (CAS) Germacra-1(10),4(15),5-triene, (-)- (CAS) (-)-Ger



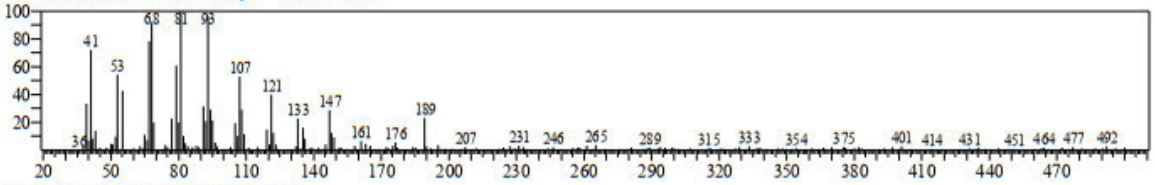
Hit#:4 Entry:100276 Library:WILEY7.LIB
SI:91 Formula:C15 H24 CAS:23986-74-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:GERMACRENE-D $$



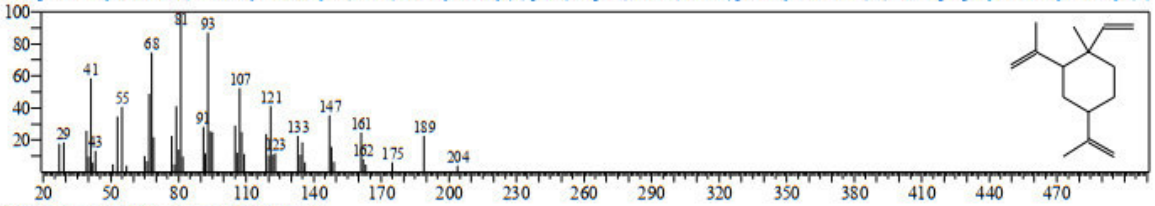
Hit#:5 Entry:45509 Library:NIST08.LIB
SI:91 Formula:C15H24 CAS:13744-15-5 MolWeight:204 RetIndex:1339
CompName:1H-Cyclopenta[1,3]cyclopropa[1,2]benzene, octahydro-7-methyl-3-methylene-4-(1-methylethyl)-, [3aS-(3a.alpha.,3b.beta.,4.beta.,7.alpha.,7aS*)]- $



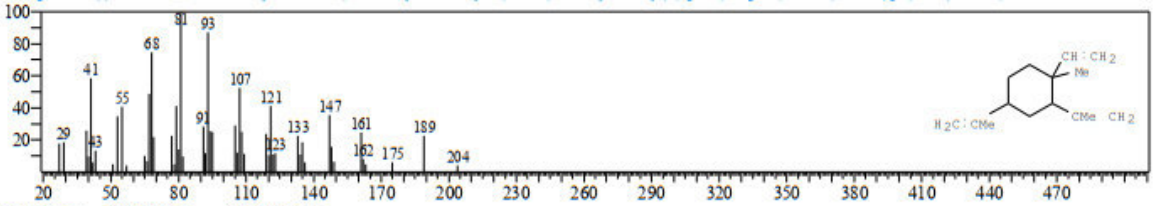
<< Target >>
Line#:9 R.Time:24.670(Scan#:4335) MassPeaks:268
RawMode:Averaged 24.665-24.675(4334-4336) BasePeak:81.10(1466)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



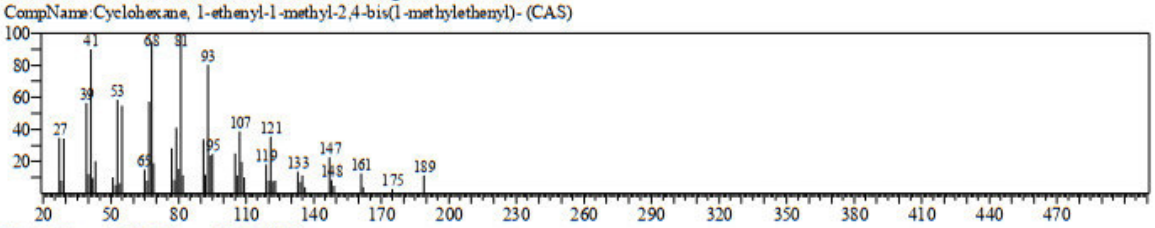
Hit#:1 Entry:45406 Library:NIST08.LIB
SI:92 Formula:C15H24 CAS:515-13-9 MolWeight:204 RetIndex:1398
CompName:Cyclohexane, 1-ethenyl-1-methyl-2,4-bis(1-methylethenyl)-, [1S-(1.alpha.,2.beta.,4.beta.)]- $$ Cyclohexane, 2,4-diisopropenyl-1-methyl-1-vinyl-, (



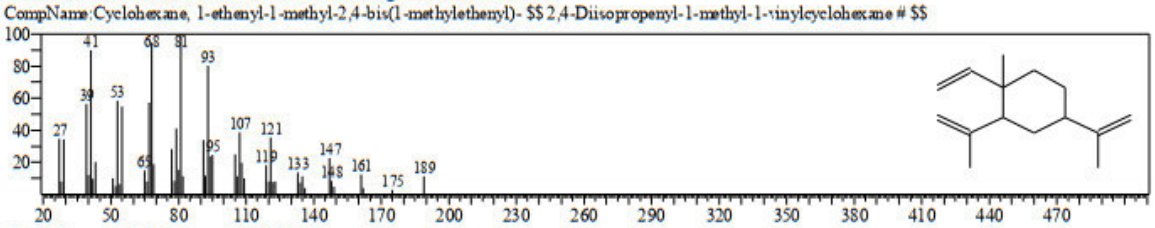
Hit#:2 Entry:100725 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C15 H24 CAS:515-13-9 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:(-)-.beta.-Elemene $$ Cyclohexane, 1-ethenyl-1-methyl-2,4-bis(1-methylethenyl)-, [1S-(1.alpha.,2.beta.,4.beta.)]- (CAS) CIS-1,3-DIISOPROPENYL



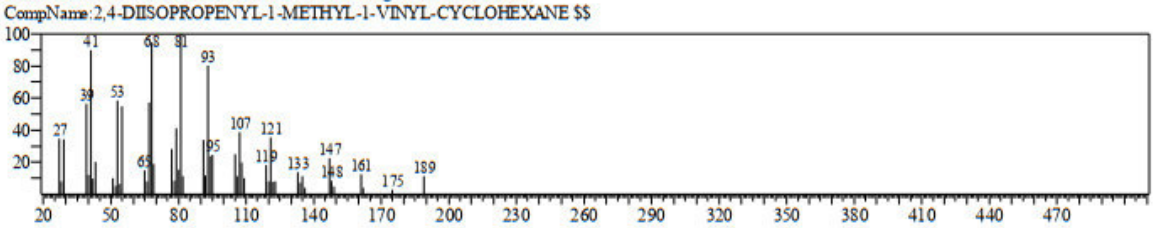
Hit#:3 Entry:100367 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C15 H24 CAS:110823-68-2 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Cyclohexane, 1-ethenyl-1-methyl-2,4-bis(1-methylethenyl)- (CAS)



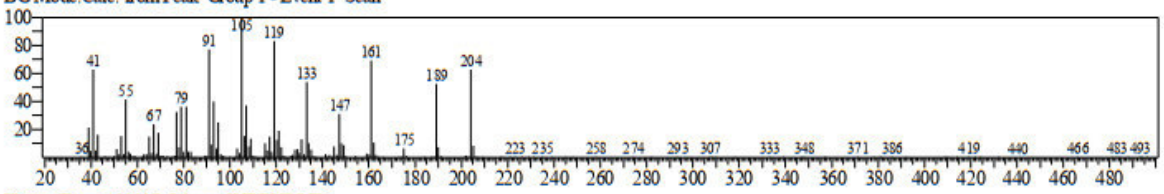
Hit#:4 Entry:45401 Library:NIST08.LIB
SI:92 Formula:C15H24 CAS:110823-68-2 MolWeight:204 RetIndex:1398
CompName:Cyclohexane, 1-ethenyl-1-methyl-2,4-bis(1-methylethenyl)- $$ 2,4-Diisopropenyl-1-methyl-1-vinylcyclohexane # $$



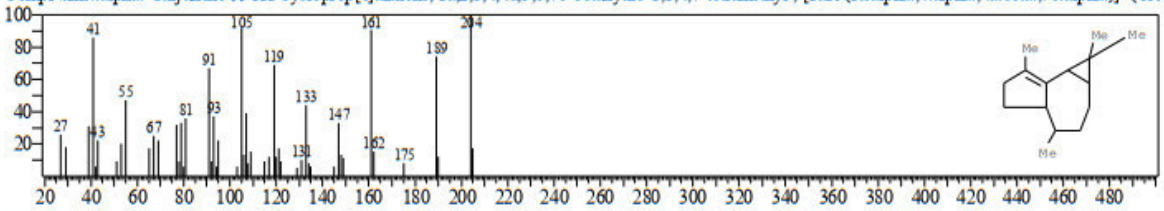
Hit#:5 Entry:100181 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C15 H24 CAS:33880-83-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:2,4-DIISOPROPENYL-1-METHYL-1-VINYL-CYCLOHEXANE $$



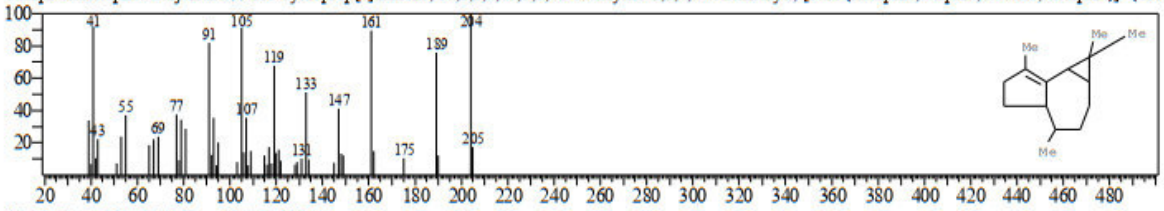
<< Target >>
Line#:10 R.Time:25.335(Scan#:4468) MassPeaks:276
RawMode:Averaged 25.330-25.340(4467-4469) BasePeak:105.10(6927)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



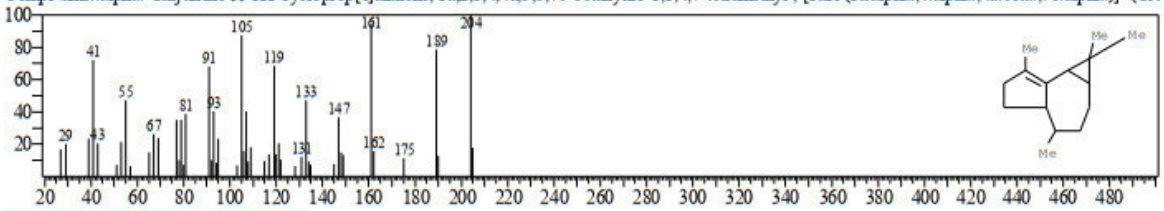
Hit#:1 Entry:100997 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H24 CAS:489-40-7 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Gurjunene $$ 1H-Cycloprop[e]azulene, 1a,2,3,4,4a,5,6,7b-octahydro-1,1,4,7-tetramethyl-, [1aR-(1a.alpha.,4.alpha.,4a.beta.,7b.alpha.)]- (CA



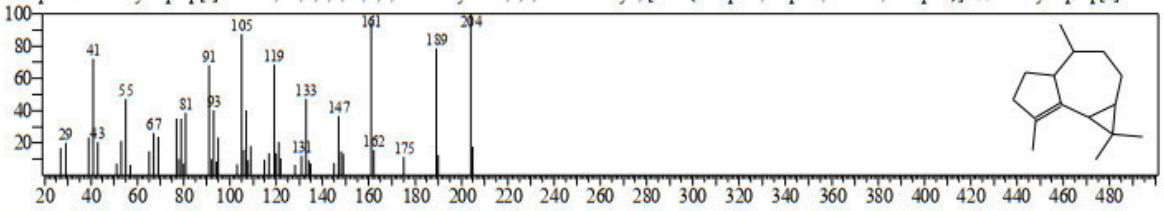
Hit#:2 Entry:100999 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H24 CAS:489-40-7 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Gurjunene $$ 1H-Cycloprop[e]azulene, 1a,2,3,4,4a,5,6,7b-octahydro-1,1,4,7-tetramethyl-, [1aR-(1a.alpha.,4.alpha.,4a.beta.,7b.alpha.)]- (CA



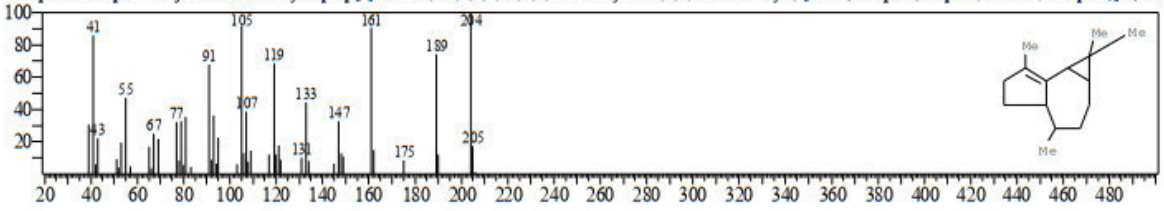
Hit#:3 Entry:100994 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H24 CAS:489-40-7 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Gurjunene $$ 1H-Cycloprop[e]azulene, 1a,2,3,4,4a,5,6,7b-octahydro-1,1,4,7-tetramethyl-, [1aR-(1a.alpha.,4.alpha.,4a.beta.,7b.alpha.)]- (CA



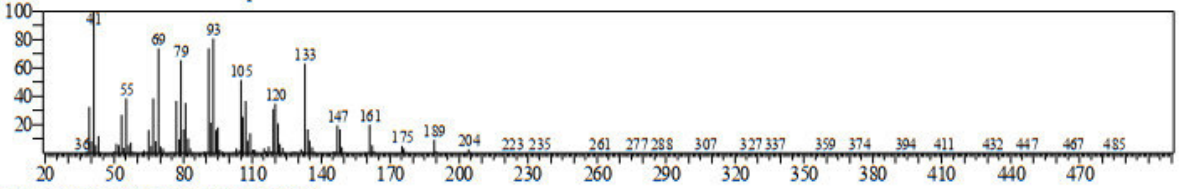
Hit#:4 Entry:45554 Library:NIST08.LIB
SI:94 Formula:C15H24 CAS:489-40-7 MolWeight:204 RetIndex:1419
CompName:1H-Cycloprop[e]azulene, 1a,2,3,4,4a,5,6,7b-octahydro-1,1,4,7-tetramethyl-, [1aR-(1a.alpha.,4.alpha.,4a.beta.,7b.alpha.)]- $$ 1H-Cycloprop[e]azulen



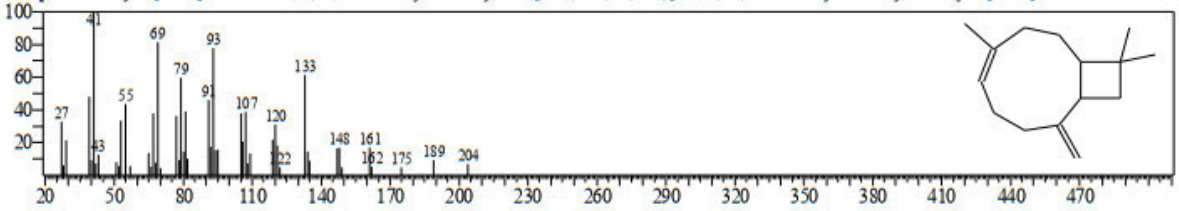
Hit#:5 Entry:101002 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C15 H24 CAS:489-40-7 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Gurjunene $$ 1H-Cycloprop[e]azulene, 1a,2,3,4,4a,5,6,7b-octahydro-1,1,4,7-tetramethyl-, [1aR-(1a.alpha.,4.alpha.,4a.beta.,7b.alpha.)]- (CA



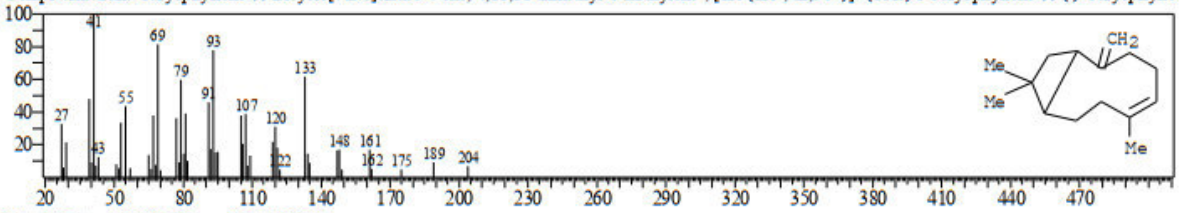
<< Target >>
Line#:11 R.Time:25.705(Scan#:4542) MassPeaks:323
RawMode:Averaged 25.700-25.710(4541-4543) BasePeak:41.00(202092)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



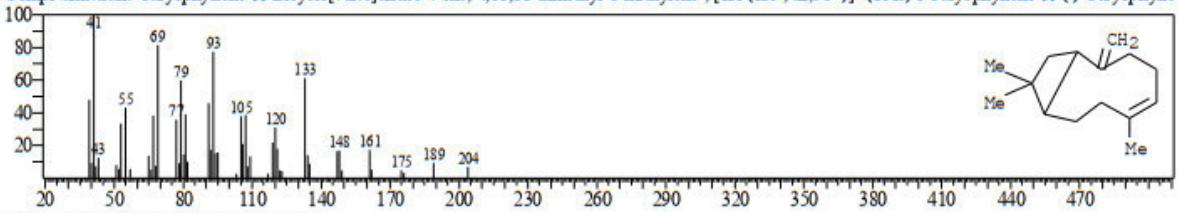
Hit#:1 Entry:17061 Library:NIST08s.LIB
SI:96 Formula:C15H24 CAS:118-65-0 MolWeight:204 RetIndex:1494
CompName:Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-,[1R-(1R*,4Z,9S*)]- $$ 4,11,11-Trimethyl-8-methylenebicyclo[7.2.0]undec-4-ene # $$



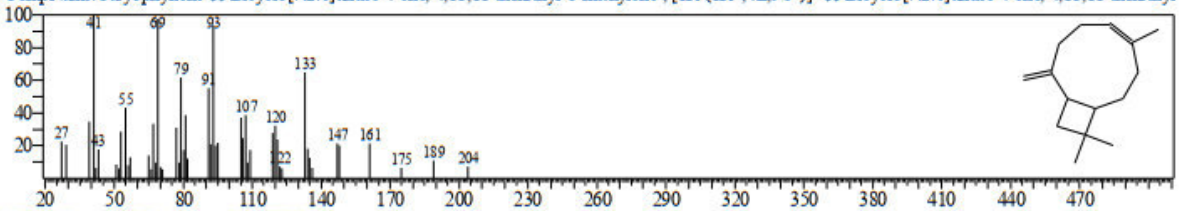
Hit#:2 Entry:100781 Library:WILEY7.LIB
SI:96 Formula:C15 H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:trans-Caryophyllene $$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS) l-Caryophyllene $$ (-)-Caryophylle



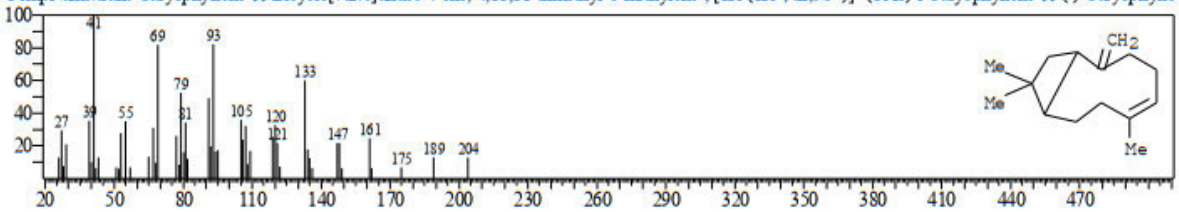
Hit#:3 Entry:100792 Library:WILEY7.LIB
SI:96 Formula:C15 H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:trans-Caryophyllene $$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS) l-Caryophyllene $$ (-)-Caryophylle



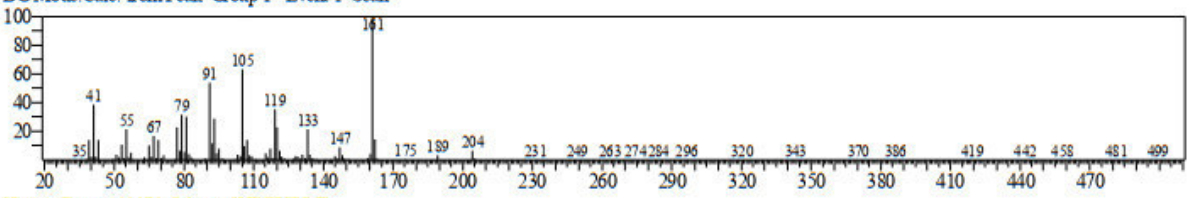
Hit#:4 Entry:17062 Library:NIST08s.LIB
SI:95 Formula:C15H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:1494
CompName:Caryophyllene $$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- $$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl



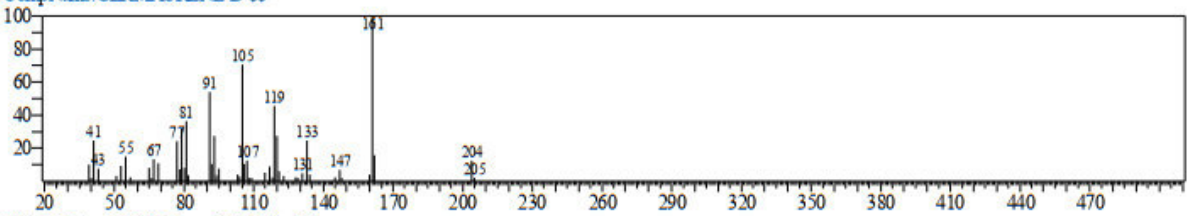
Hit#:5 Entry:100774 Library:WILEY7.LIB
SI:95 Formula:C15 H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:trans-Caryophyllene $$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS) l-Caryophyllene $$ (-)-Caryophylle



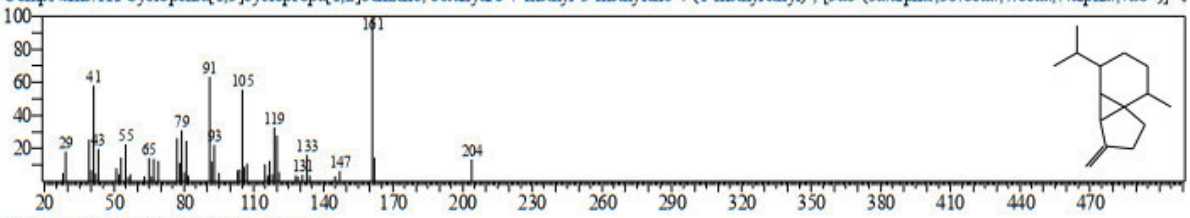
<< Target >>
Line#:12 R.Time:26.120(Scan#:4625) MassPeaks:301
RawMode:Averaged 26.115-26.125(4624-4626) BasePeak:161.15(27345)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



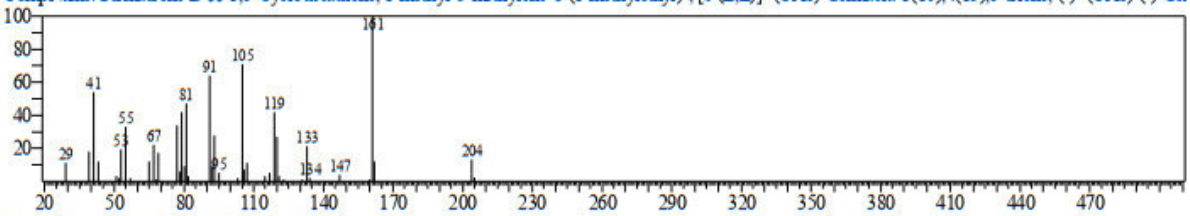
Hit#:1 Entry:100272 Library:WILEY7.LIB
SI:95 Formula:C15 H24 CAS:23986-74-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:GERMACRENE-D $$



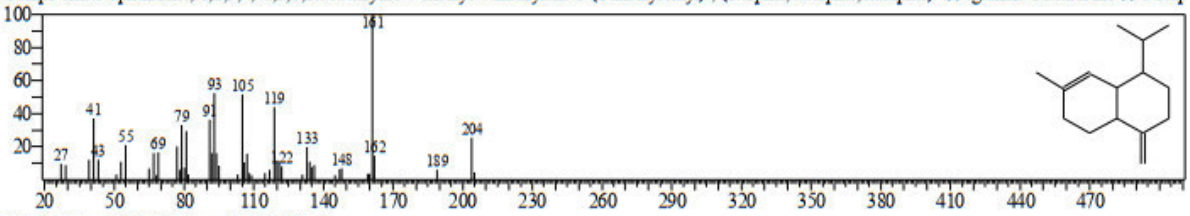
Hit#:2 Entry:17158 Library:NIST08s.LIB
SI:92 Formula:C15H24 CAS:13744-15-5 MolWeight:204 RetIndex:1339
CompName:1H-Cyclopenta[1,3]cyclopropa[1,2]benzene, octahydro-7-methyl-3-methylene-4-(1-methylethyl)-, [3aS-(3a.alpha.,3b.beta.,4.beta.,7.alpha.,7aS*)]- $



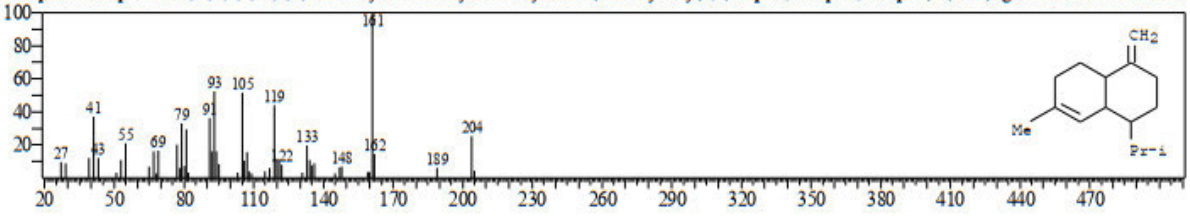
Hit#:3 Entry:101086 Library:WILEY7.LIB
SI:91 Formula:C15 H24 CAS:23986-74-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Germacrene D $$ 1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-8-(1-methylethyl)-, [s-(E,E)]- (CAS) Germacra-1(10),4(15),5-triene, (-)- (CAS) (-)-Ger



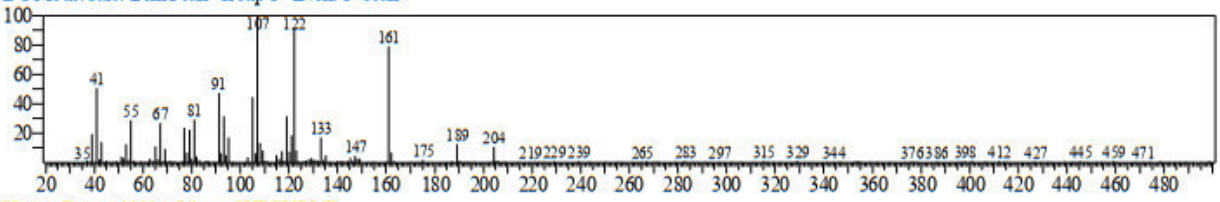
Hit#:4 Entry:17160 Library:NIST08s.LIB
SI:91 Formula:C15H24 CAS:30021-74-0 MolWeight:204 RetIndex:1435
CompName:Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha.,8a.alpha.)- $$ .gamma.-Muurolene $$ 1-Isop



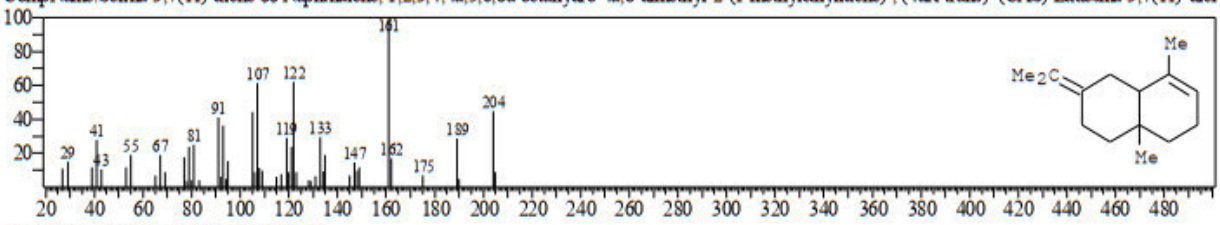
Hit#:5 Entry:100949 Library:WILEY7.LIB
SI:91 Formula:C15 H24 CAS:30021-74-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha.,8a.alpha.)- (CAS) .gamma.-Muurolene $$ C



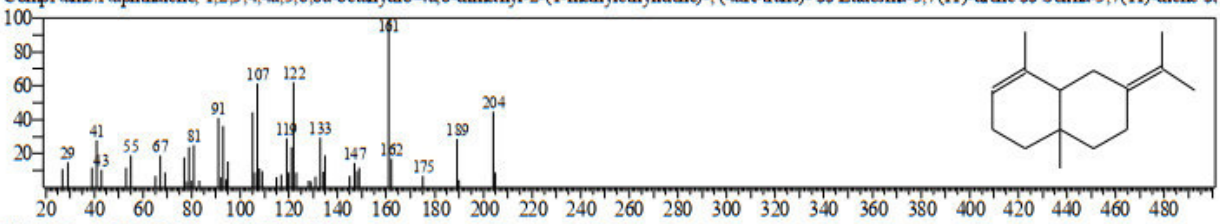
<< Target >>
Line#:13 R.Time:26.320(Scan#:4665) MassPeaks:269
RawMode:Averaged 26.315-26.325(4664-4666) BasePeak:107.10(4663)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



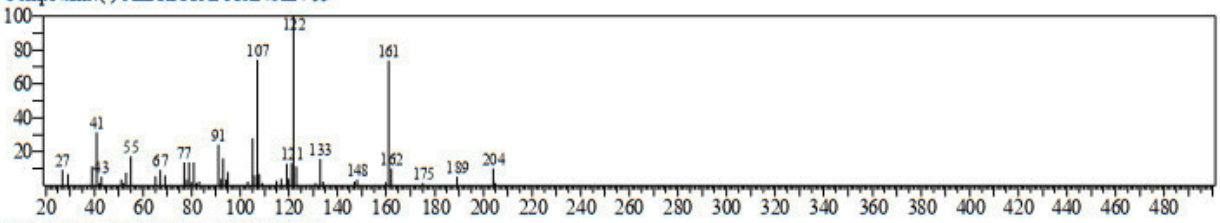
Hit#:1 Entry:100904 Library:WILEY7.LIB
SI:88 Formula:C15 H24 CAS:6813-21-4 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Selina-3,7(11)-diene $$ Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-4a,8-dimethyl-2-(1-methylethylidene)-, (4aR-trans)- (CAS) Eudesma-3,7(11)-dien



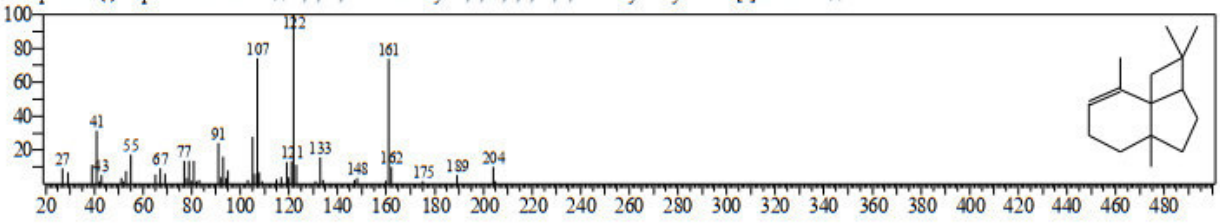
Hit#:2 Entry:45522 Library:NIST08.LIB
SI:88 Formula:C15H24 CAS:6813-21-4 MolWeight:204 RetIndex:1507
CompName:Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-4a,8-dimethyl-2-(1-methylethylidene)-, (4aR-trans)- $$ Eudesma-3,7(11)-diene $$ Selina-3,7(11)-diene $$



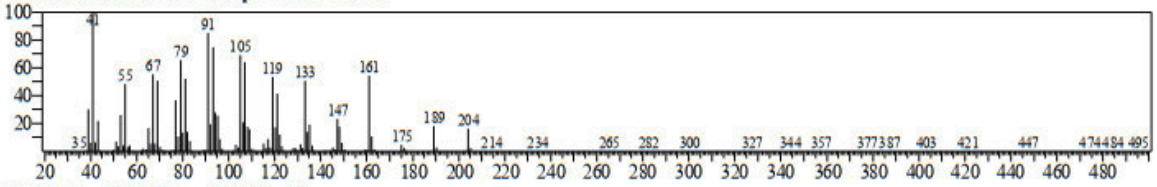
Hit#:3 Entry:100349 Library:WILEY7.LIB
SI:88 Formula:C15 H24 CAS:0-00-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:(-)-ALPHA-PANASINSEN $$



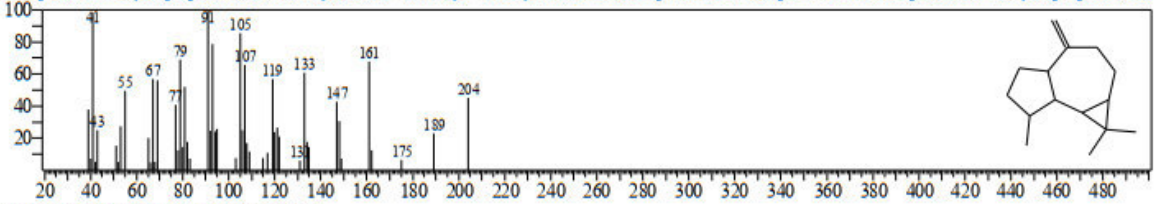
Hit#:4 Entry:45487 Library:NIST08.LIB
SI:88 Formula:C15H24 CAS:56633-28-4 MolWeight:204 RetIndex:1416
CompName:(-)-.alpha.-Panasinsen $$ 2,2,4a,8-Tetramethyl-1,2,2a,3,4,4a,5,6-octahydrocyclobuta[c]indene # $$



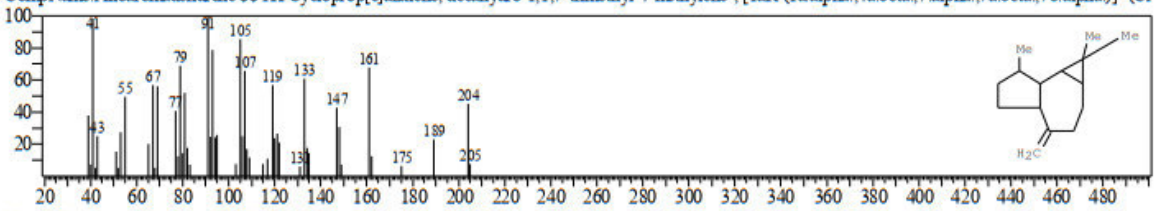
<< Target >>
Line#:14 R.Time:26.520(Scan#:4705) MassPeaks:282
RawMode:Averaged 26.515-26.525(4704-4706) BasePeak:41.00(120134)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



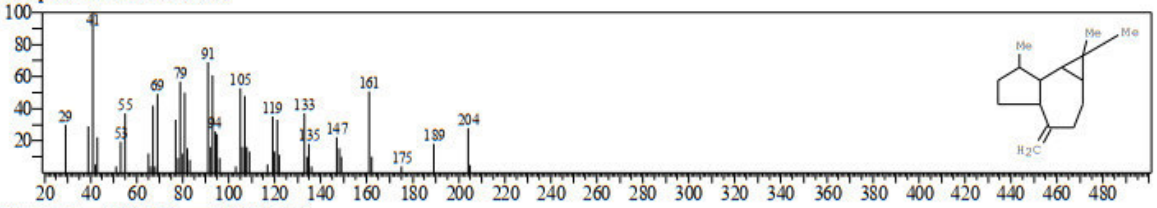
Hit#:1 Entry:17097 Library:NIST08s.LIB
SI:95 Formula:C15H24 CAS:25246-27-9 MolWeight:204 RetIndex:1386
CompName:1H-Cycloprop[e]azulene, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1aR-(1a.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.beta.,7b.alpha.)]- $$ 1H-Cycloprop[e]azulen



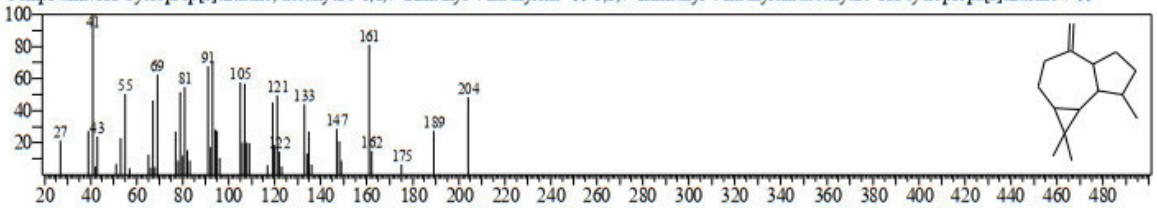
Hit#:2 Entry:101016 Library:WILEY7.LIB
SI:95 Formula:C15 H24 CAS:25246-27-9 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Alloaromadendrene $$ 1H-Cycloprop[e]azulene, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1aR-(1a.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.beta.,7b.alpha.)]- (C



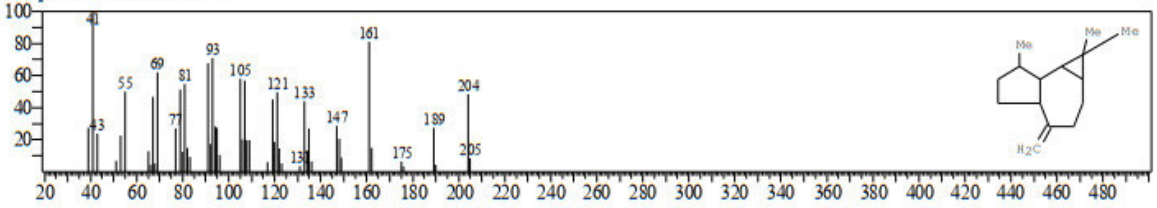
Hit#:3 Entry:101093 Library:WILEY7.LIB
SI:95 Formula:C15 H24 CAS:489-39-4 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Aromadendrene $$



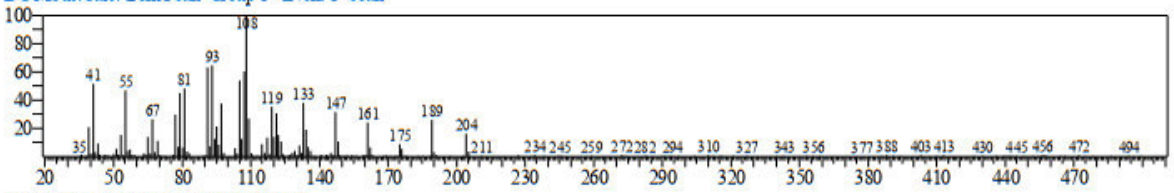
Hit#:4 Entry:45388 Library:NIST08.LIB
SI:94 Formula:C15H24 CAS:72747-25-2 MolWeight:204 RetIndex:1386
CompName:1H-Cycloprop[e]azulene, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene- $$ 1,1,7-Trimethyl-4-methylenedecahydro-1H-cyclopropa[e]azulene # $$



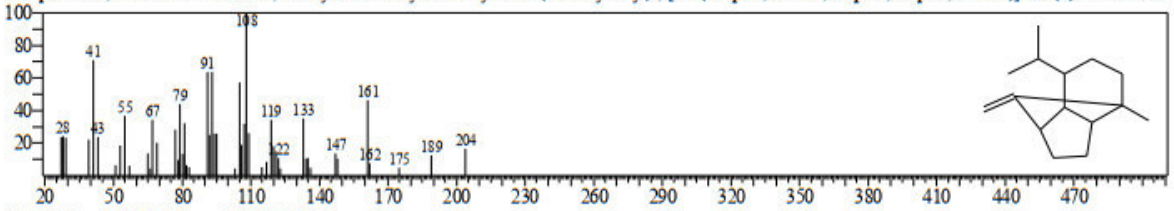
Hit#:5 Entry:101094 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H24 CAS:489-39-4 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Aromadendrene $$



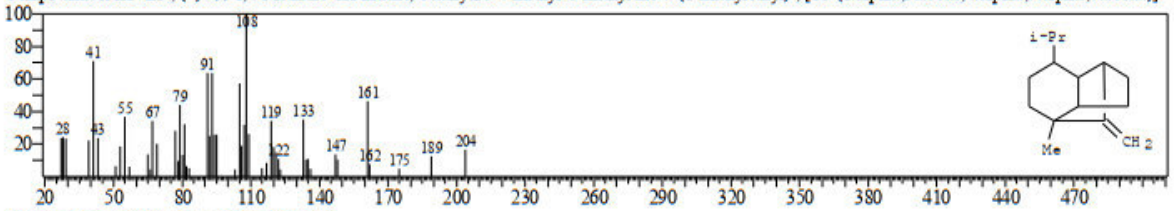
<< Target >>
Line#:15 R.Time:26.715(Scan#:4744) MassPeaks:252
RawMode:Averaged 26.710-26.720(4743-4745) BasePeak:108.10(4927)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



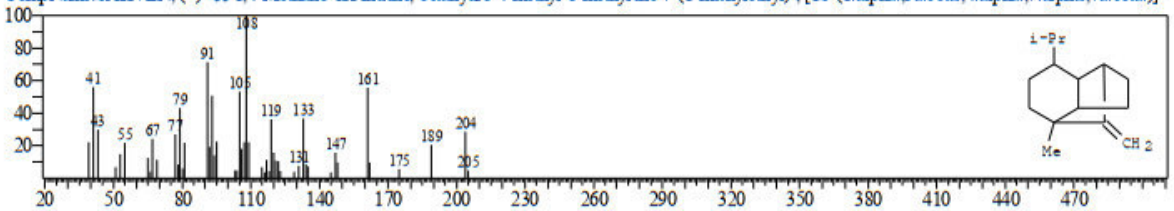
Hit#:1 Entry:45464 Library:NIST08.LIB
SI:90 Formula:C15H24 CAS:3650-28-0 MolWeight:204 RetIndex:1339
CompName:1,4-Methano-1H-indene, octahydro-4-methyl-8-methylene-7-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,3a.beta.,4.alpha.,7.alpha.,7a.beta.)]- $$ (+)-Sativen $$ 1



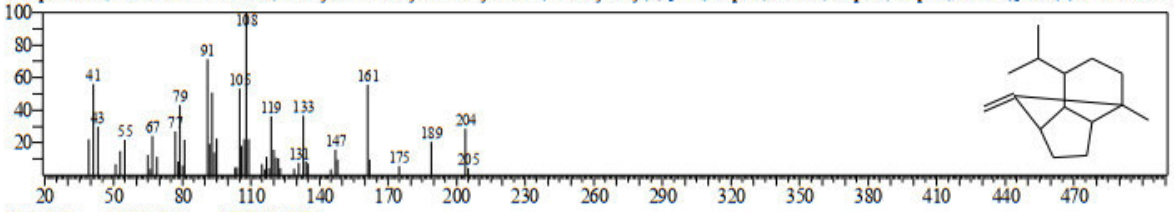
Hit#:2 Entry:100801 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C15 H24 CAS:3650-28-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:SATIVEN, (+)- $$ 1,4-Methano-1H-indene, octahydro-4-methyl-8-methylene-7-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,3a.beta.,4.alpha.,7.alpha.,7a.beta.)]-



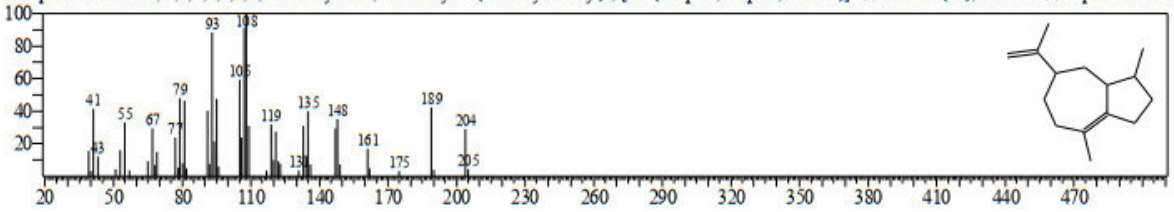
Hit#:3 Entry:100802 Library:WILEY7.LIB
SI:89 Formula:C15 H24 CAS:3650-28-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:SATIVEN, (+)- $$ 1,4-Methano-1H-indene, octahydro-4-methyl-8-methylene-7-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,3a.beta.,4.alpha.,7.alpha.,7a.beta.)]-



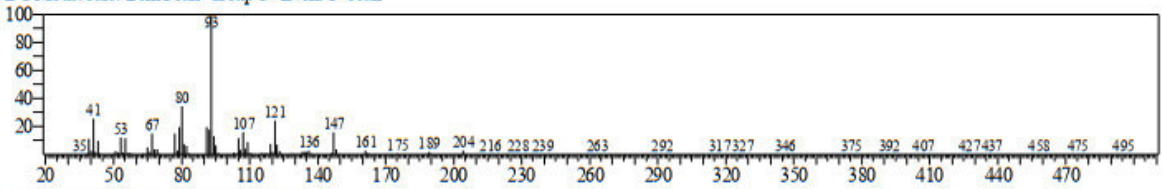
Hit#:4 Entry:17131 Library:NIST08s.LIB
SI:89 Formula:C15H24 CAS:3650-28-0 MolWeight:204 RetIndex:1339
CompName:1,4-Methano-1H-indene, octahydro-4-methyl-8-methylene-7-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,3a.beta.,4.alpha.,7.alpha.,7a.beta.)]- $$ (+)-Sativen $$ 1



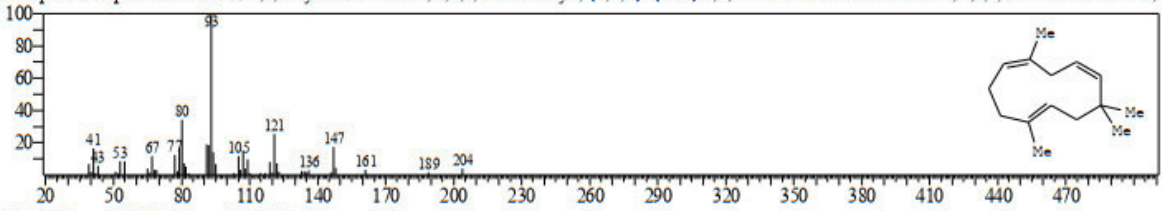
Hit#:5 Entry:17132 Library:NIST08s.LIB
SI:89 Formula:C15H24 CAS:3691-11-0 MolWeight:204 RetIndex:1490
CompName:Azulene, 1,2,3,5,6,7,8,8a-octahydro-1,4-dimethyl-7-(1-methylethenyl)-, [1S-(1.alpha.,7.alpha.,8a.beta.)]- $$ Guaia-1(10),11-diene $$ .alpha.-Bulnes



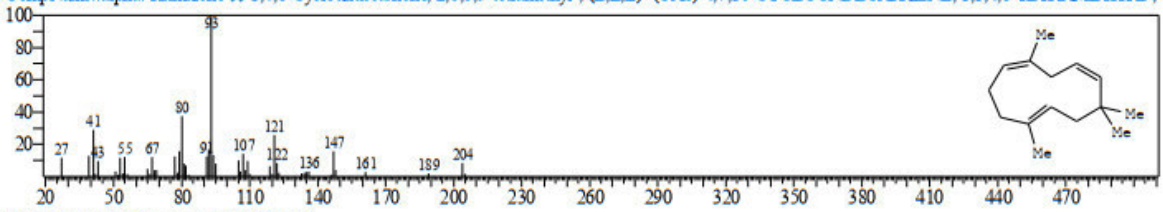
<< Target >>
Line#:16 R.Time:27.120(Scan#:4825) MassPeaks:321
RawMode:Averaged 27.115-27.125(4824-4826) BasePeak:93.10(523643)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



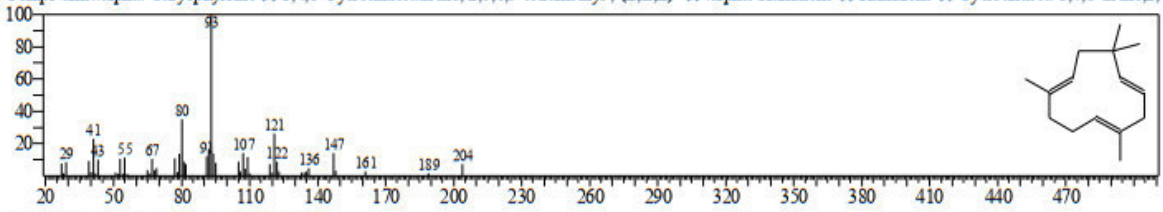
Hit#:1 Entry:100734 Library:WILEY7.LIB
SI:97 Formula:C15 H24 CAS:6753-98-6 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Humulene $$ 1,4,8-Cycloundecatriene, 2,6,6,9-tetramethyl-, (E,E,E)- (CAS) 4,7,10-CYCLOUNDECATRIENE, 1,1,4,8-TETRAMETHYL-,



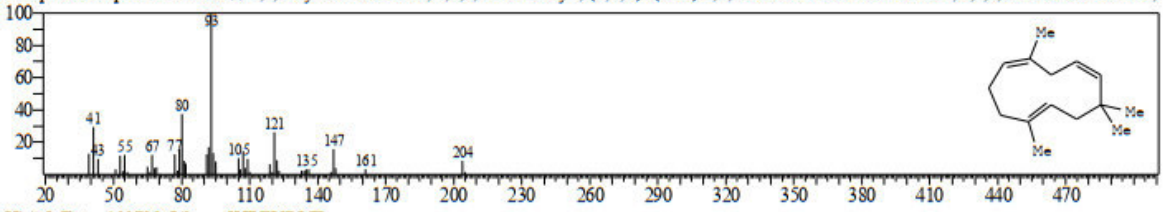
Hit#:2 Entry:100736 Library:WILEY7.LIB
SI:97 Formula:C15 H24 CAS:6753-98-6 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Humulene $$ 1,4,8-Cycloundecatriene, 2,6,6,9-tetramethyl-, (E,E,E)- (CAS) 4,7,10-CYCLOUNDECATRIENE, 1,1,4,8-TETRAMETHYL-,



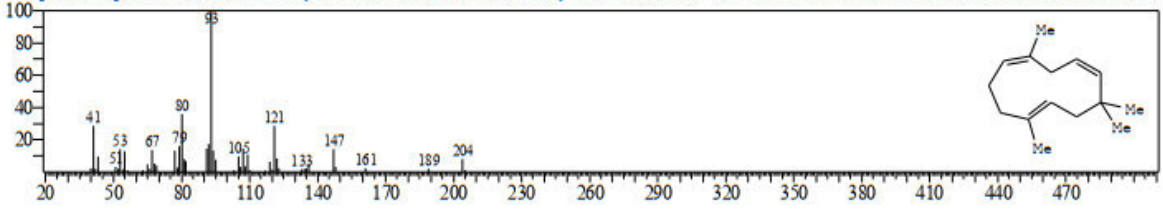
Hit#:3 Entry:17106 Library:NIST08s.LIB
SI:96 Formula:C15H24 CAS:6753-98-6 MolWeight:204 RetIndex:1579
CompName:.alpha.-Caryophyllene $$ 1,4,8-Cycloundecatriene, 2,6,6,9-tetramethyl-, (E,E,E)- $$ .alpha.-Humulene $$ Humulene $$ Cycloundeca-1,4,8-triene,2,



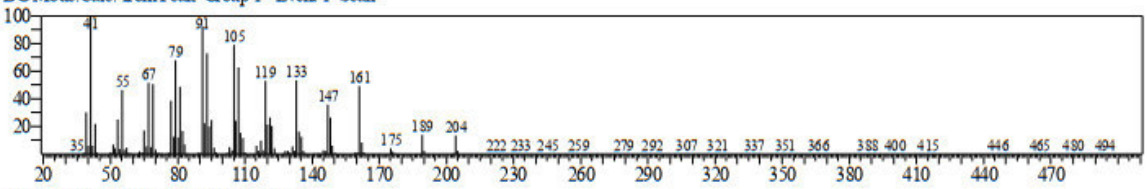
Hit#:4 Entry:100745 Library:WILEY7.LIB
SI:96 Formula:C15 H24 CAS:6753-98-6 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Humulene $$ 1,4,8-Cycloundecatriene, 2,6,6,9-tetramethyl-, (E,E,E)- (CAS) 4,7,10-CYCLOUNDECATRIENE, 1,1,4,8-TETRAMETHYL-,



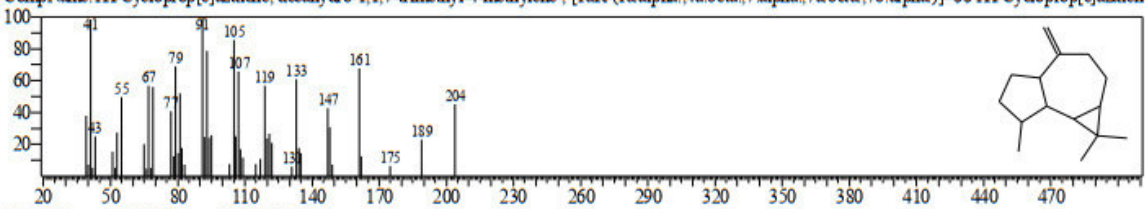
Hit#:5 Entry:100739 Library:WILEY7.LIB
SI:96 Formula:C15 H24 CAS:6753-98-6 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Humulene $$ 1,4,8-Cycloundecatriene, 2,6,6,9-tetramethyl-, (E,E,E)- (CAS) 4,7,10-CYCLOUNDECATRIENE, 1,1,4,8-TETRAMETHYL-,



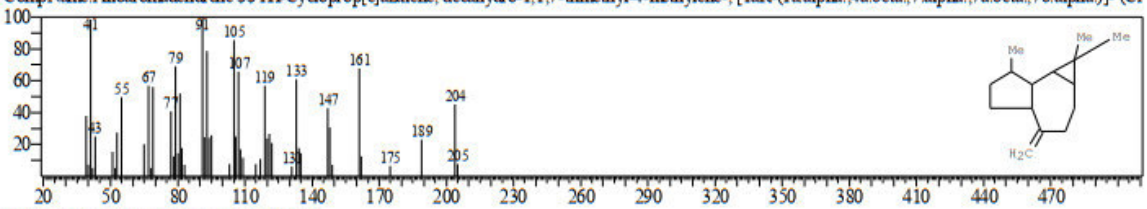
<< Target >>
Line#:17 R.Time:27.425(Scan#:4886) MassPeaks:312
RawMode:Averaged 27.420-27.430(4885-4887) BasePeak:41.00(160668)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



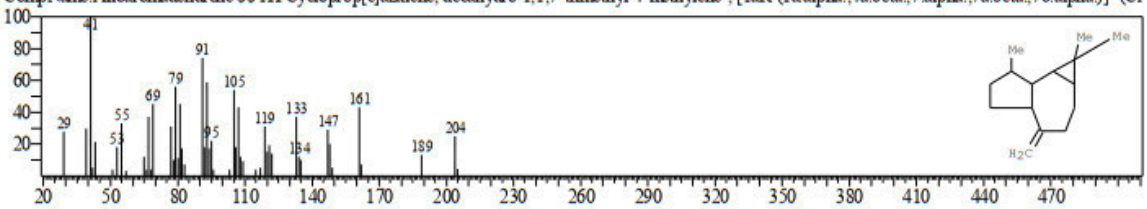
Hit#:1 Entry:17097 Library:NIST08s.LIB
SI:96 Formula:C15H24 CAS:25246-27-9 MolWeight:204 RetIndex:1386
CompName:1H-Cycloprop[e]azulene, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1aR-(1a.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.beta.,7b.alpha.)]- $$ 1H-Cycloprop[e]azulen



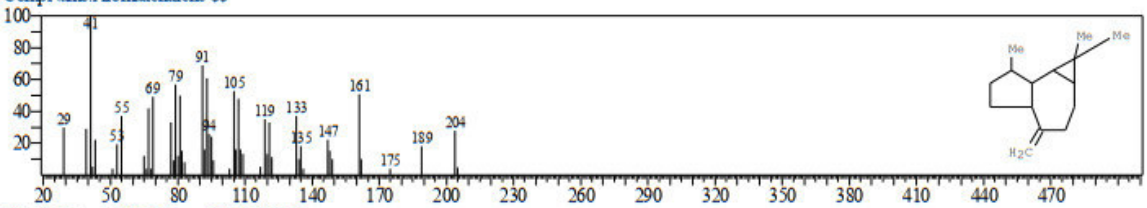
Hit#:2 Entry:101016 Library:WILEY7.LIB
SI:96 Formula:C15 H24 CAS:25246-27-9 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Alloaromadendrene $$ 1H-Cycloprop[e]azulene, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1aR-(1a.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.beta.,7b.alpha.)]- (C



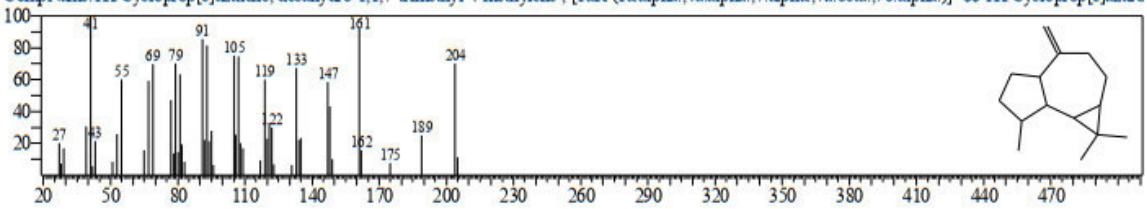
Hit#:3 Entry:101013 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H24 CAS:25246-27-9 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Alloaromadendrene $$ 1H-Cycloprop[e]azulene, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1aR-(1a.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.beta.,7b.alpha.)]- (C



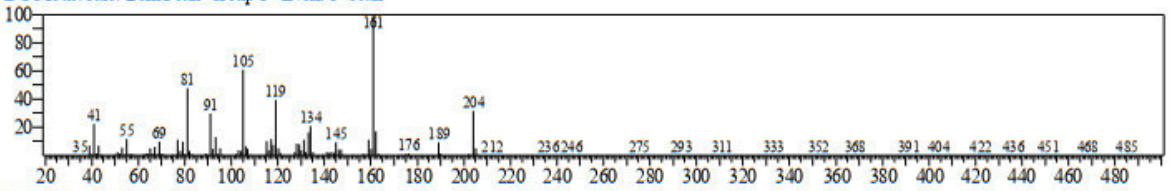
Hit#:4 Entry:101093 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C15 H24 CAS:489-39-4 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Aromadendrene $$



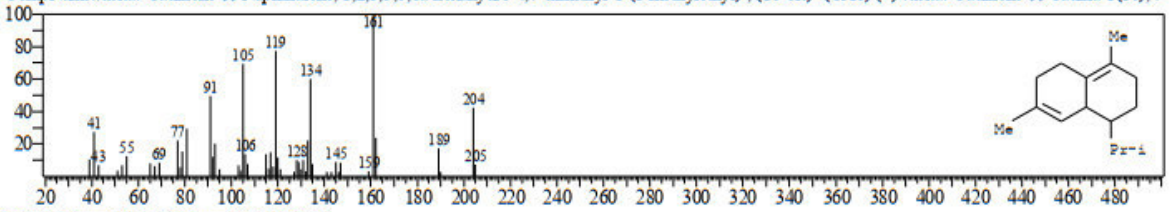
Hit#:5 Entry:45387 Library:NIST08.LIB
SI:93 Formula:C15H24 CAS:489-39-4 MolWeight:204 RetIndex:1386
CompName:1H-Cycloprop[e]azulene, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1aR-(1a.alpha.,4a.alpha.,7.alpha.,7a.beta.,7b.alpha.)]- $$ 1H-Cycloprop[e]azule



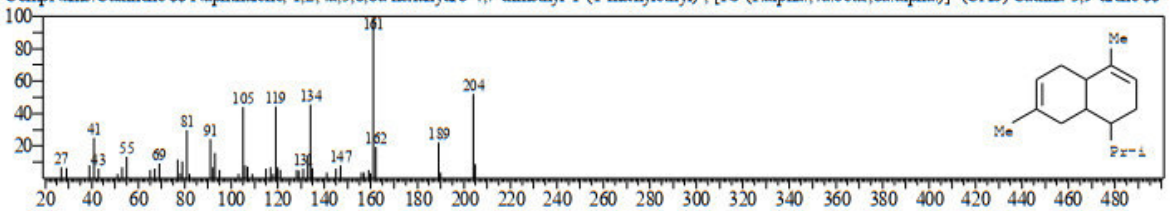
<< Target >>
Line#:18 R.Time:27.995(Scan#:5000) MassPeaks:270
RawMode:Averaged 27.990-28.000(4999-5001) BasePeak:161.15(36339)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



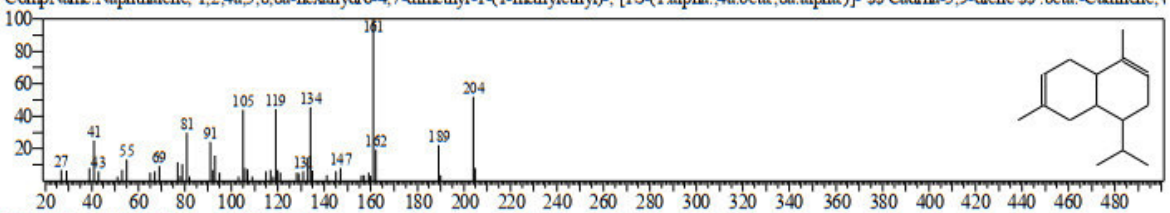
Hit#:1 Entry:100891 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C15 H24 CAS:483-76-1 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.delta.-Cadinene $$ Naphthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1S-cis)- (CAS) (+)-.delta.-Cadinene $$ Cadina-1(10),4-



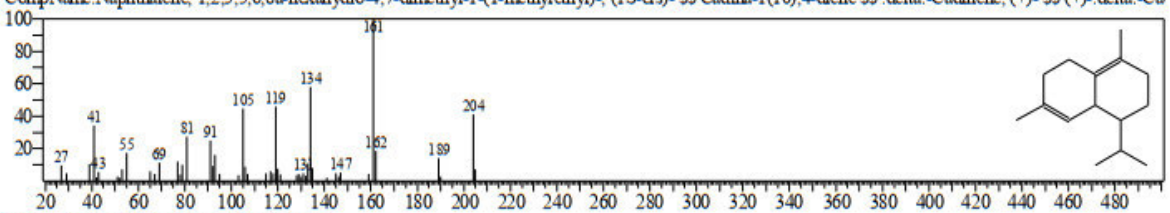
Hit#:2 Entry:100877 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C15 H24 CAS:523-47-7 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Cadinene $$ Naphthalene, 1,2,4a,5,8,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,4a.beta.,8a.alpha.)]- (CAS) Cadina-3,9-diene $$



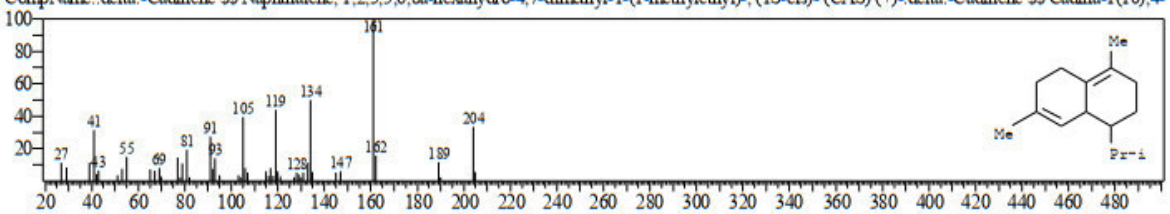
Hit#:3 Entry:17180 Library:NIST08s.LIB
SI:90 Formula:C15H24 CAS:523-47-7 MolWeight:204 RetIndex:1440
CompName:Naphthalene, 1,2,4a,5,8,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,4a.beta.,8a.alpha.)]- $$ Cadina-3,9-diene $$ .beta.-Cadinene,



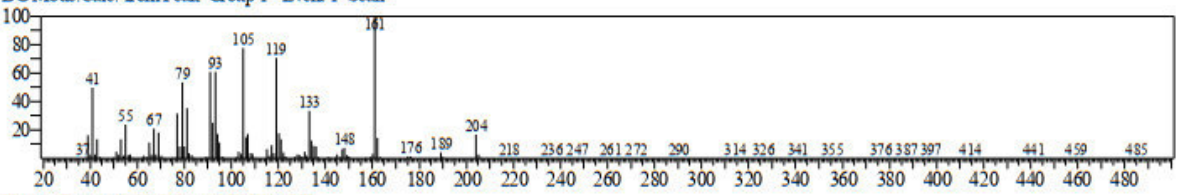
Hit#:4 Entry:45523 Library:NIST08.LIB
SI:90 Formula:C15H24 CAS:483-76-1 MolWeight:204 RetIndex:1469
CompName:Naphthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1S-cis)- $$ Cadina-1(10),4-diene $$ .delta.-Cadinene, (+)- $$ (+)-.delta.-Ca



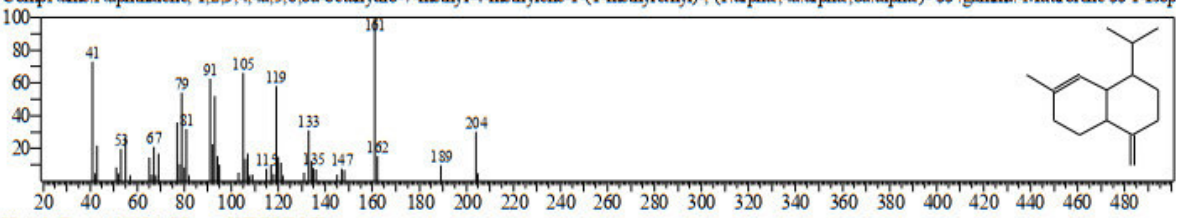
Hit#:5 Entry:100895 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C15 H24 CAS:483-76-1 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.delta.-Cadinene $$ Naphthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1S-cis)- (CAS) (+)-.delta.-Cadinene $$ Cadina-1(10),4-



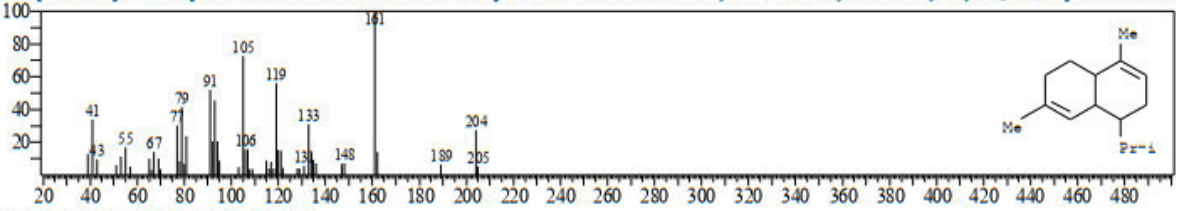
<< Target >>
Line#:19 R.Time:28.130(Scan#:5027) MassPeaks:328
RawMode:Averaged 28.125-28.135(5026-5028) BasePeak:161.15(92995)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



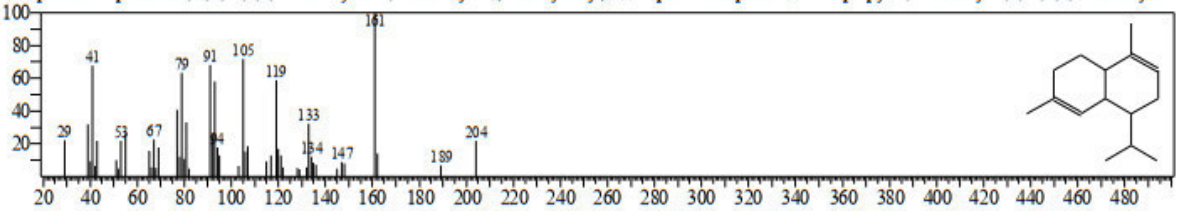
Hit#:1 Entry:17155 Library:NIST08s.LIB
SI:94 Formula:C15H24 CAS:30021-74-0 MolWeight:204 RetIndex:1435
CompName:Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha.,8a.alpha.)- $$ .gamma.-Muurolene $$ 1-Isop



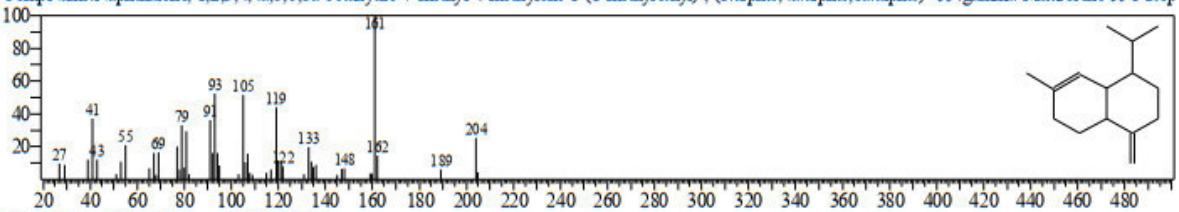
Hit#:2 Entry:100954 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C15 H24 CAS:23515-88-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Amorphene $$ .ALPHA. AMORPHENE $$ Naphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,4a beta.,8a



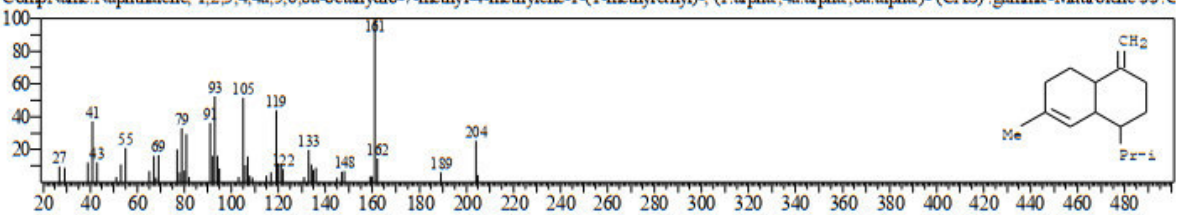
Hit#:3 Entry:17164 Library:NIST08s.LIB
SI:93 Formula:C15H24 CAS:483-75-0 MolWeight:204 RetIndex:1440
CompName:Naphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)- $$ .alpha.-Amorphene $$ 1-Isopropyl-4,7-dimethyl-1,2,4a,5,6,8a-hexahydro



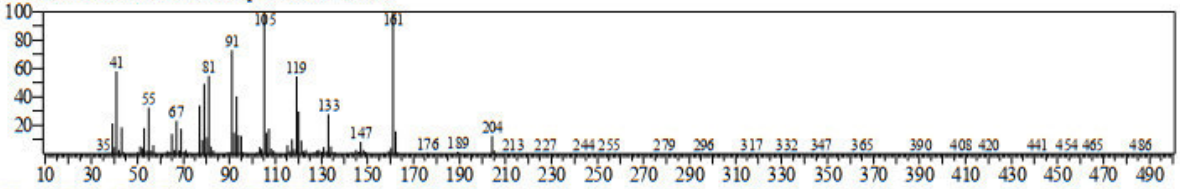
Hit#:4 Entry:17160 Library:NIST08s.LIB
SI:92 Formula:C15H24 CAS:30021-74-0 MolWeight:204 RetIndex:1435
CompName:Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha.,8a.alpha.)- $$ .gamma.-Muurolene $$ 1-Isop



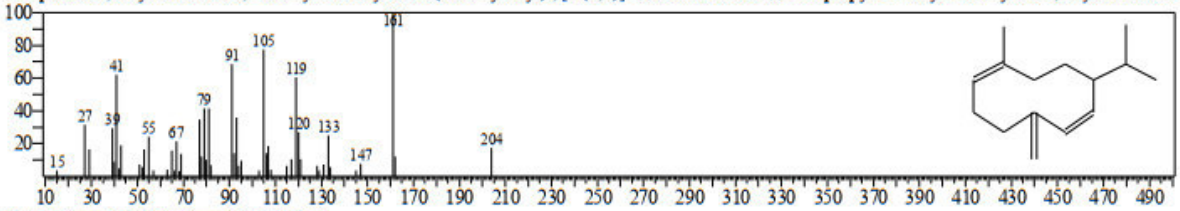
Hit#:5 Entry:100949 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C15 H24 CAS:30021-74-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha.,8a.alpha.)- (CAS) .gamma.-Muurolene $$ .C



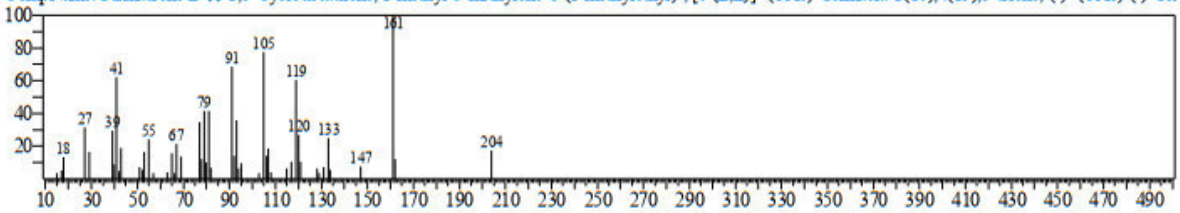
<< Target >>
Line#:20 R.Time:28.245(Scan#:5050) MassPeaks:286
RawMode:Averaged 28.240-28.250(5049-5051) BasePeak:161.15(31227)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



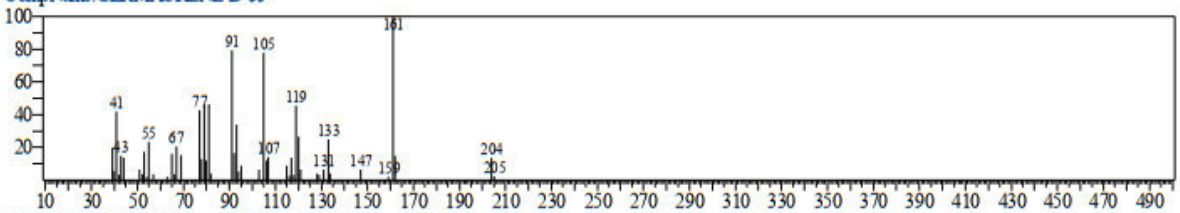
Hit#:1 Entry:45510 Library:NIST08.LIB
SI:95 Formula:C15H24 CAS:23986-74-5 MolWeight:204 RetIndex:1515
CompName:1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-8-(1-methylethyl)-, [s-(E,E)]- $$ Germacrene D $$ 8-Isopropyl-1-methyl-5-methylene-1,6-cyclodecadien



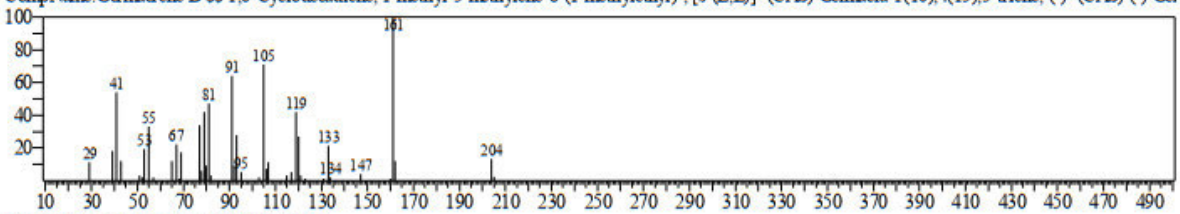
Hit#:2 Entry:101085 Library:WILEY7.LIB
SI:95 Formula:C15 H24 CAS:23986-74-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Germacrene D $$ 1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-8-(1-methylethyl)-, [s-(E,E)]- (CAS) Germacra-1(10),4(15),5-triene, (-)- (CAS) (-)-Ge



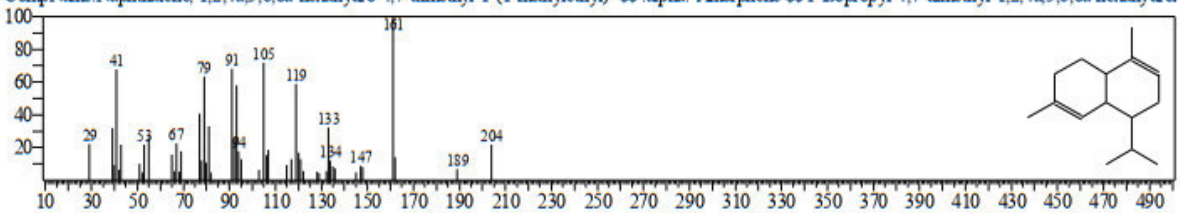
Hit#:3 Entry:100276 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C15 H24 CAS:23986-74-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:GERMACRENE-D $$



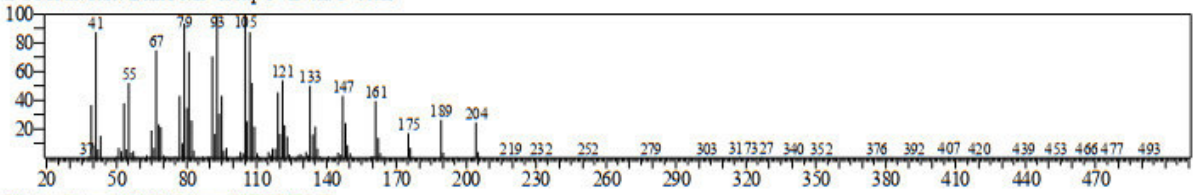
Hit#:4 Entry:101086 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C15 H24 CAS:23986-74-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Germacrene D $$ 1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-8-(1-methylethyl)-, [s-(E,E)]- (CAS) Germacra-1(10),4(15),5-triene, (-)- (CAS) (-)-Ge



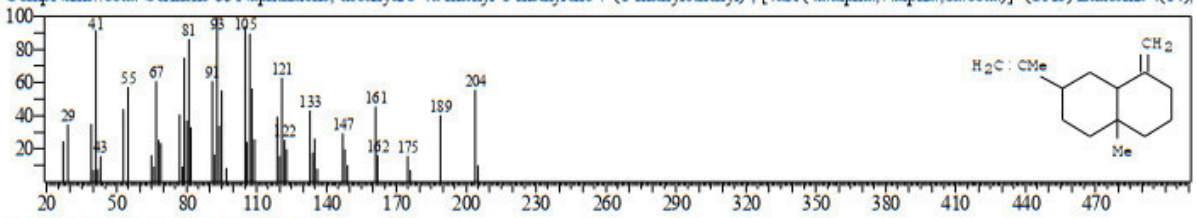
Hit#:5 Entry:17164 Library:NIST08s.LIB
SI:91 Formula:C15H24 CAS:483-75-0 MolWeight:204 RetIndex:1440
CompName:Naphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)- $$ .alpha.-Amorphene $$ 1-Isopropyl-4,7-dimethyl-1,2,4a,5,6,8a-hexahydro



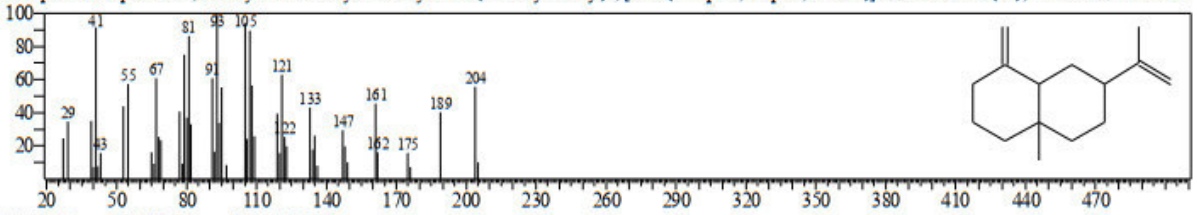
<< Target >>
Line#:21 R.Time:28.430(Scan#:5087) MassPeaks:316
RawMode:Averaged 28.425-28.435(5086-5088) BasePeak:105.10(17965)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



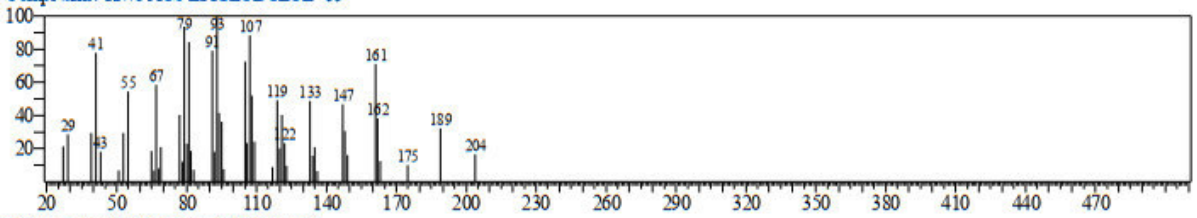
Hit#:1 Entry:100909 Library:WILEY7.LIB
SI:96 Formula:C15 H24 CAS:17066-67-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.beta.-Selinene $$ Naphthalene, decahydro-4a-methyl-1-methylene-7-(1-methylethenyl)-, [4aR-(4a.alpha.,7.alpha.,8a.beta.)]- (CAS) Eudesma-4(14),



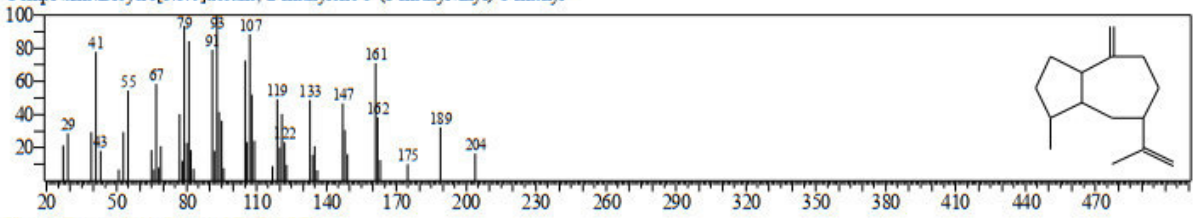
Hit#:2 Entry:17108 Library:NIST08s.LIB
SI:96 Formula:C15H24 CAS:17066-67-0 MolWeight:204 RetIndex:1469
CompName:Naphthalene, decahydro-4a-methyl-1-methylene-7-(1-methylethenyl)-, [4aR-(4a.alpha.,7.alpha.,8a.beta.)]- $$ Eudesma-4(14),11-diene $$ .beta.-Eud



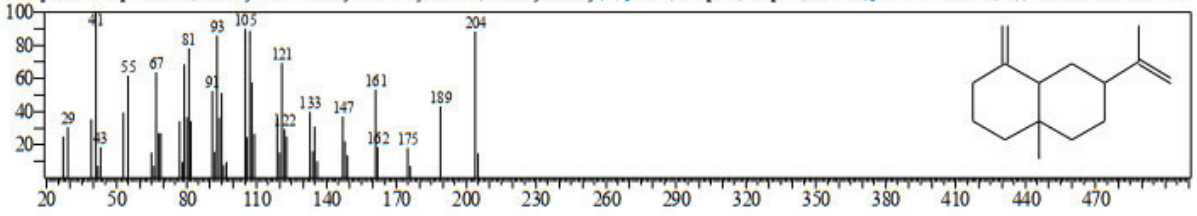
Hit#:3 Entry:100357 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H24 CAS:0-00-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:"KW3 AUS EPIGLOBULOL" $$



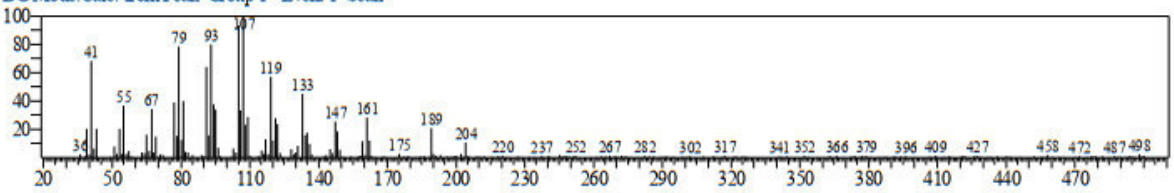
Hit#:4 Entry:45422 Library:NIST08.LIB
SI:94 Formula:C15H24 CAS:0-00-0 MolWeight:204 RetIndex:1456
CompName:Bicyclo[5.3.0]decane, 2-methylene-5-(1-methylvinyl)-8-methyl-



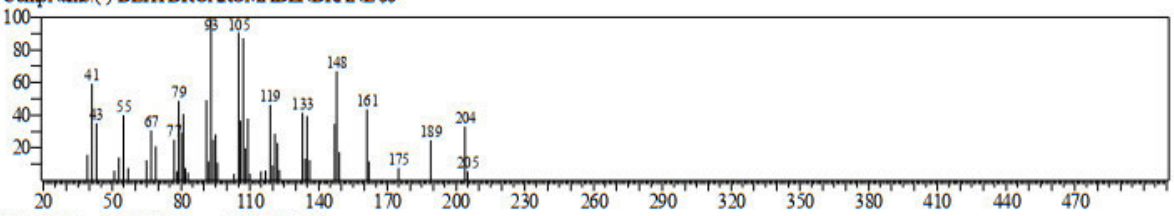
Hit#:5 Entry:45383 Library:NIST08.LIB
SI:94 Formula:C15H24 CAS:17066-67-0 MolWeight:204 RetIndex:1469
CompName:Naphthalene, decahydro-4a-methyl-1-methylene-7-(1-methylethenyl)-, [4aR-(4a.alpha.,7.alpha.,8a.beta.)]- $$ Eudesma-4(14),11-diene $$ .beta.-Eud



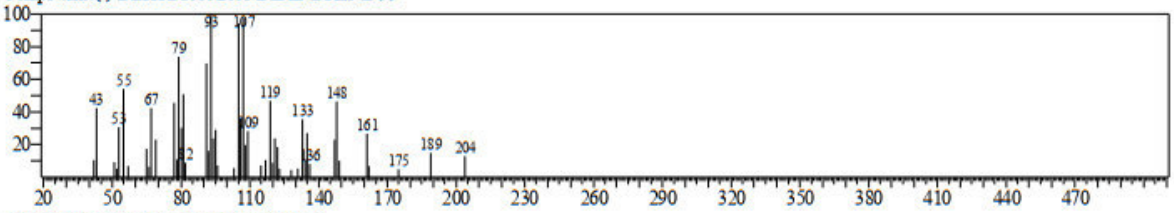
<< Target >>
Line#:22 R.Time:28.550(Scan#:5111) MassPeaks:301
RawMode:Averaged 28.545-28.555(5110-5112) BasePeak:107.10(2764)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



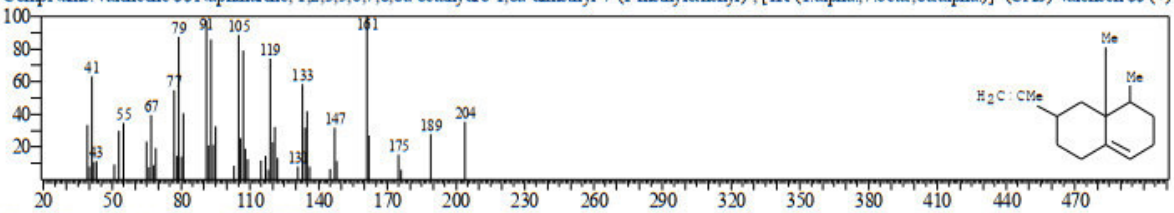
Hit#:1 Entry:100330 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C15 H24 CAS:0-00-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:(-)-DEHYDROAROMADENDRANE $$



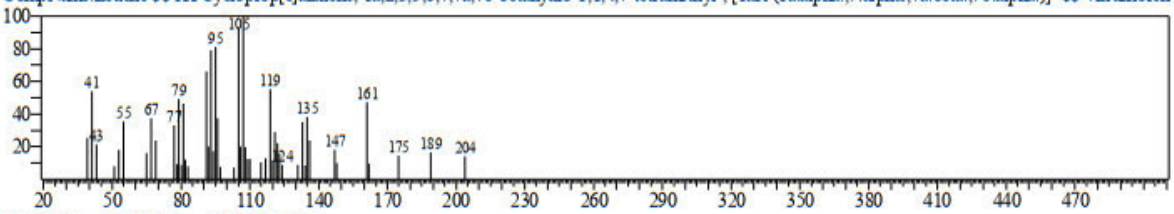
Hit#:2 Entry:100289 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C15 H24 CAS:0-00-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:(-)-DEHYDROAROMADENDRENE $$



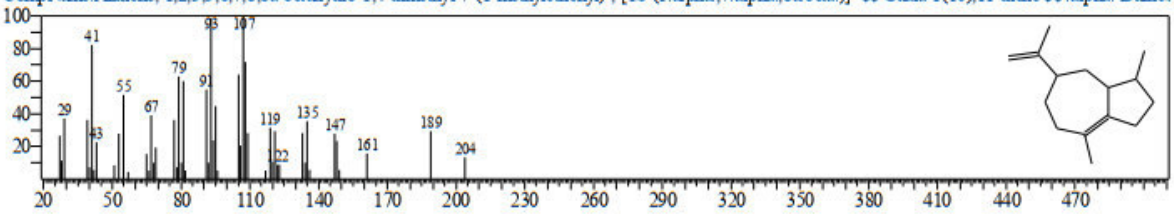
Hit#:3 Entry:100933 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C15 H24 CAS:4630-07-3 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Valencene $$ Naphthalene, 1,2,3,5,6,7,8,8a-octahydro-1,8a-dimethyl-7-(1-methylethenyl)-, [1R-(1.alpha.,7.beta.,8a.alpha.)]- (CAS) Valencen $$ (+)



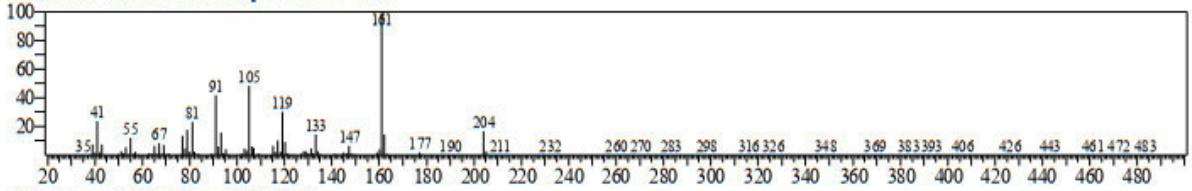
Hit#:4 Entry:101022 Library:WILEY7.LIB
SI:89 Formula:C15 H24 CAS:21747-46-6 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Ledene $$ 1H-Cycloprop[e]azulene, 1a,2,3,5,6,7,7a,7b-octahydro-1,1,4,7-tetramethyl-, [1aR-(1a.alpha.,7.alpha.,7a.beta.,7b.alpha.)]- $$ Viridiflorene



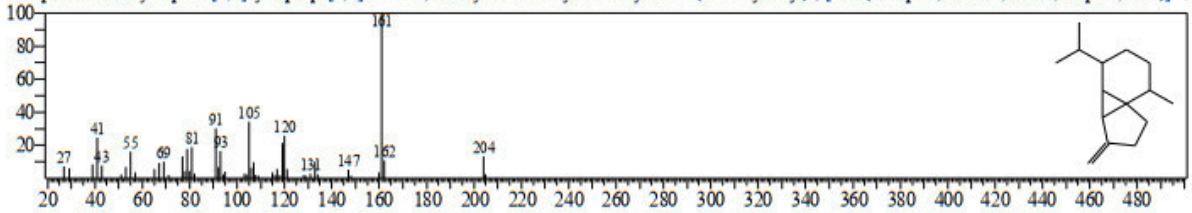
Hit#:5 Entry:17128 Library:NIST08s.LIB
SI:89 Formula:C15H24 CAS:3691-11-0 MolWeight:204 RetIndex:1490
CompName:Azulene, 1,2,3,5,6,7,8,8a-octahydro-1,4-dimethyl-7-(1-methylethenyl)-, [1S-(1.alpha.,7.alpha.,8a.beta.)]- $$ Guaia-1(10),11-diene $$ .alpha.-Bulnes



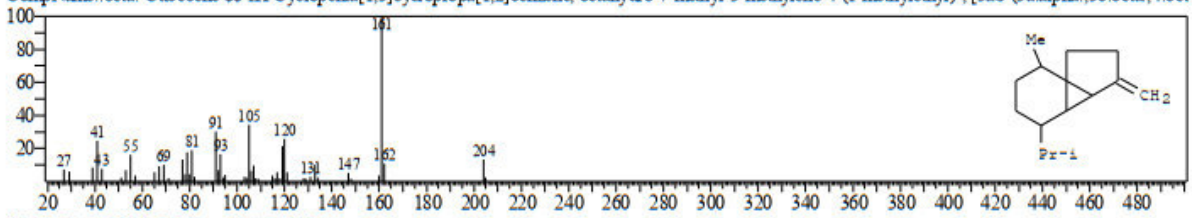
<< Target >>
Line#:23 R.Time:28.660(Scan#:5133) MassPeaks:310
RawMode:Averaged 28.655-28.665(5132-5134) BasePeak:161.15(34061)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



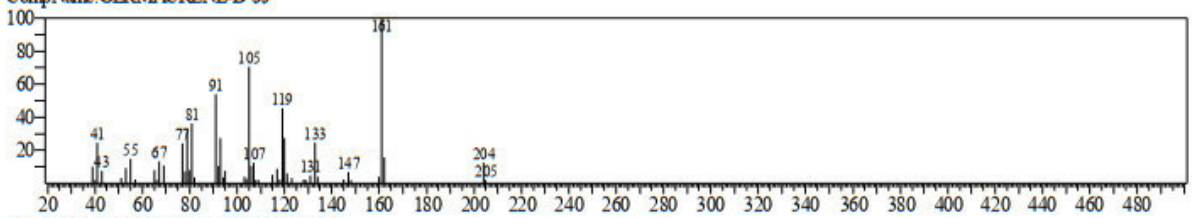
Hit#:1 Entry:45509 Library:NIST08.LIB
SI:93 Formula:C15H24 CAS:13744-15-5 MolWeight:204 RetIndex:1339
CompName:1H-Cyclopenta[1,3]cyclopropa[1,2]benzene, octahydro-7-methyl-3-methylene-4-(1-methylethyl)-, [3aS-(3a.alpha.,3b.beta.,4.beta.,7.alpha.,7aS*)]- S



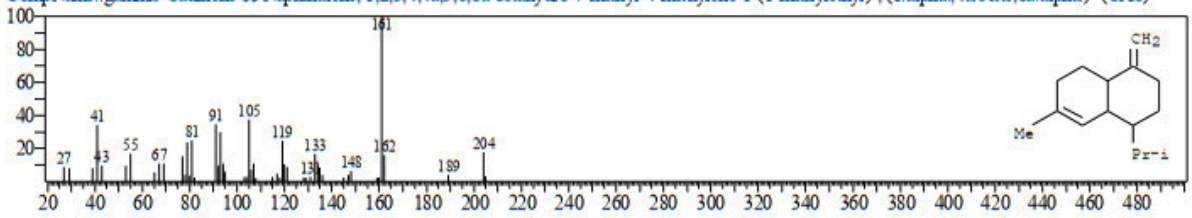
Hit#:2 Entry:101072 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C15 H24 CAS:13744-15-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.beta.-Cubebene $$ 1H-Cyclopenta[1,3]cyclopropa[1,2]benzene, octahydro-7-methyl-3-methylene-4-(1-methylethyl)-, [3aS-(3a.alpha.,3b.beta.,4.bet



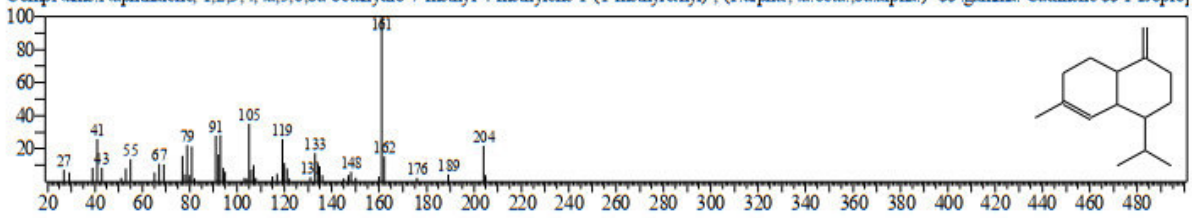
Hit#:3 Entry:100272 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C15 H24 CAS:23986-74-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:GERMACRENE-D $$



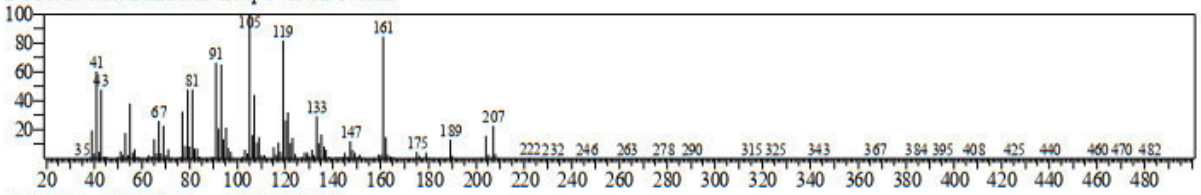
Hit#:4 Entry:100880 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C15 H24 CAS:39029-41-9 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.gamma.-Cadinene $$ Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.beta.,8a.alpha.)- (CAS)



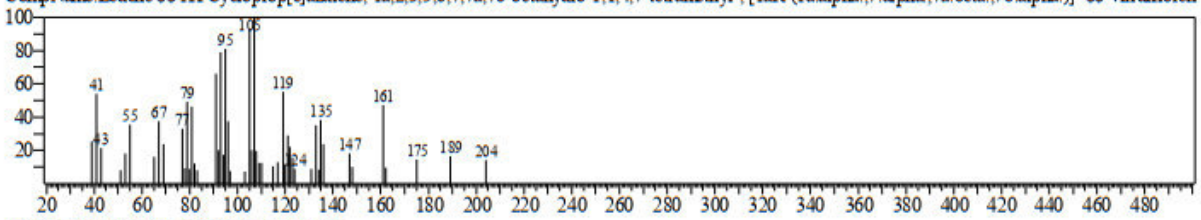
Hit#:5 Entry:17165 Library:NIST08s.LIB
SI:89 Formula:C15H24 CAS:39029-41-9 MolWeight:204 RetIndex:1435
CompName:Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.beta.,8a.alpha.)- $$ .gamma.-Cadinene $$ 1-Isopro



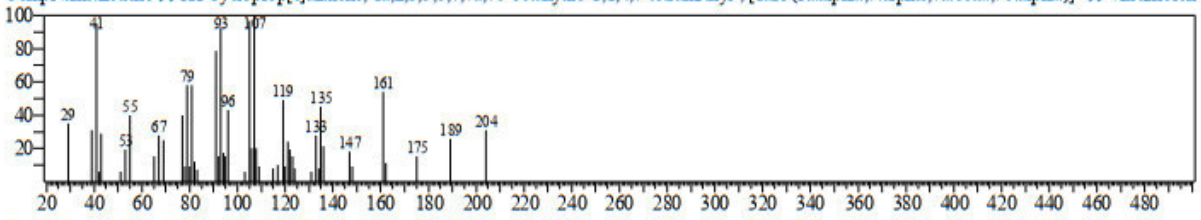
<< Target >>
Line#:24 R.Time:28.855(Scan#:5172) MassPeaks:308
RawMode:Averaged 28.850-28.860(5171-5173) BasePeak:105.10(81321)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



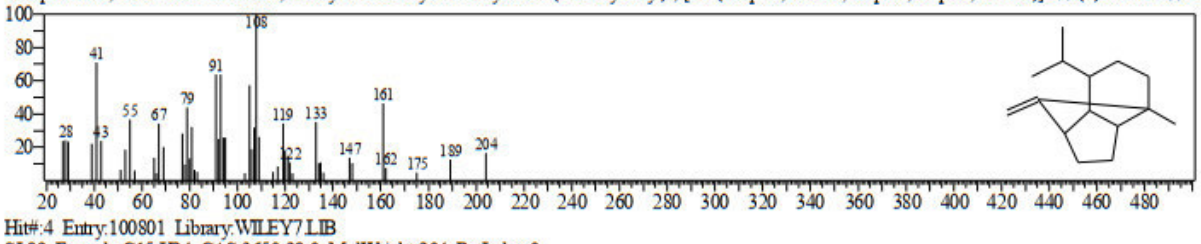
Hit#:1 Entry:101022 Library:WILEY7.LIB
SI:89 Formula:C15 H24 CAS:21747-46-6 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Ledene $$ 1H-Cycloprop[e]azulene, 1a,2,3,5,6,7,7a,7b-octahydro-1,1,4,7-tetramethyl-, [1aR-(1a.alpha.,7.alpha.,7a.beta.,7b.alpha.)]- $$ Viridiflorene



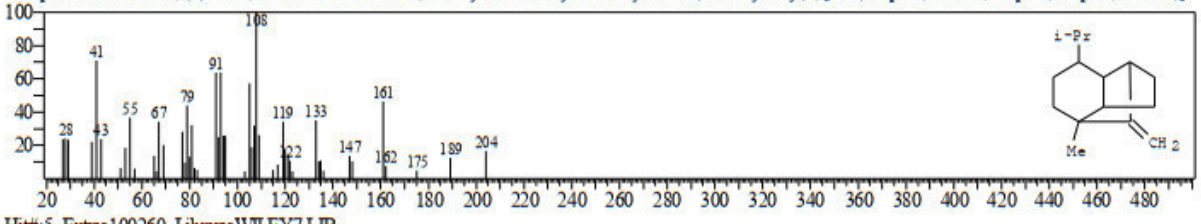
Hit#:2 Entry:101020 Library:WILEY7.LIB
SI:89 Formula:C15 H24 CAS:21747-46-6 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Ledene $$ 1H-Cycloprop[e]azulene, 1a,2,3,5,6,7,7a,7b-octahydro-1,1,4,7-tetramethyl-, [1aR-(1a.alpha.,7.alpha.,7a.beta.,7b.alpha.)]- $$ Viridiflorene



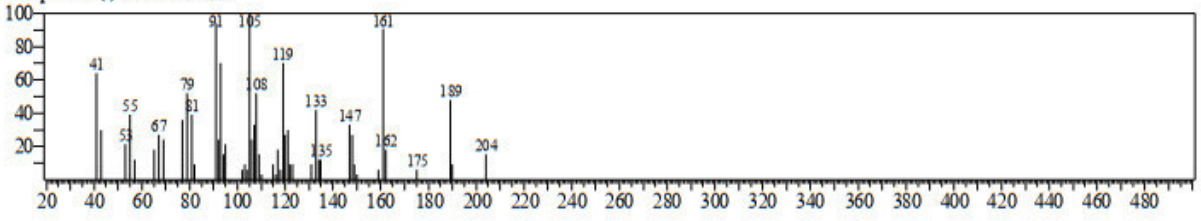
Hit#:3 Entry:45464 Library:NIST08.LIB
SI:89 Formula:C15H24 CAS:3650-28-0 MolWeight:204 RetIndex:1339
CompName:1,4-Methano-1H-indene, octahydro-4-methyl-8-methylene-7-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,3a.beta.,4.alpha.,7.alpha.,7a.beta.)]- $$ (+)-Sativene $$ 1



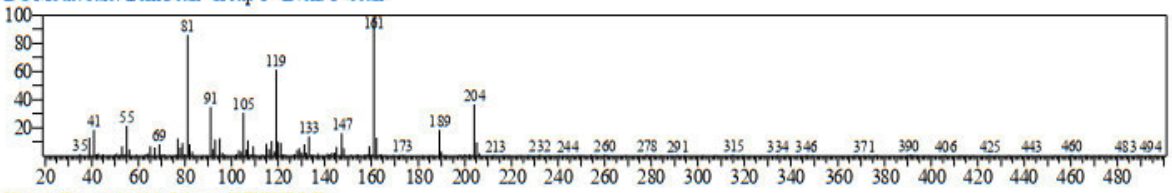
Hit#:4 Entry:100801 Library:WILEY7.LIB
SI:89 Formula:C15 H24 CAS:3650-28-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:SATIVEN, (+)- $$ 1,4-Methano-1H-indene, octahydro-4-methyl-8-methylene-7-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,3a.beta.,4.alpha.,7.alpha.,7a.beta.)]-



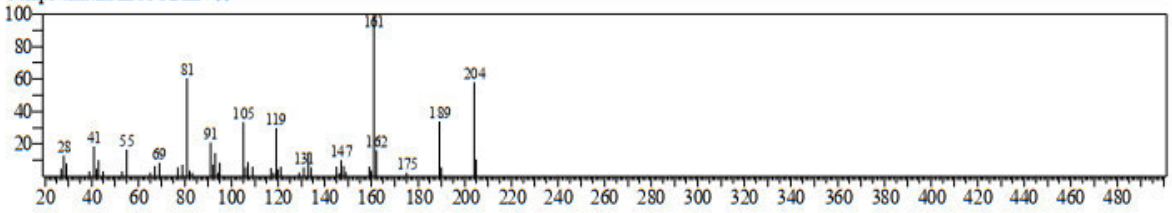
Hit#:5 Entry:100260 Library:WILEY7.LIB
SI:88 Formula:C15 H24 CAS:0-00-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:(-)-Simulatene $$



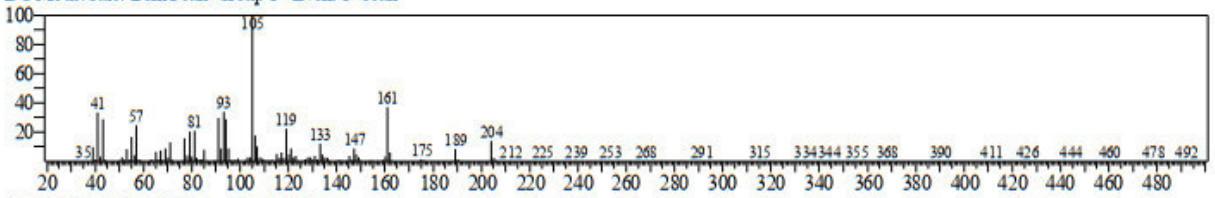
<<Target>>
Line#:25 R.Time:29.025(Scan#:5206) MassPeaks:277
RawMode:Averaged 29.020-29.030(5205-5207) BasePeak:161.15(5430)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



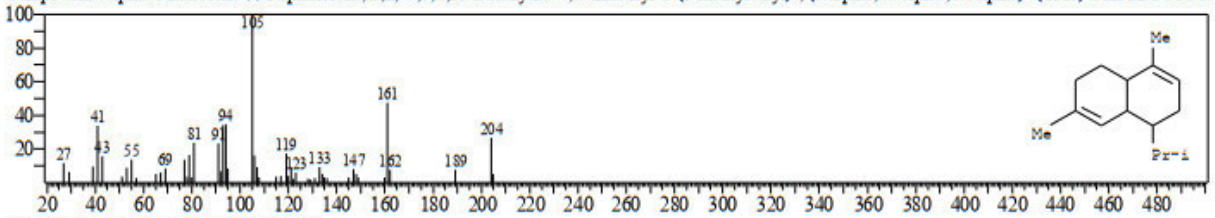
Hit#:1 Entry:100928 Library:WILEY7.LIB
SI:86 Formula:C15 H24 CAS:41702-63-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:EPIZONAREN $$



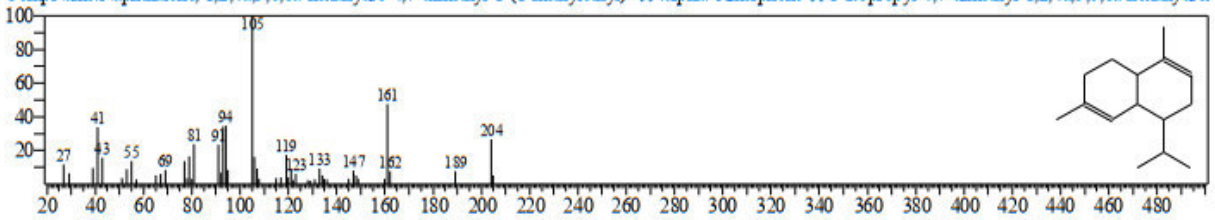
<< Target >>
Line#:26 R.Time:29.115(Scan#:5224) MassPeaks:307
RawMode:Averaged 29.110-29.120(5223-5225) BasePeak:105.10(60211)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



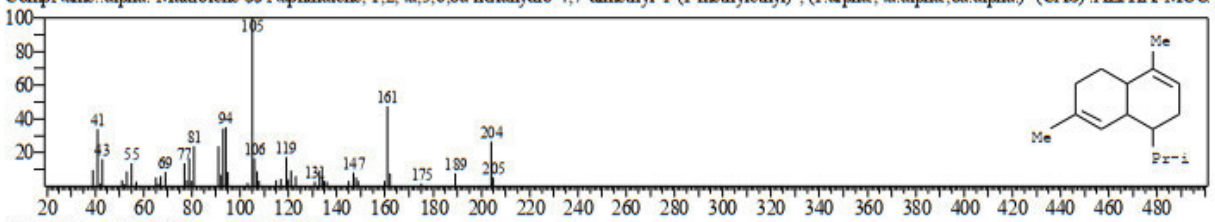
Hit#:1 Entry:100962 Library:WILEY7.LIB
SI:91 Formula:C15 H24 CAS:31983-22-9 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Muurolene $$ Naphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha.,8a.alpha.)- (CAS) .ALPHA.-MUU



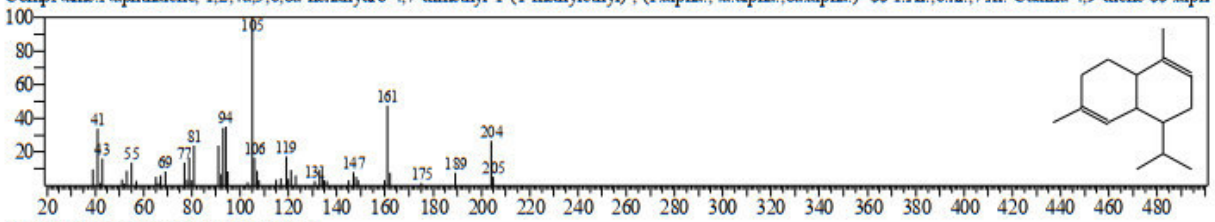
Hit#:2 Entry:45453 Library:NIST08.LIB
SI:91 Formula:C15H24 CAS:483-75-0 MolWeight:204 RetIndex:1440
CompName:Naphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)- $$ .alpha.-Amorphene $$ 1-Isopropyl-4,7-dimethyl-1,2,4a,5,6,8a-hexahydro



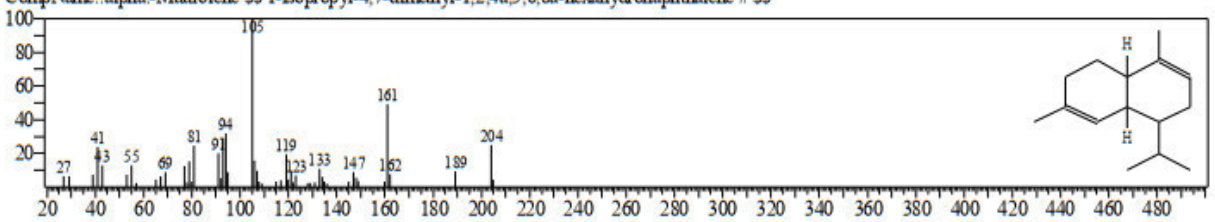
Hit#:3 Entry:100964 Library:WILEY7.LIB
SI:91 Formula:C15 H24 CAS:31983-22-9 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Muurolene $$ Naphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha.,8a.alpha.)- (CAS) .ALPHA.-MUU



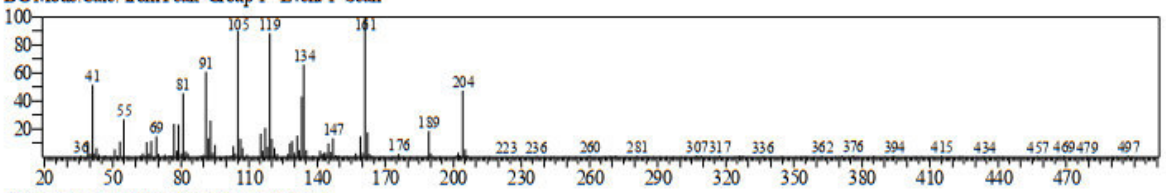
Hit#:4 Entry:17124 Library:NIST08s.LIB
SI:91 Formula:C15H24 CAS:31983-22-9 MolWeight:204 RetIndex:1440
CompName:Naphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha.,8a.alpha.)- $$ 1.Xi.,6.xi.,7.xi.-Cadina-4,9-diene $$ alph



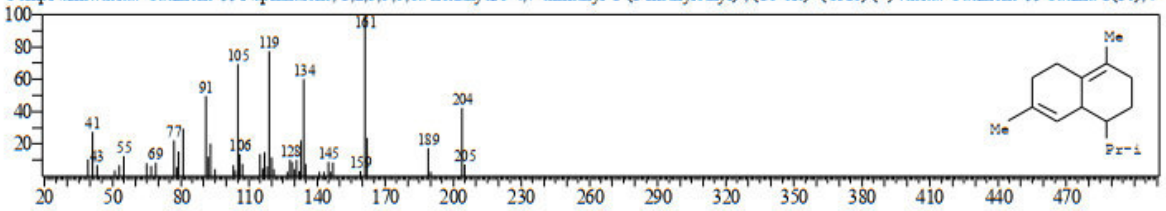
Hit#:5 Entry:45452 Library:NIST08.LIB
SI:90 Formula:C15H24 CAS:10208-80-7 MolWeight:204 RetIndex:1440
CompName:.alpha.-Muurolene $$ 1-Isopropyl-4,7-dimethyl-1,2,4a,5,6,8a-hexahydronaphthalene # $$



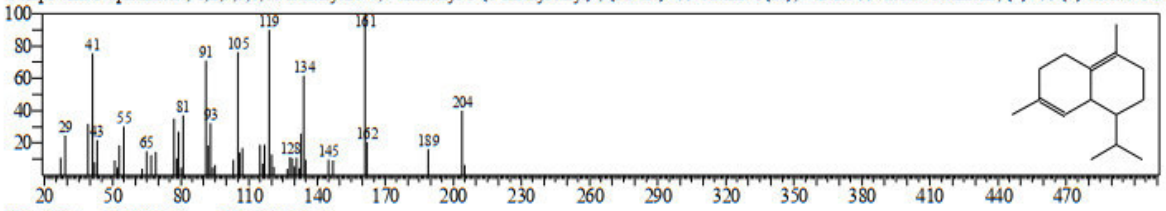
<< Target >>
Line#:27 R.Time:29.370(Scan#:5275) MassPeaks:282
RawMode:Averaged 29.365-29.375(5274-5276) BasePeak:161.15(4819)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



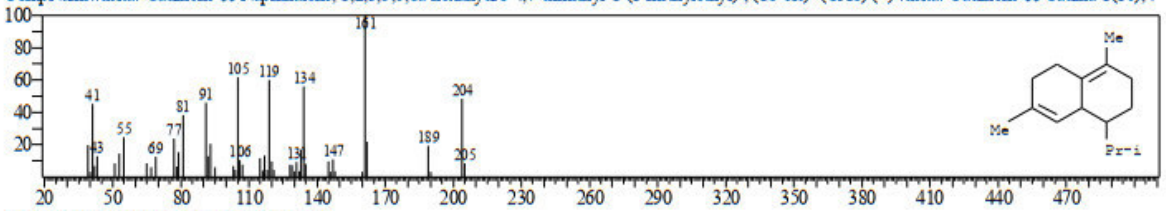
Hit#:1 Entry:100891 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C15 H24 CAS:483-76-1 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.delta.-Cadinene $$ Naphthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1S-cis)- (CAS) (+)-.delta.-Cadinene $$ Cadina-1(10),4-



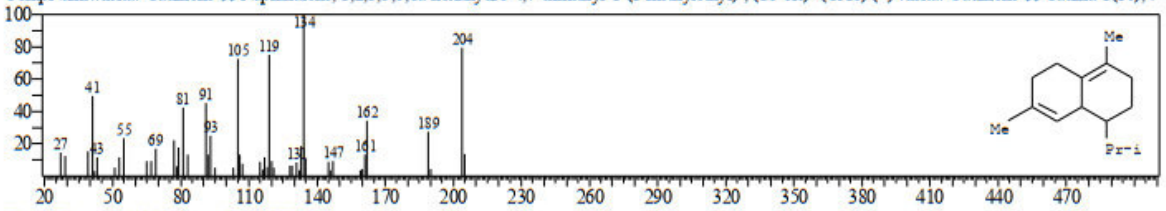
Hit#:2 Entry:17169 Library:NIST08s.LIB
SI:91 Formula:C15H24 CAS:483-76-1 MolWeight:204 RetIndex:1469
CompName:Naphthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1S-cis)- $$ Cadina-1(10),4-diene $$ .delta.-Cadinene, (+)- $$ (+)-.delta.-Ca



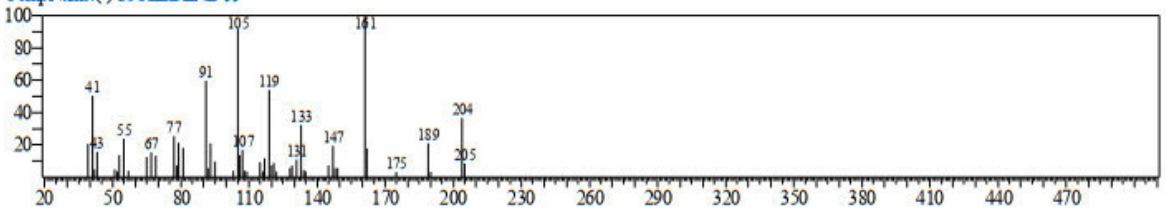
Hit#:3 Entry:100888 Library:WILEY7.LIB
SI:91 Formula:C15 H24 CAS:483-76-1 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.delta.-Cadinene $$ Naphthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1S-cis)- (CAS) (+)-.delta.-Cadinene $$ Cadina-1(10),4-



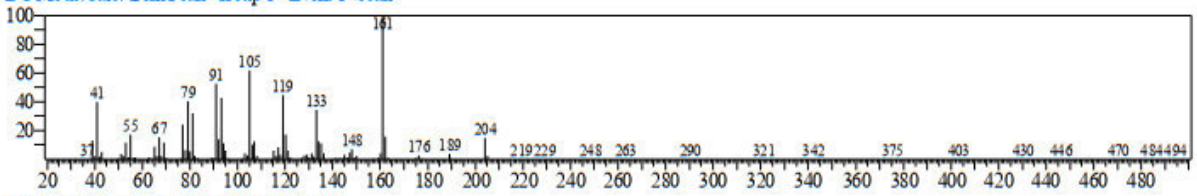
Hit#:4 Entry:100890 Library:WILEY7.LIB
SI:88 Formula:C15 H24 CAS:483-76-1 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.delta.-Cadinene $$ Naphthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1S-cis)- (CAS) (+)-.delta.-Cadinene $$ Cadina-1(10),4-



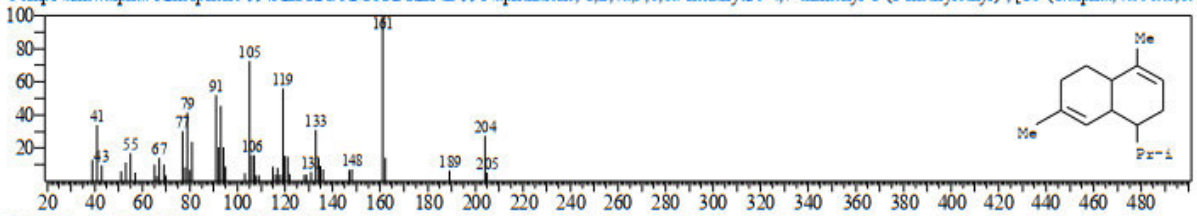
Hit#:5 Entry:100333 Library:WILEY7.LIB
SI:88 Formula:C15 H24 CAS:0-00-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:(-)-ISOLEDENE $$



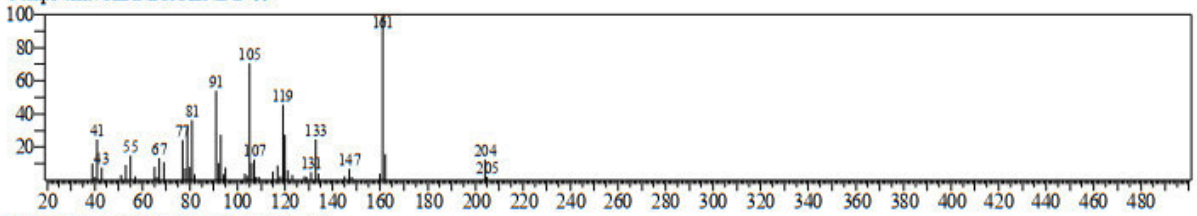
<< Target >>
Line#:28 R.Time:29.605(Scan#:5322) MassPeaks:287
RawMode:Averaged 29.600-29.610(5321-5323) BasePeak:161.15(96017)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



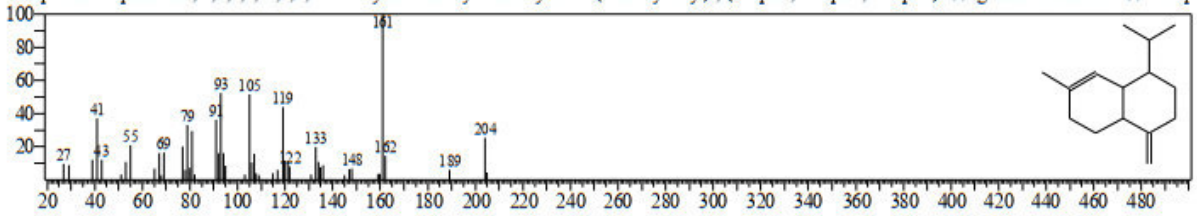
Hit#:1 Entry:100954 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H24 CAS:23515-88-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Amorphene $$ .ALPHA. AMORPHENE $$ Naphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,4a.beta.,8



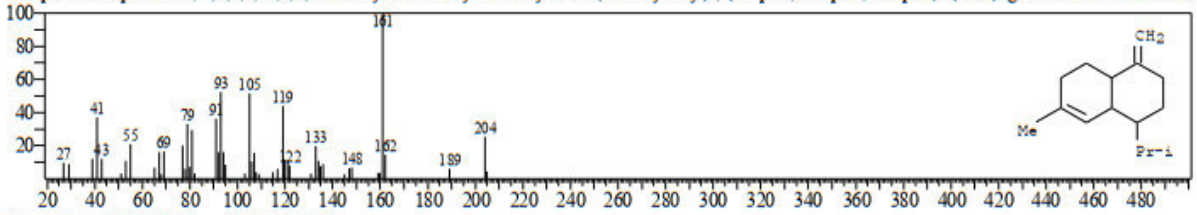
Hit#:2 Entry:100272 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H24 CAS:23986-74-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:GERMACRENE-D $$



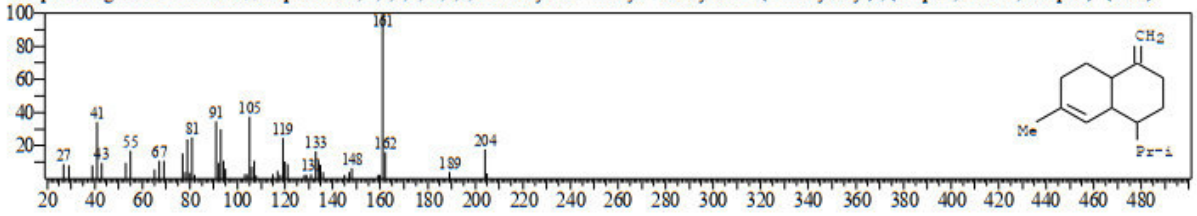
Hit#:3 Entry:17160 Library:NIST08s.LIB
SI:93 Formula:C15H24 CAS:30021-74-0 MolWeight:204 RetIndex:1435
CompName:Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha.,8a.alpha.)- $$ .gamma.-Muurolene $$ 1-Isop



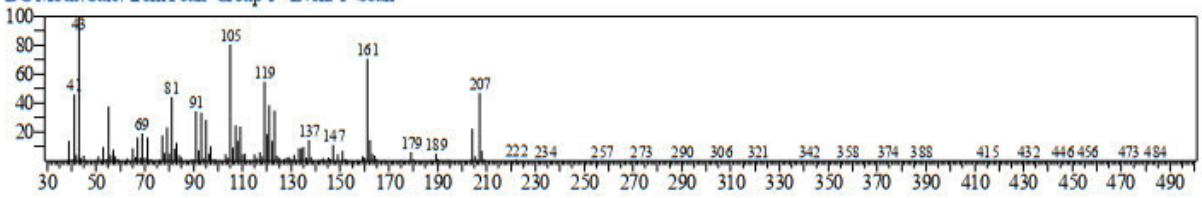
Hit#:4 Entry:100949 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C15 H24 CAS:30021-74-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha.,8a.alpha.)- (CAS) .gamma.-Muurolene $$ .C



Hit#:5 Entry:100880 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C15 H24 CAS:39029-41-9 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.gamma.-Cadinene $$ Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.beta.,8a.alpha.)- (CAS)

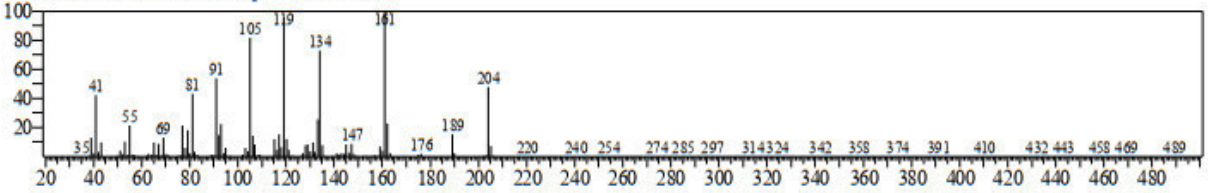


<< Target >>
Line#:29 R.Time:29.675(Scan#:5336) MassPeaks:316
RawMode:Averaged 29.670-29.680(5335-5337) BasePeak:43.00(24410)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan

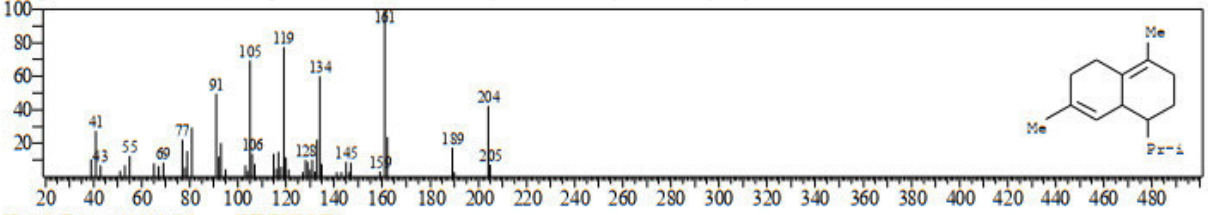


No hit compound

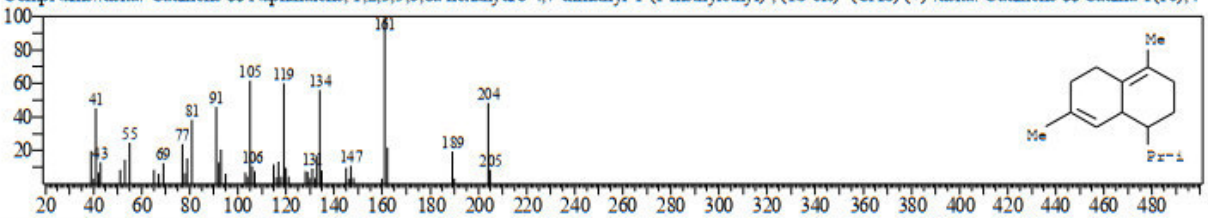
<< Target >>
Line#:30 R.Time:30.040(Scan#:5409) MassPeaks:336
RawMode:Averaged 30.035-30.045(5408-5410) BasePeak:161.15(241314)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



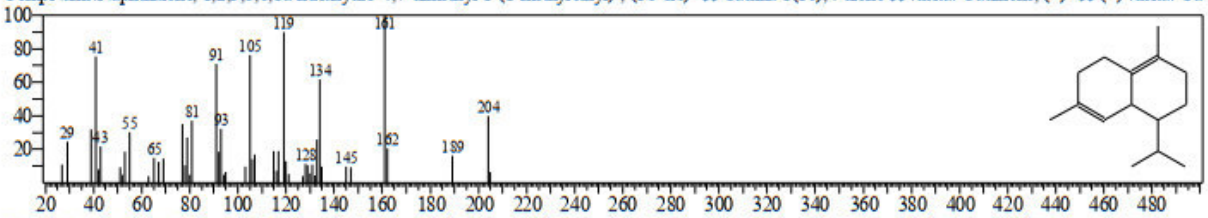
Hit#:1 Entry:100891 Library:WILEY7.LIB
SI:95 Formula:C15 H24 CAS:483-76-1 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.delta.-Cadinene $$ Naphthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1S-cis)- (CAS) (+)-.delta.-Cadinene $$ Cadina-1(10),4-



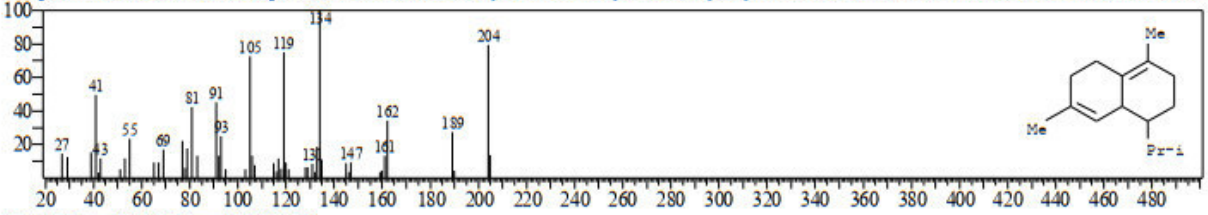
Hit#:2 Entry:100888 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H24 CAS:483-76-1 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.delta.-Cadinene $$ Naphthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1S-cis)- (CAS) (+)-.delta.-Cadinene $$ Cadina-1(10),4-



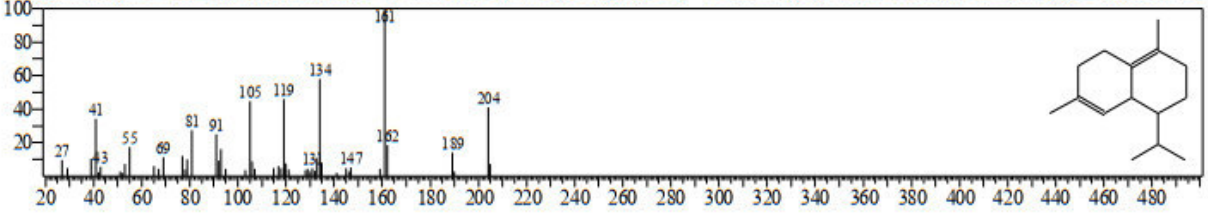
Hit#:3 Entry:17169 Library:NIST08s.LIB
SI:92 Formula:C15H24 CAS:483-76-1 MolWeight:204 RetIndex:1469
CompName:Naphthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1S-cis)- $$ Cadina-1(10),4-diene $$ .delta.-Cadinene, (+)- $$ (+)-.delta.-Ca



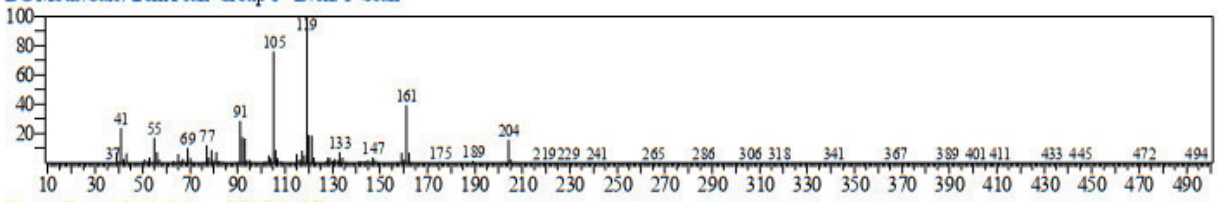
Hit#:4 Entry:100890 Library:WILEY7.LIB
SI:91 Formula:C15 H24 CAS:483-76-1 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.delta.-Cadinene $$ Naphthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1S-cis)- (CAS) (+)-.delta.-Cadinene $$ Cadina-1(10),4-



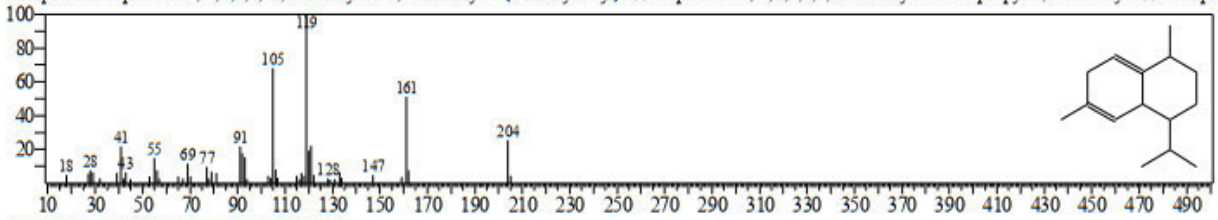
Hit#:5 Entry:45523 Library:NIST08.LIB
SI:89 Formula:C15H24 CAS:483-76-1 MolWeight:204 RetIndex:1469
CompName:Naphthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1S-cis)- $$ Cadina-1(10),4-diene $$ .delta.-Cadinene, (+)- $$ (+)-.delta.-Ca



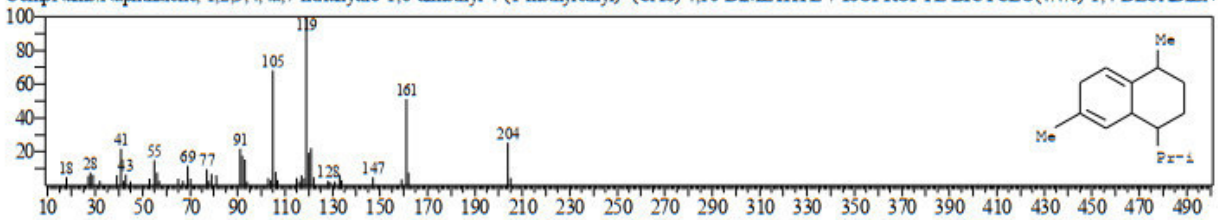
<< Target >>
Line#:31 R.Time:30.325(Scan#:5466) MassPeaks:278
RawMode:Averaged 30.320-30.330(5465-5467) BasePeak:119.10(38019)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



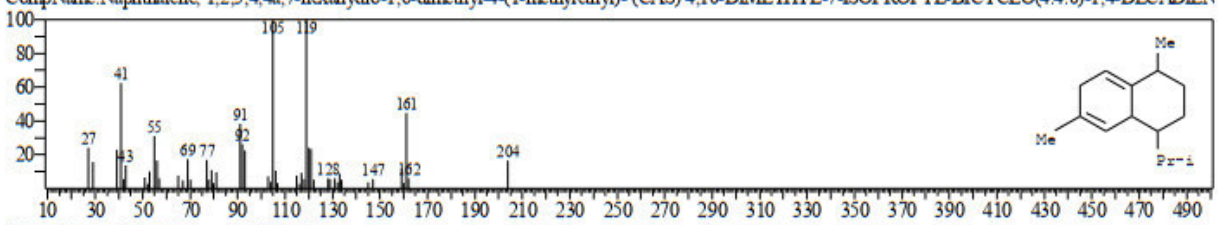
Hit#:1 Entry:17140 Library:NIST08s.LIB
SI:95 Formula:C15H24 CAS:16728-99-7 MolWeight:204 RetIndex:1440
CompName:Naphthalene, 1,2,3,4,4a,7-hexahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)- $$ Naphthalene, 1,2,3,4,6,8a-hexahydro-1-isopropyl-4,7-dimethyl- $$ 4-Isopr



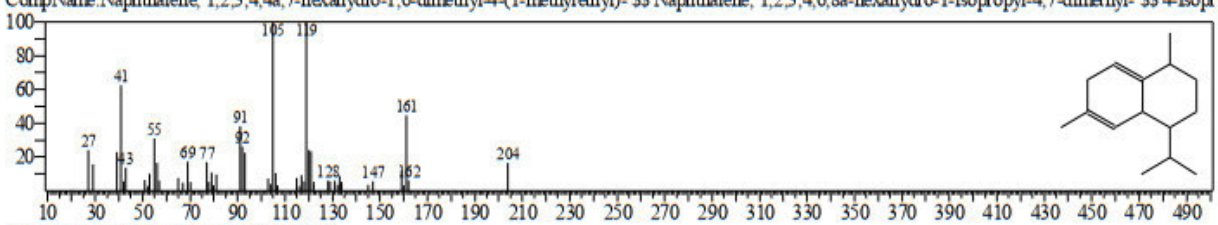
Hit#:2 Entry:100930 Library:WILEY7.LIB
SI:95 Formula:C15 H24 CAS:16728-99-7 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Naphthalene, 1,2,3,4,4a,7-hexahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) 4,10-DIMETHYL-7-ISOPROPYL-BICYCLO(4.4.0)-1,4-DECADIEN



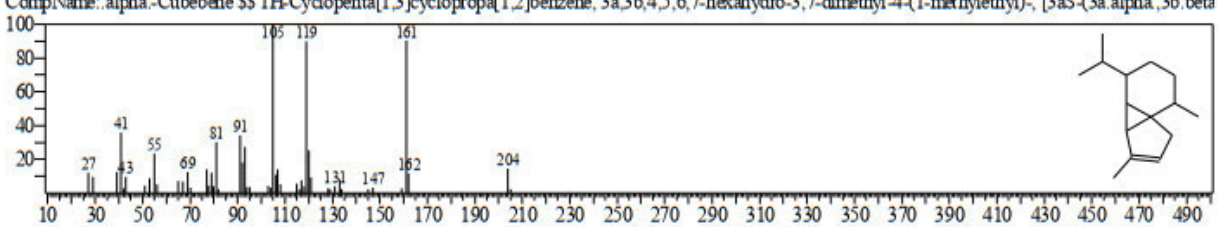
Hit#:3 Entry:100931 Library:WILEY7.LIB
SI:91 Formula:C15 H24 CAS:16728-99-7 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Naphthalene, 1,2,3,4,4a,7-hexahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) 4,10-DIMETHYL-7-ISOPROPYL-BICYCLO(4.4.0)-1,4-DECADIEN



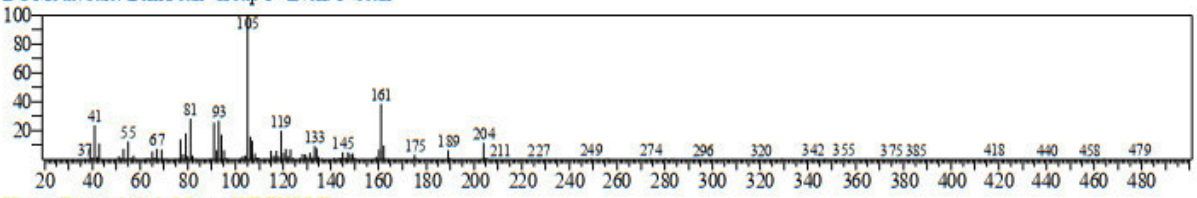
Hit#:4 Entry:45474 Library:NIST08.LIB
SI:91 Formula:C15H24 CAS:16728-99-7 MolWeight:204 RetIndex:1440
CompName:Naphthalene, 1,2,3,4,4a,7-hexahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)- $$ Naphthalene, 1,2,3,4,6,8a-hexahydro-1-isopropyl-4,7-dimethyl- $$ 4-Isopr



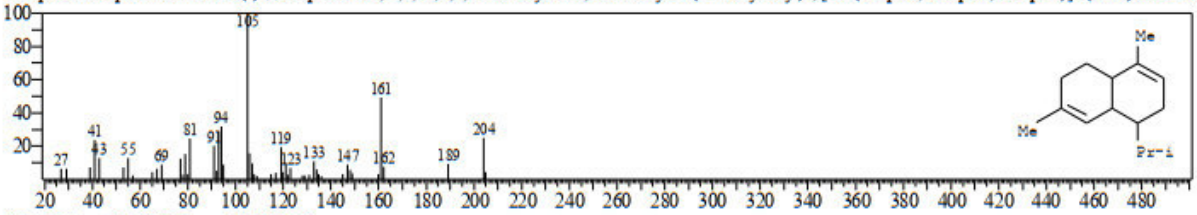
Hit#:5 Entry:17125 Library:NIST08s.LIB
SI:90 Formula:C15H24 CAS:17699-14-8 MolWeight:204 RetIndex:1344
CompName:.alpha.-Cubebene $$ 1H-Cyclopenta[1,3]cyclopropa[1,2]benzene, 3a,3b,4,5,6,7-hexahydro-3,7-dimethyl-4-(1-methylethyl)-, [3aS-(3a.alpha.,3b.beta



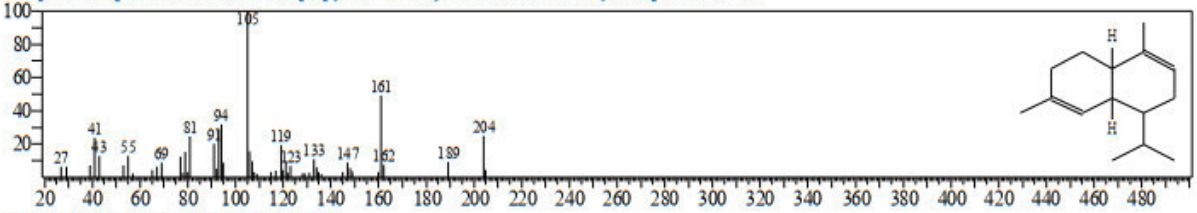
<< Target >>
Line#:32 R.Time:30.535(Scan#:5508) MassPeaks:275
RawMode:Averaged 30.530-30.540(5507-5509) BasePeak:105.05(15214)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



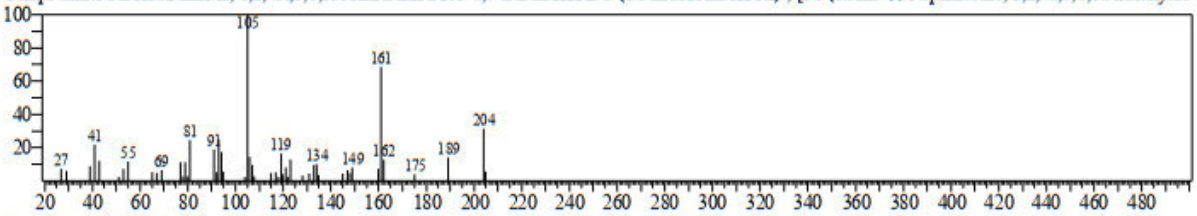
Hit#:1 Entry:100213 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C15 H24 CAS:10208-80-7 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Muurolene-(-) $$ Naphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,4a.alpha.,8a.alpha.)]- (CAS) .ALPH



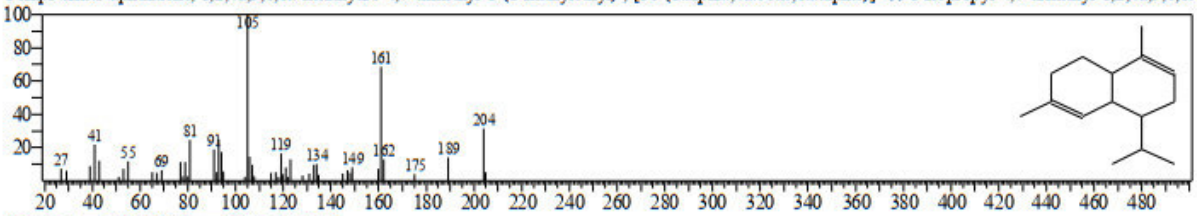
Hit#:2 Entry:45452 Library:NIST08.LIB
SI:93 Formula:C15H24 CAS:10208-80-7 MolWeight:204 RetIndex:1440
CompName:.alpha.-Muurolene $$ 1-Isopropyl-4,7-dimethyl-1,2,4a,5,6,8a-hexahydronaphthalene # $$



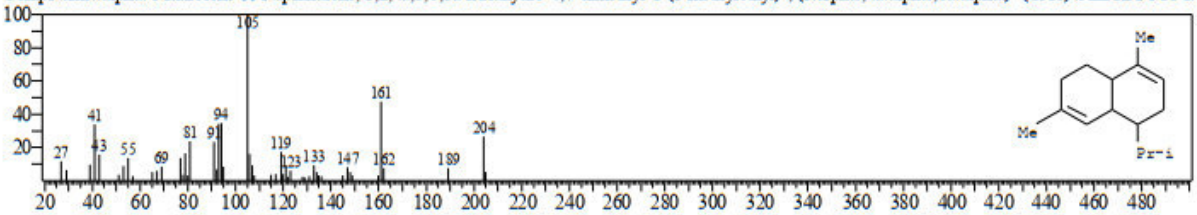
Hit#:3 Entry:100370 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C15 H24 CAS:24406-05-1 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:NAPHTHALENE, 1,2,4A,5,6,8A-HEXAHYDRO-4,7-DIMETHYL-1-(1-METHYLETHYL)-, [1S-(1.ALP $$ Naphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahydro



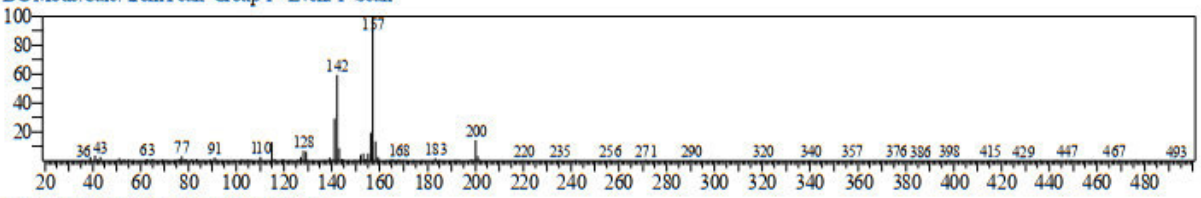
Hit#:4 Entry:45454 Library:NIST08.LIB
SI:92 Formula:C15H24 CAS:24406-05-1 MolWeight:204 RetIndex:1440
CompName:Naphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,4a.beta.,8a.alpha.)]- $$ 1-Isopropyl-4,7-dimethyl-1,2,4a,5,6,8



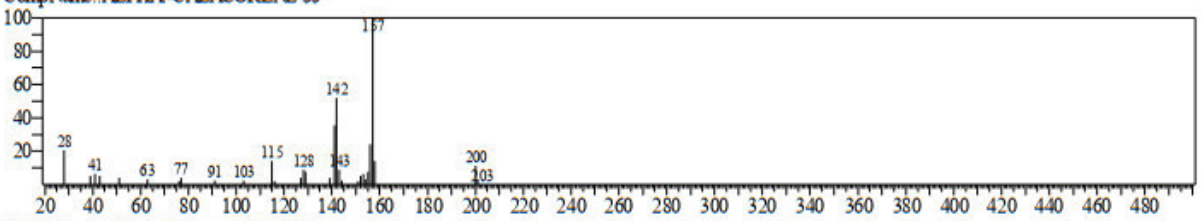
Hit#:5 Entry:100962 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C15 H24 CAS:31983-22-9 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Muurolene $$ Naphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha.,8a.alpha.)- (CAS) .ALPHA.-MUU



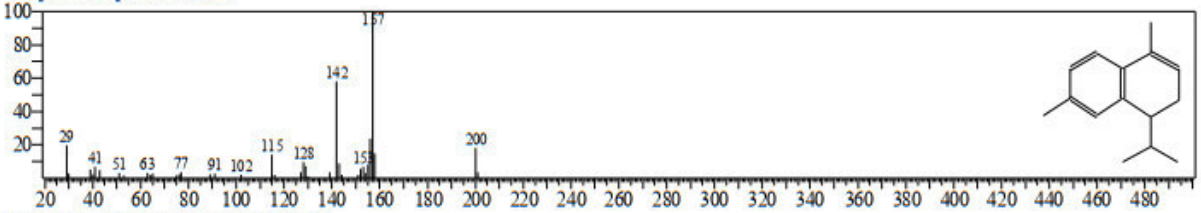
<< Target >>
Line#:33 R.Time:30.755(Scan#:5552) MassPeaks:314
RawMode:Averaged 30.750-30.760(5551-5553) BasePeak:157.10(14257)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



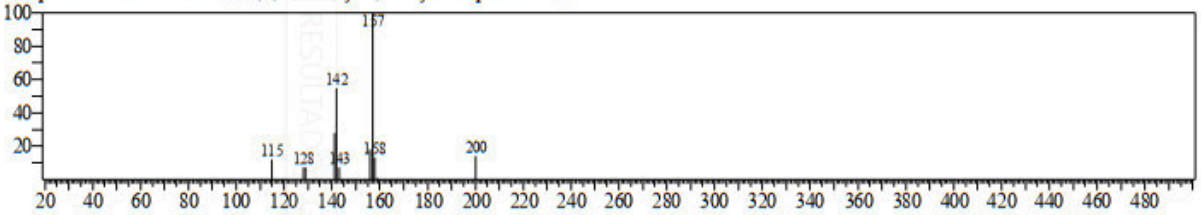
Hit#:1 Entry:95638 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C15 H20 CAS:21391-99-1 MolWeight:200 RetIndex:0
CompName:.ALPHA-CALACORENE $$



Hit#:2 Entry:43092 Library:NIST08.LIB
SI:88 Formula:C15H20 CAS:0-00-0 MolWeight:200 RetIndex:1547
CompName:.alpha.-Calacorene

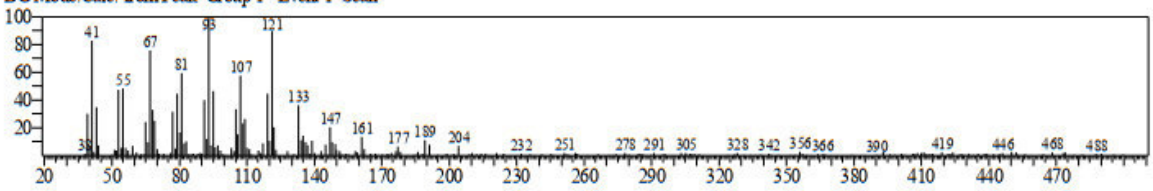


Hit#:3 Entry:62905 Library:WILEY7.LIB
SI:88 Formula:C13 H16 CAS:0-00-0 MolWeight:172 RetIndex:0
CompName:CALACORENE $$ 1,1,6-trimethyl-1,2-dihydro naphthalene $$

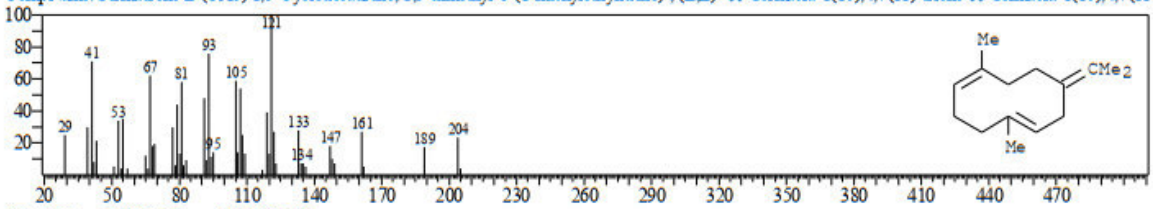


RESULTADO-GC-MASAS - PDF-XChange Editor

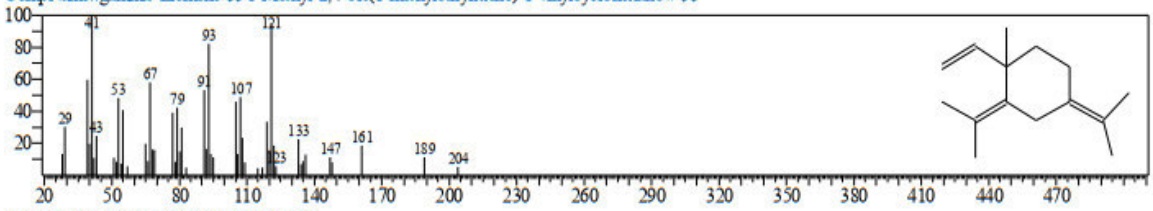
<< Target >>
Line#:34 R.Time:31.215(Scan#:5644) MassPeaks:250
RawMode:Averaged 31.210-31.220(5643-5645) BasePeak:93.05(1803)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



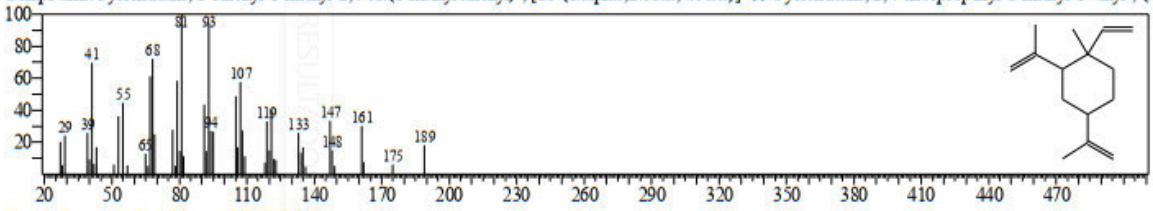
Hit#:1 Entry:100751 Library:WILEY7.LIB
SI:89 Formula:C15 H24 CAS:15423-57-1 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Germacrene B (CAS) 1,5-Cyclodecadiene, 1,5-dimethyl-8-(1-methylethylidene)-, (E,E)- $$ Germacra-1(10),4,7(11)-triene $$ Germacra-1(10),4,7(11



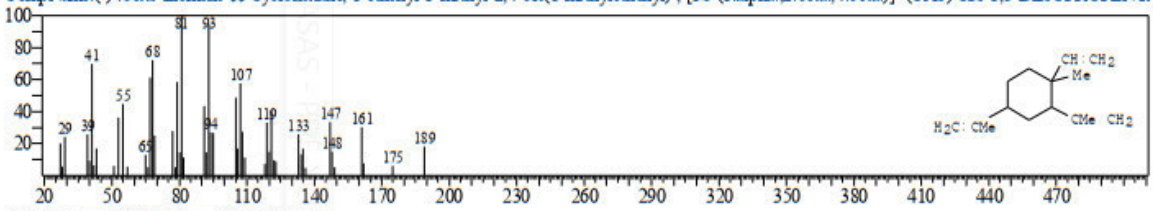
Hit#:2 Entry:17079 Library:NIST08s.LIB
SI:87 Formula:C15H24 CAS:339154-91-5 MolWeight:204 RetIndex:1465
CompName:.gamma.-Elemene $$ 1-Methyl-2,4-bis(1-methylethylidene)-1-vinylcyclohexane # $$



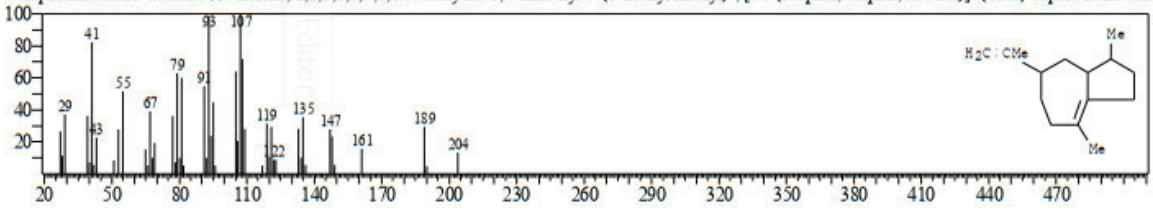
Hit#:3 Entry:17094 Library:NIST08s.LIB
SI:87 Formula:C15H24 CAS:515-13-9 MolWeight:204 RetIndex:1398
CompName:Cyclohexane, 1-ethenyl-1-methyl-2,4-bis(1-methylethenyl)-, [1S-(1.alpha.,2.beta.,4.beta.)]- $$ Cyclohexane, 2,4-diisopropenyl-1-methyl-1-vinyl-, (



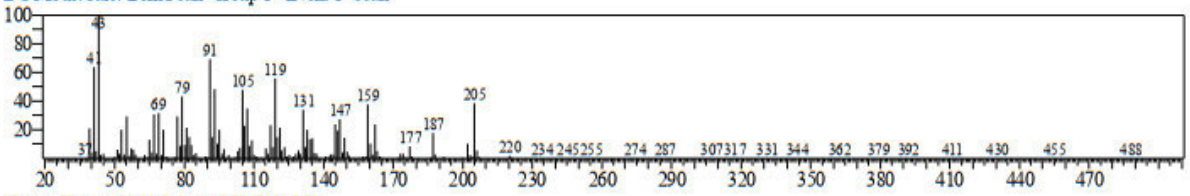
Hit#:4 Entry:100726 Library:WILEY7.LIB
SI:87 Formula:C15 H24 CAS:515-13-9 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:(-)-.beta.-Elemene $$ Cyclohexane, 1-ethenyl-1-methyl-2,4-bis(1-methylethenyl)-, [1S-(1.alpha.,2.beta.,4.beta.)]- (CAS) CIS-1,3-DIISOPROPENYL



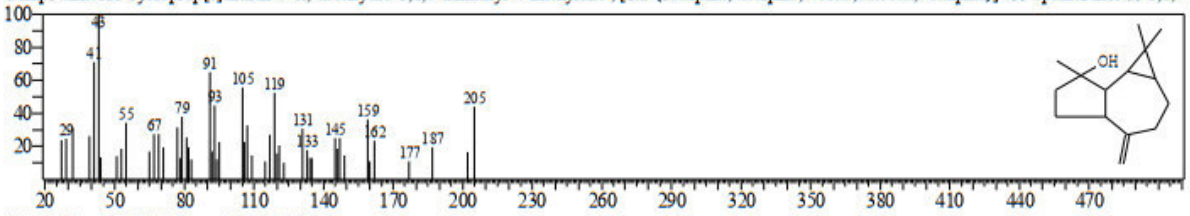
Hit#:5 Entry:100822 Library:WILEY7.LIB
SI:87 Formula:C15 H24 CAS:3691-11-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:.delta.-Guaiene $$ Azulene, 1,2,3,5,6,7,8,8a-octahydro-1,4-dimethyl-7-(1-methylethenyl)-, [1S-(1.alpha.,7.alpha.,8a.beta.)]- (CAS) alpha.-Bulnesen



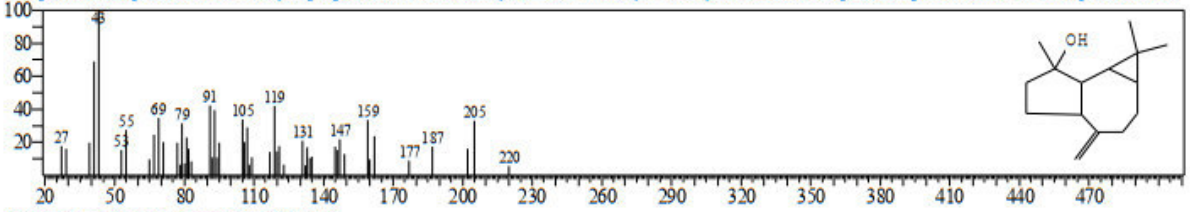
<< Target >>
Line#:35 R.Time:32.065(Scan#:5814) MassPeaks:302
RawMode:Averaged 32.060-32.070(5813-5815) BasePeak:43.00(34633)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



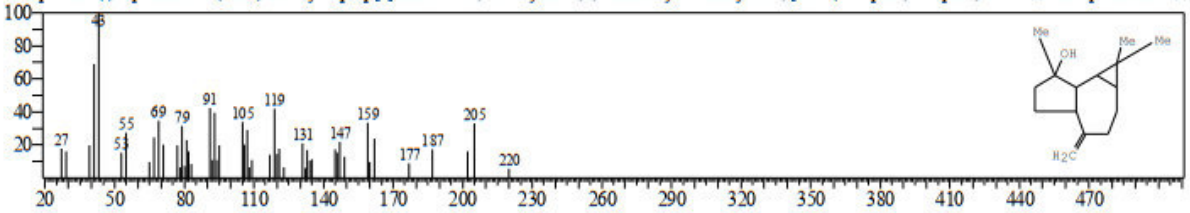
Hit#:1 Entry:18866 Library:NIST08s.LIB
SI:94 Formula:C15H24O CAS:6750-60-3 MolWeight:220 RetIndex:1536
CompName:1H-Cycloprop[e]azulen-7-ol, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1ar-(1a.alpha.,4a.alpha.,7.beta.,7a.beta.,7b.alpha.)]- $$ Spathulenol $$ 1,1,7



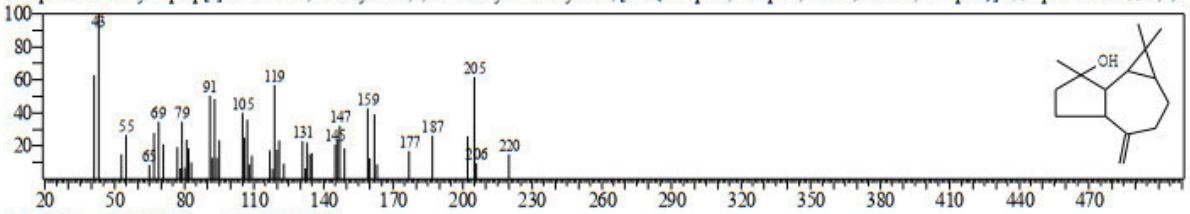
Hit#:2 Entry:55921 Library:NIST08.LIB
SI:94 Formula:C15H24O CAS:77171-55-2 MolWeight:220 RetIndex:1536
CompName:(-)-Spathulenol $$ 1H-Cycloprop[e]azulen-7-ol, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1aS-(1a.alpha.,4a.alpha.,7.beta.)] $$ Ent-Spathulenol $$



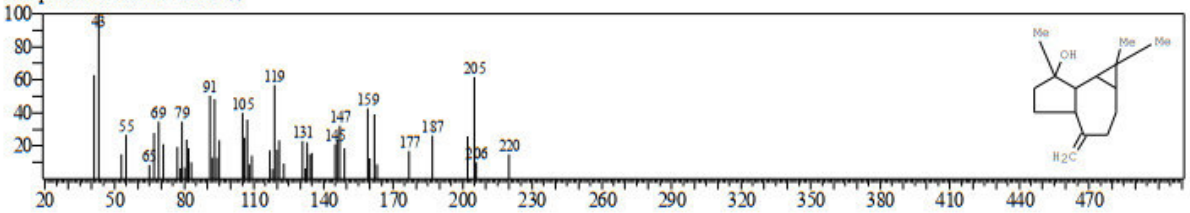
Hit#:3 Entry:121065 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H24 O CAS:77171-55-2 MolWeight:220 RetIndex:0
CompName:(-)-Spathulenol (CAS) 1H-Cycloprop[e]azulen-7-ol, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1aS-(1a.alpha.,4a.alpha.,7.beta $$ ent-Spathulenol $$



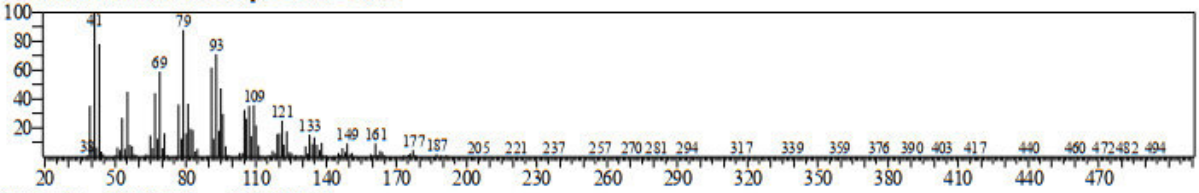
Hit#:4 Entry:55924 Library:NIST08.LIB
SI:93 Formula:C15H24O CAS:6750-60-3 MolWeight:220 RetIndex:1536
CompName:1H-Cycloprop[e]azulen-7-ol, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, [1ar-(1a.alpha.,4a.alpha.,7.beta.,7a.beta.,7b.alpha.)]- $$ Spathulenol $$ 1,1,7



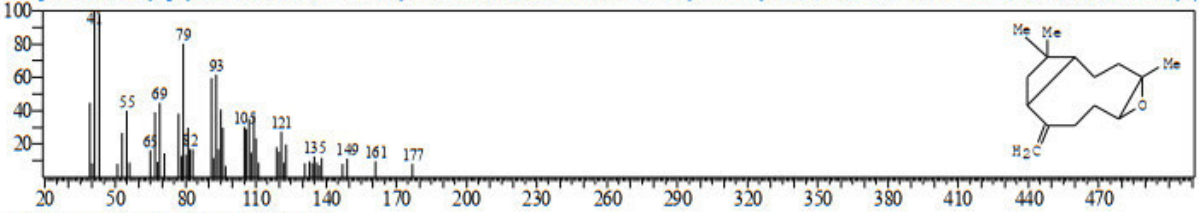
Hit#:5 Entry:121043 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C15 H24 O CAS:6750-60-3 MolWeight:220 RetIndex:0
CompName:SPATHULENOL $$



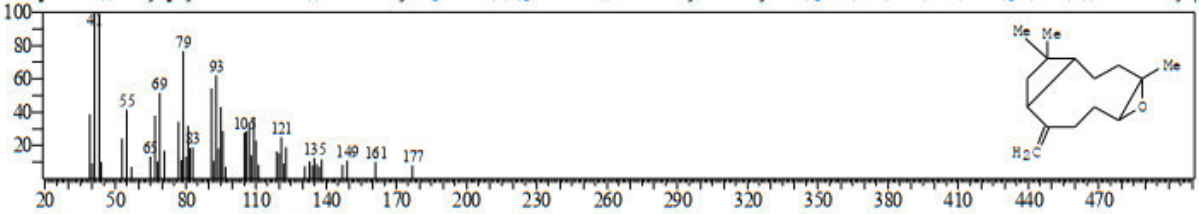
<< Target >>
Line#:36 R.Time:32.180(Scan#:5837) MassPeaks:307
RawMode:Averaged 32.175-32.185(5836-5838) BasePeak:41.00(26693)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



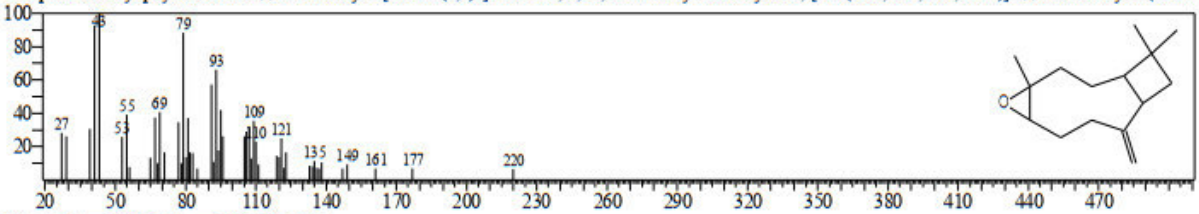
Hit#:1 Entry:121057 Library:WILEY7.LIB
SI:96 Formula:C15 H24 O CAS:1139-30-6 MolWeight:220 RetIndex:0
CompName:(-)-Caryophyllene oxide $$ (-)-5-Oxatricyclo[8.2.0.0(4,6)]dodecane,,12-trimethyl-9-methylene-, [1R-(1R*,4R*,6R*,10S*)]- (CAS) (-)-.beta.-Caryo



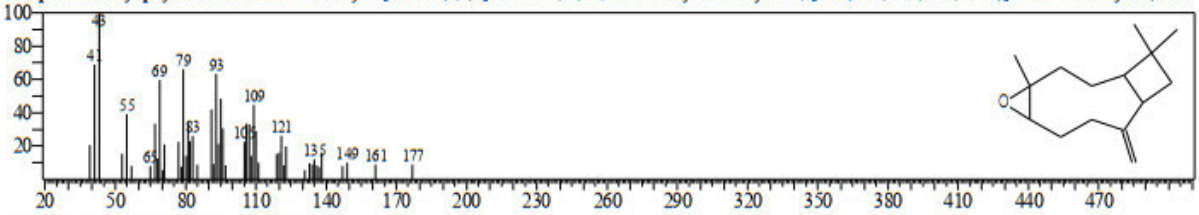
Hit#:2 Entry:121056 Library:WILEY7.LIB
SI:95 Formula:C15 H24 O CAS:1139-30-6 MolWeight:220 RetIndex:0
CompName:(-)-Caryophyllene oxide $$ (-)-5-Oxatricyclo[8.2.0.0(4,6)]dodecane,,12-trimethyl-9-methylene-, [1R-(1R*,4R*,6R*,10S*)]- (CAS) (-)-.beta.-Caryo



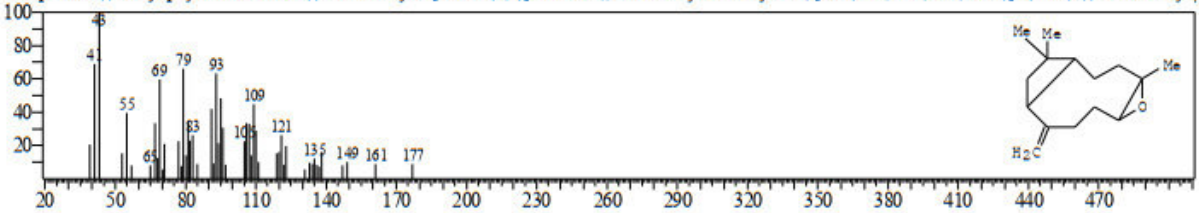
Hit#:3 Entry:55919 Library:NIST08.LIB
SI:94 Formula:C15H24O CAS:1139-30-6 MolWeight:220 RetIndex:1507
CompName:Caryophyllene oxide $$ 5-Oxatricyclo[8.2.0.0(4,6)-]dodecane, 4,12,12-trimethyl-9-methylene-, [1R-(1R*,4R*,6R*,10S*)]- $$ 5-Oxatricyclo(8.2.0.



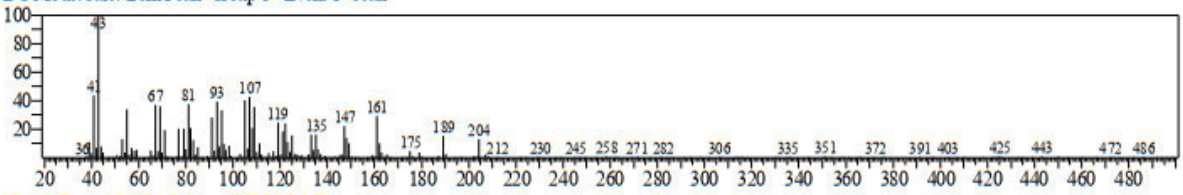
Hit#:4 Entry:18865 Library:NIST08s.LIB
SI:92 Formula:C15H24O CAS:1139-30-6 MolWeight:220 RetIndex:1507
CompName:Caryophyllene oxide $$ 5-Oxatricyclo[8.2.0.0(4,6)-]dodecane, 4,12,12-trimethyl-9-methylene-, [1R-(1R*,4R*,6R*,10S*)]- $$ 5-Oxatricyclo(8.2.0.



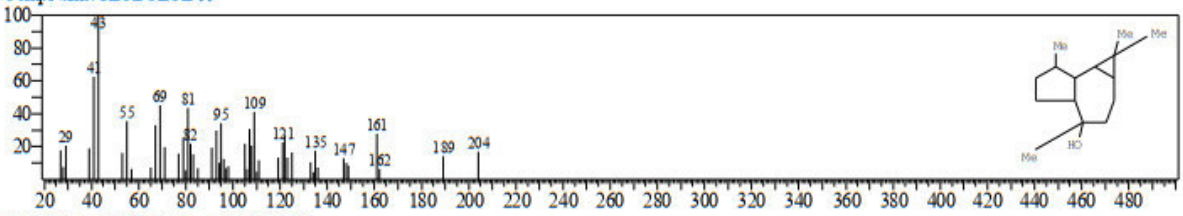
Hit#:5 Entry:121059 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C15 H24 O CAS:1139-30-6 MolWeight:220 RetIndex:0
CompName:(-)-Caryophyllene oxide $$ (-)-5-Oxatricyclo[8.2.0.0(4,6)]dodecane,,12-trimethyl-9-methylene-, [1R-(1R*,4R*,6R*,10S*)]- (CAS) (-)-.beta.-Caryo



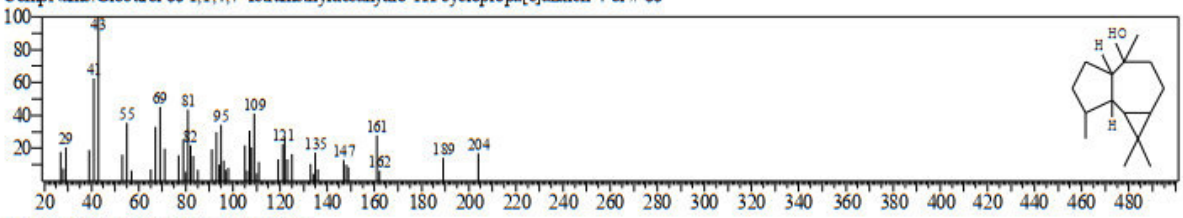
<< Target >>
Line#:37 R.Time:32.300(Scan#:5861) MassPeaks:314
RawMode:Averaged 32.295-32.305(5860-5862) BasePeak:43.00(6527)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



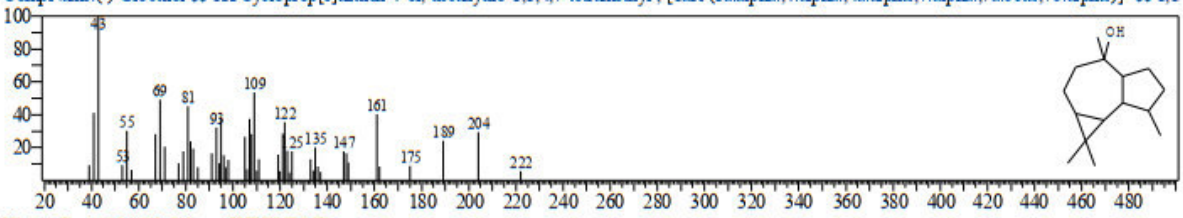
Hit#:1 Entry:124079 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H26 O CAS:489-41-8 MolWeight:222 RetIndex:0
CompName:GLOBULOL $$



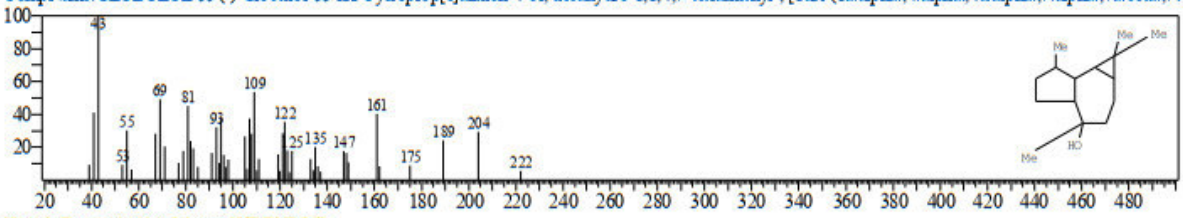
Hit#:2 Entry:57431 Library:NIST08.LIB
SI:94 Formula:C15H26O CAS:51371-47-2 MolWeight:222 RetIndex:1530
CompName:Globulol $$ 1,1,4,7-Tetramethyldecahydro-1H-cyclopropa[e]azulen-4-ol # $$



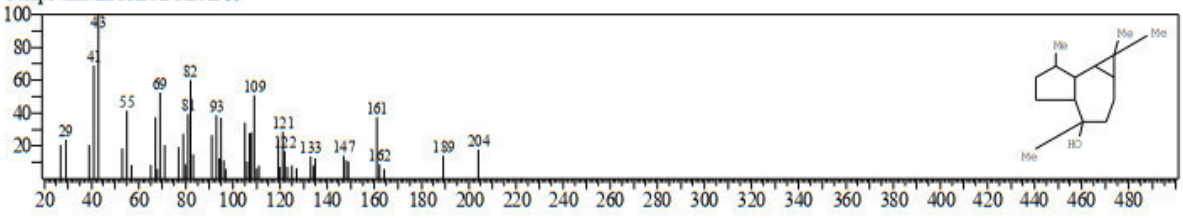
Hit#:3 Entry:57437 Library:NIST08.LIB
SI:91 Formula:C15H26O CAS:489-41-8 MolWeight:222 RetIndex:1530
CompName:(-)-Globulol $$ 1H-Cycloprop[e]azulen-4-ol, decahydro-1,1,4,7-tetramethyl-, [1aR-(1a.alpha.,4.alpha.,4a.alpha.,7.alpha.,7a.beta.,7b.alpha.)]- $$ 1,1



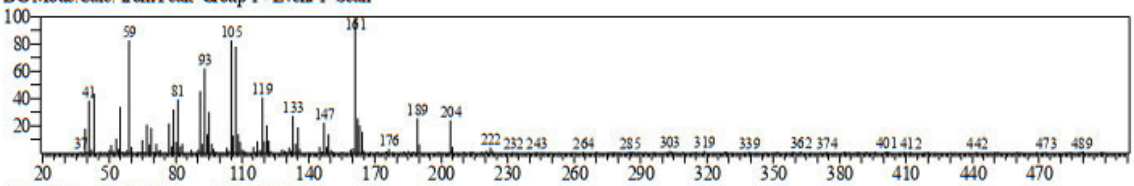
Hit#:4 Entry:124080 Library:WILEY7.LIB
SI:91 Formula:C15 H26 O CAS:489-41-8 MolWeight:222 RetIndex:0
CompName:GLOBULOL $$ (-)-Globulol $$ 1H-Cycloprop[e]azulen-4-ol, decahydro-1,1,4,7-tetramethyl-, [1aR-(1a.alpha.,4.alpha.,4a.alpha.,7.alpha.,7a.beta.,7l



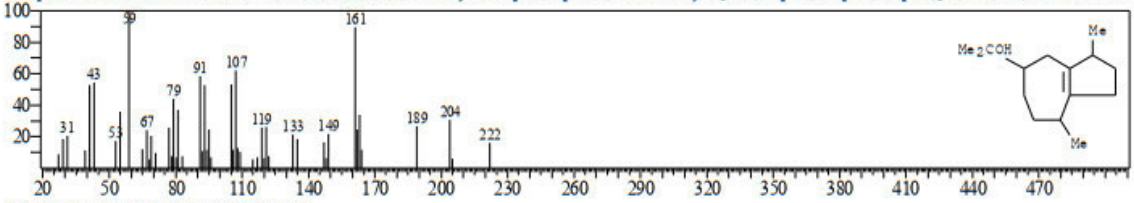
Hit#:5 Entry:124084 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C15 H26 O CAS:552-02-3 MolWeight:222 RetIndex:0
CompName:EPIGLOBULOL $$



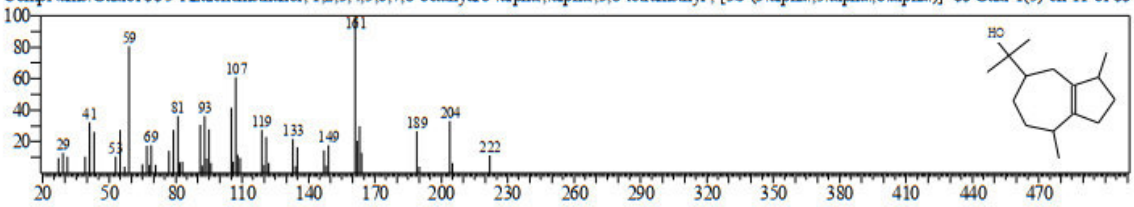
<< Target >>
Line#:38 R.Time:32.880(Scan#:5977) MassPeaks:292
RawMode:Averaged 32.875-32.885(5976-5978) BasePeak:161.10(3063)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



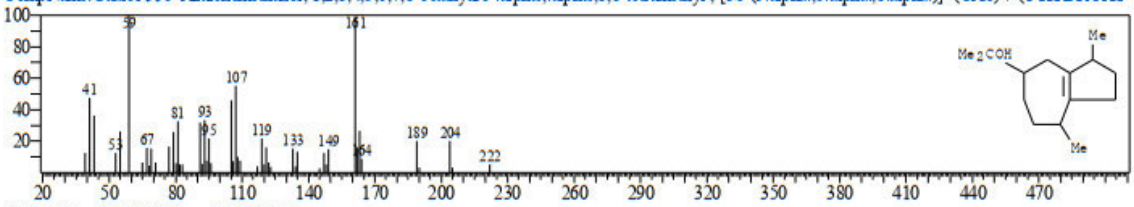
Hit#:1 Entry:123995 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C15 H26 O CAS:489-86-1 MolWeight:222 RetIndex:0
CompName:Guaiol $$ 5-Azulenemethanol, 1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-.alpha.,.alpha.,3,8-tetramethyl-, [3S-(3.alpha.,5.alpha.,8.alpha.)]- (CAS) 7-(1-HYDROXY-



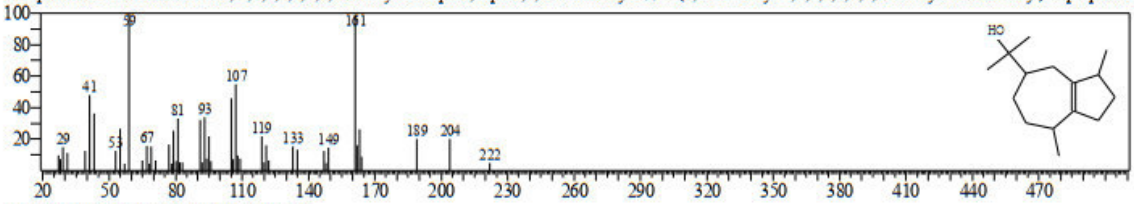
Hit#:2 Entry:19125 Library:NIST08s.LIB
SI:92 Formula:C15H26O CAS:489-86-1 MolWeight:222 RetIndex:1614
CompName:Guaiol $$ 5-Azulenemethanol, 1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-.alpha.,.alpha.,3,8-tetramethyl-, [3S-(3.alpha.,5.alpha.,8.alpha.)]- $$ Guai-1(5)-en-11-ol $$



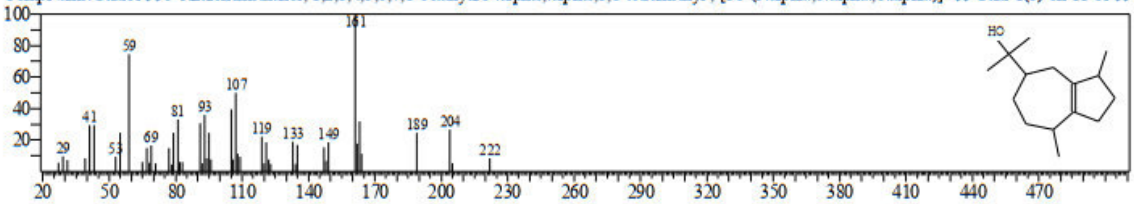
Hit#:3 Entry:124002 Library:WILEY7.LIB
SI:91 Formula:C15 H26 O CAS:489-86-1 MolWeight:222 RetIndex:0
CompName:Guaiol $$ 5-Azulenemethanol, 1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-.alpha.,.alpha.,3,8-tetramethyl-, [3S-(3.alpha.,5.alpha.,8.alpha.)]- (CAS) 7-(1-HYDROXY-



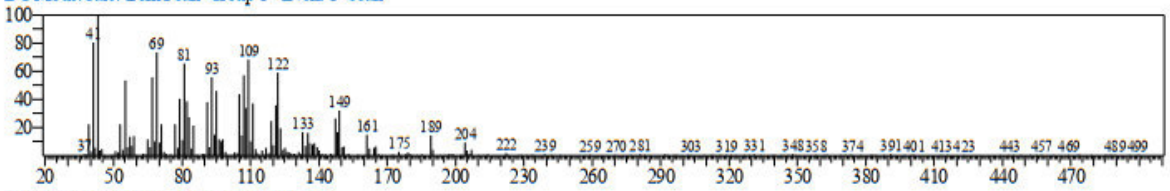
Hit#:4 Entry:57452 Library:NIST08.LIB
SI:91 Formula:C15H26O CAS:13822-35-0 MolWeight:222 RetIndex:1614
CompName:5-Azulenemethanol, 1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-.alpha.,.alpha.,3,8-tetramethyl- $$ 2-(3,8-Dimethyl-1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-5-azulenyl)-2-propanol



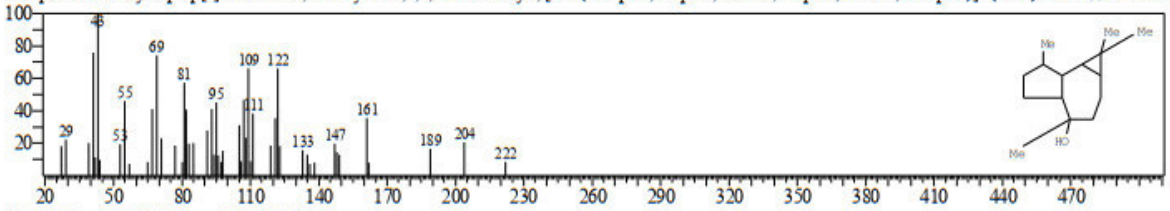
Hit#:5 Entry:19123 Library:NIST08s.LIB
SI:90 Formula:C15H26O CAS:489-86-1 MolWeight:222 RetIndex:1614
CompName:Guaiol $$ 5-Azulenemethanol, 1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-.alpha.,.alpha.,3,8-tetramethyl-, [3S-(3.alpha.,5.alpha.,8.alpha.)]- $$ Guai-1(5)-en-11-ol $$



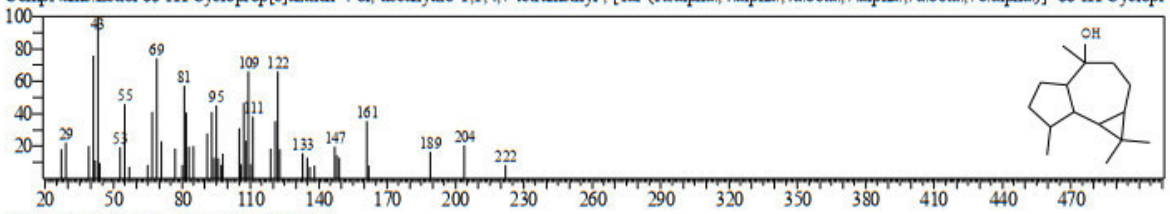
<< Target >>
Line#:39 R.Time:32.990(Scan#:5999) MassPeaks:299
RawMode:Averaged 32.985-32.995(5998-6000) BasePeak:43.00(5737)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



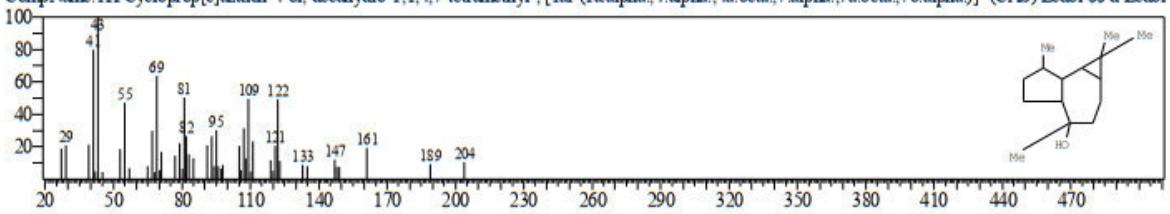
Hit#:1 Entry:124068 Library:WILEY7.LIB
SI:91 Formula:C15 H26 O CAS:577-27-5 MolWeight:222 RetIndex:0
CompName:1H-Cycloprop[e]azulen-4-ol, decahydro-1,1,4,7-tetramethyl-, [1ar-(1a.alpha.,4.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.beta.,7b.alpha.)]- (CAS) Ledol $$ d-Ledol



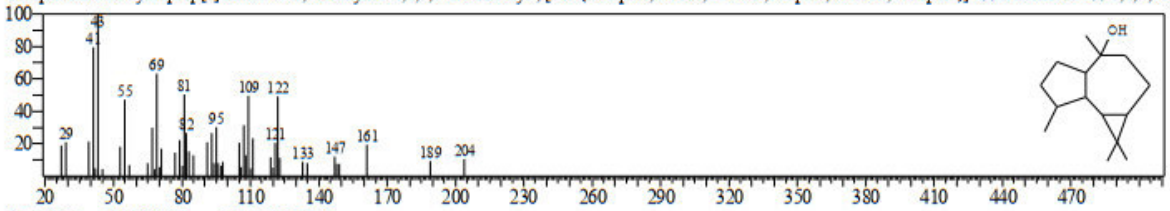
Hit#:2 Entry:57432 Library:NIST08.LIB
SI:91 Formula:C15H26O CAS:577-27-5 MolWeight:222 RetIndex:1530
CompName:Ledol $$ 1H-Cycloprop[e]azulen-4-ol, decahydro-1,1,4,7-tetramethyl-, [1ar-(1a.alpha.,4.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.beta.,7b.alpha.)]- $$ 1H-Cyclopr



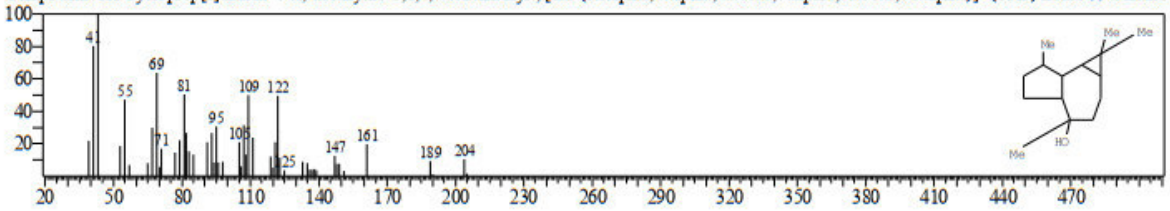
Hit#:3 Entry:124067 Library:WILEY7.LIB
SI:89 Formula:C15 H26 O CAS:577-27-5 MolWeight:222 RetIndex:0
CompName:1H-Cycloprop[e]azulen-4-ol, decahydro-1,1,4,7-tetramethyl-, [1ar-(1a.alpha.,4.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.beta.,7b.alpha.)]- (CAS) Ledol $$ d-Ledol



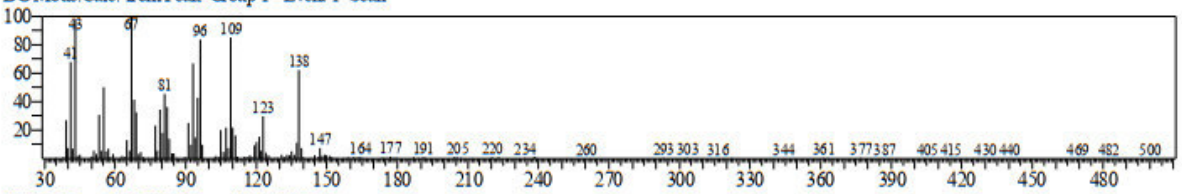
Hit#:4 Entry:57429 Library:NIST08.LIB
SI:89 Formula:C15H26O CAS:552-02-3 MolWeight:222 RetIndex:1530
CompName:1H-Cycloprop[e]azulen-4-ol, decahydro-1,1,4,7-tetramethyl-, [1ar-(1a.alpha.,4.beta.,4a.beta.,7.alpha.,7a.beta.,7b.alpha.)]- $$ Viridiflorol $$ 1,1,4,7-



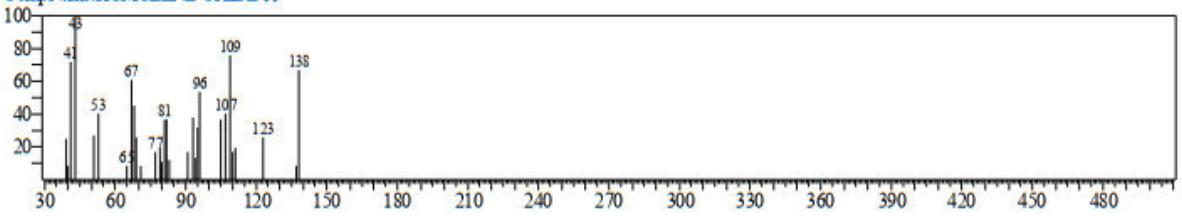
Hit#:5 Entry:124069 Library:WILEY7.LIB
SI:88 Formula:C15 H26 O CAS:577-27-5 MolWeight:222 RetIndex:0
CompName:1H-Cycloprop[e]azulen-4-ol, decahydro-1,1,4,7-tetramethyl-, [1ar-(1a.alpha.,4.alpha.,4a.beta.,7.alpha.,7a.beta.,7b.alpha.)]- (CAS) Ledol $$ d-Ledol



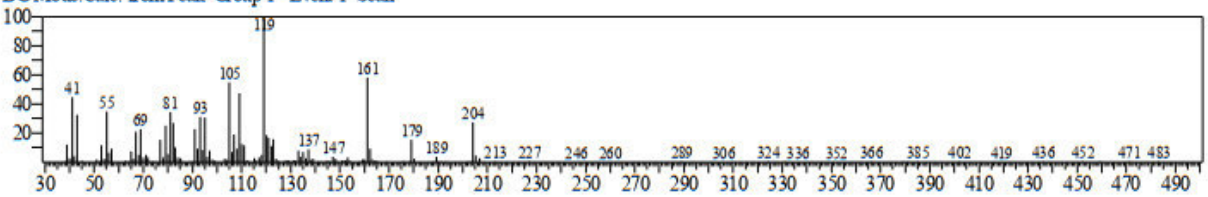
<< Target >>
Line#:40 R.Time:33.180(Scan#:6037) MassPeaks:344
RawMode:Averaged 33.175-33.185(6036-6038) BasePeak:67.05(19557)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



Hit#:1 Entry:120452 Library:WILEY7.LIB
SI:86 Formula:C15 H24 O CAS:0-00-0 MolWeight:220 RetIndex:0
CompName:HUMULENE OXIDE $$

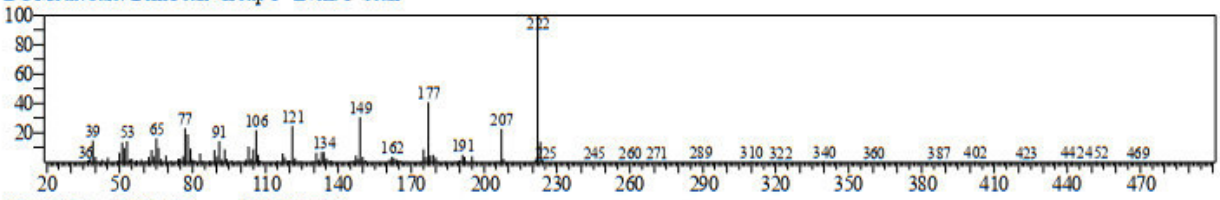


<< Target >>
Line#:41 R.Time:33.965(Scan#:6194) MassPeaks:304
RawMode:Averaged 33.960-33.970(6193-6195) BasePeak:119.10(14920)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan

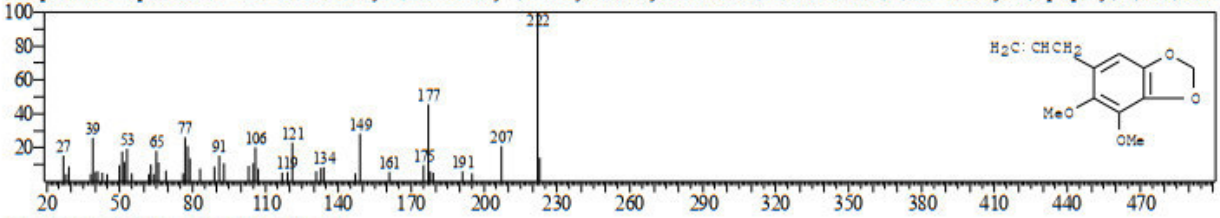


No hit compound

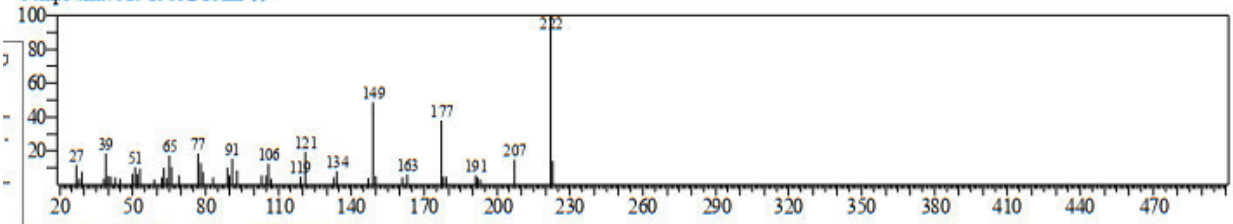
<< Target >>
Line#:42 R.Time:34.070(Scan#:6215) MassPeaks:269
RawMode:Averaged 34.065-34.075(6214-6216) BasePeak:222.05(17488)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



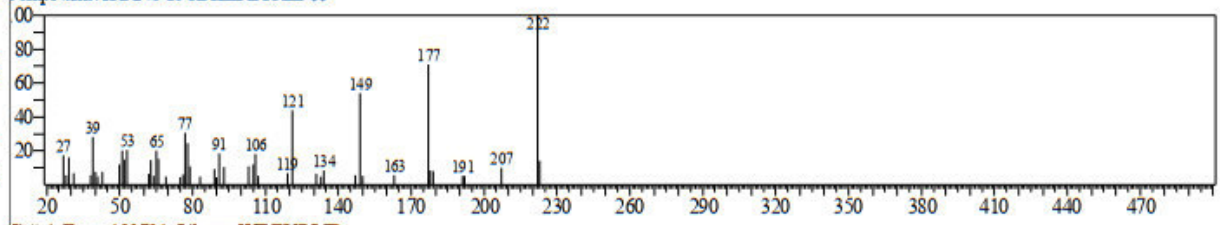
Hit#:1 Entry:123734 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C12 H14 O4 CAS:484-31-1 MolWeight:222 RetIndex:0
CompName:Dillapiole $$ DILL-APIOL $$ 1-Allyl-2,3-dimethoxy-4,5-methylenedioxybenzene $$ 1,3-Benzodioxole, 4,5-dimethoxy-6-(2-propenyl)- (CAS) Dill



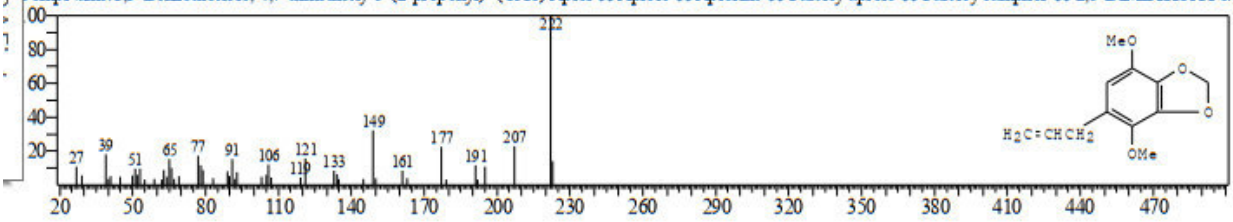
Hit#:2 Entry:123740 Library:WILEY7.LIB
SI:89 Formula:C12 H14 O4 CAS:17672-89-8 MolWeight:222 RetIndex:0
CompName:CIS-ISOAPIOLE $$



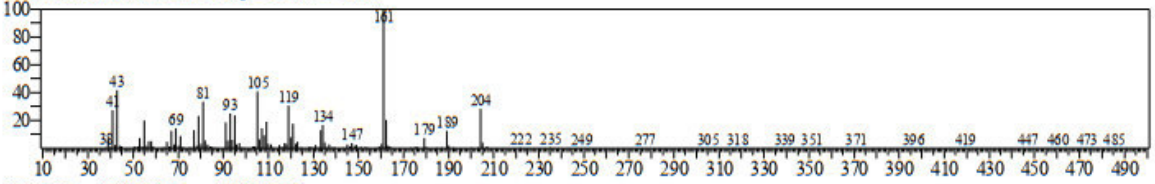
Hit#:3 Entry:123739 Library:WILEY7.LIB
SI:88 Formula:C12 H14 O4 CAS:17672-89-8 MolWeight:222 RetIndex:0
CompName:TRANS-ISODILLAPIOLE $$



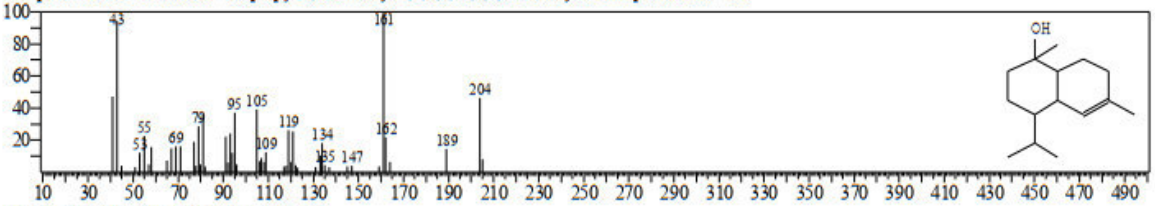
Hit#:4 Entry:123731 Library:WILEY7.LIB
SI:87 Formula:C12 H14 O4 CAS:523-80-8 MolWeight:222 RetIndex:0
CompName:1,3-Benzodioxole, 4,7-dimethoxy-5-(2-propenyl)- (CAS) Apiol $$ Apiole $$ Apioline $$ Parsley apiole $$ Parsley camphor $$ 2,5-DIMETHOXYS



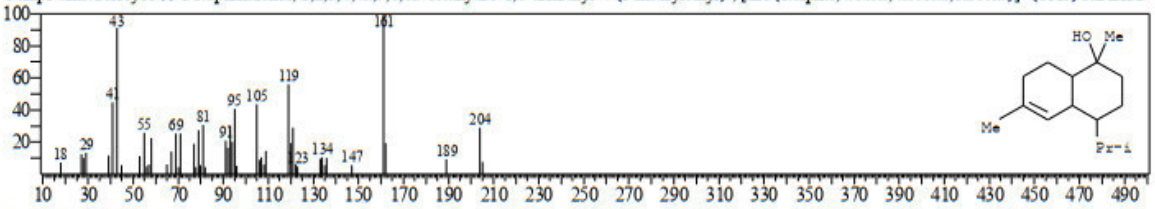
<< Target >>
Line#:43 R.Time:34.455(Scan#:6292) MassPeaks:269
RawMode:Averaged 34.450-34.460(6291-6293) BasePeak:161.10(18635)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



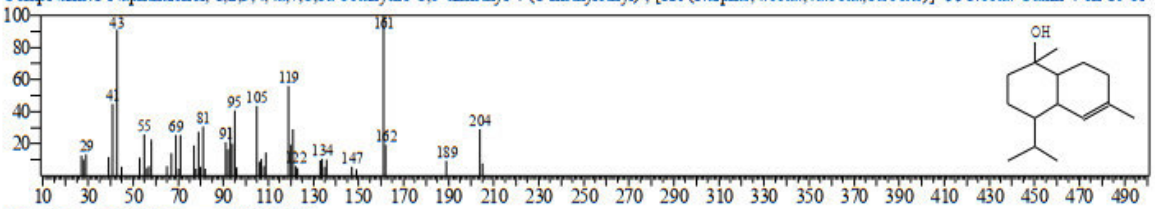
Hit#:1 Entry:57502 Library:NIST08.LIB
SI:90 Formula:C15H26O CAS:5937-11-1 MolWeight:222 RetIndex:1580
CompName:.tau.-Cadinol $$ 4-Isopropyl-1,6-dimethyl-1,2,3,4,4a,7,8,8a-octahydro-1-naphthalenol # $$



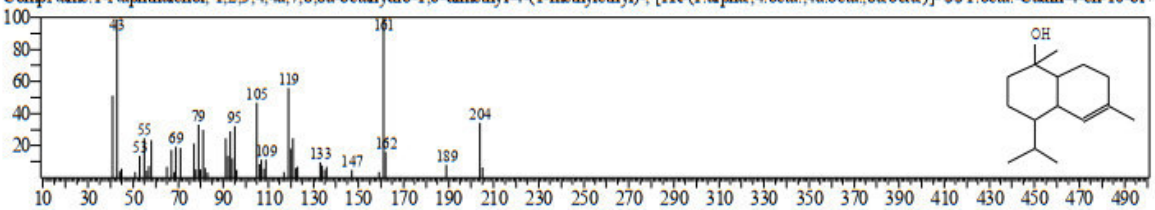
Hit#:2 Entry:124020 Library:WILEY7.LIB
SI:88 Formula:C15 H26 O CAS:19435-97-3 MolWeight:222 RetIndex:0
CompName:Torreyol $$ 1-Naphthalenol, 1,2,3,4,4a,7,8,8a-octahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4.beta.,4a.beta.,8a.beta.)]- (CAS) 5.BETA.-



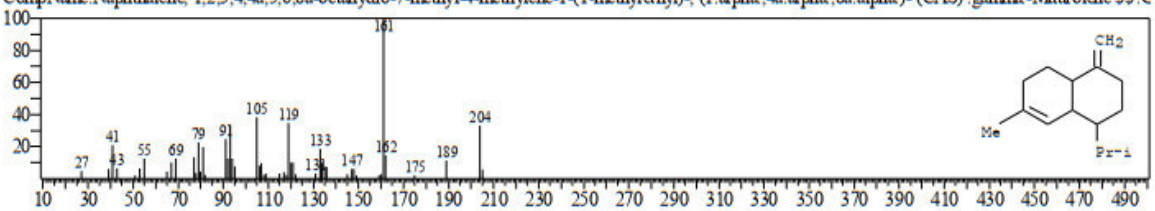
Hit#:3 Entry:57503 Library:NIST08.LIB
SI:87 Formula:C15H26O CAS:19435-97-3 MolWeight:222 RetIndex:1580
CompName:1-Naphthalenol, 1,2,3,4,4a,7,8,8a-octahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4.beta.,4a.beta.,8a.beta.)]- $$ 1.beta.-Cadin-4-en-10-ol



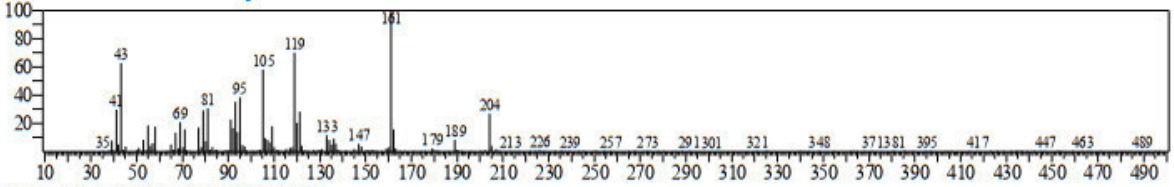
Hit#:4 Entry:19122 Library:NIST08s.LIB
SI:87 Formula:C15H26O CAS:19435-97-3 MolWeight:222 RetIndex:1580
CompName:1-Naphthalenol, 1,2,3,4,4a,7,8,8a-octahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4.beta.,4a.beta.,8a.beta.)]- $$ 1.beta.-Cadin-4-en-10-ol



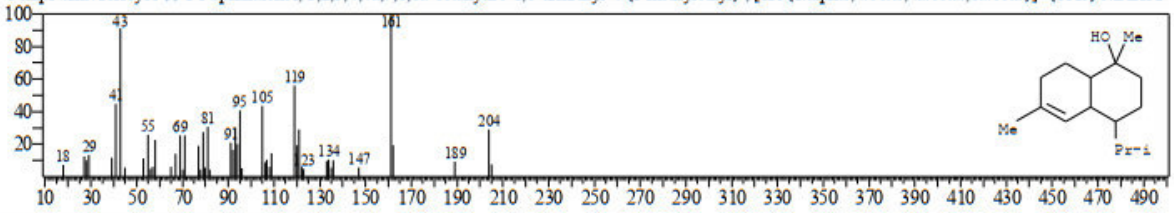
Hit#:5 Entry:100950 Library:WILEY7.LIB
SI:87 Formula:C15 H24 CAS:30021-74-0 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4a.alpha.,8a.alpha.)- (CAS) .gamma.-Muurolene $$ C



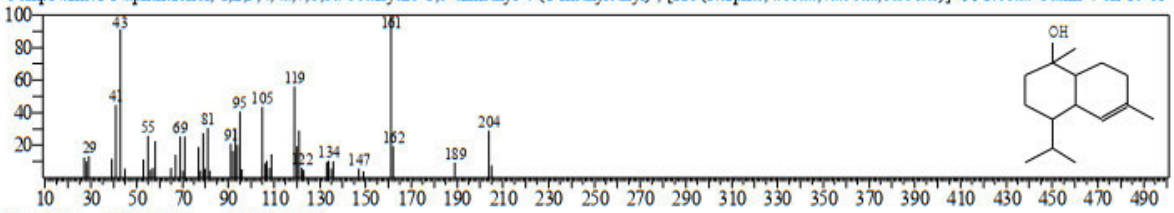
<< Target >>
Line#:44 R.Time:34.680(Scan#:6337) MassPeaks:310
RawMode:Averaged 34.675-34.685(6336-6338) BasePeak:161.10(6741)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



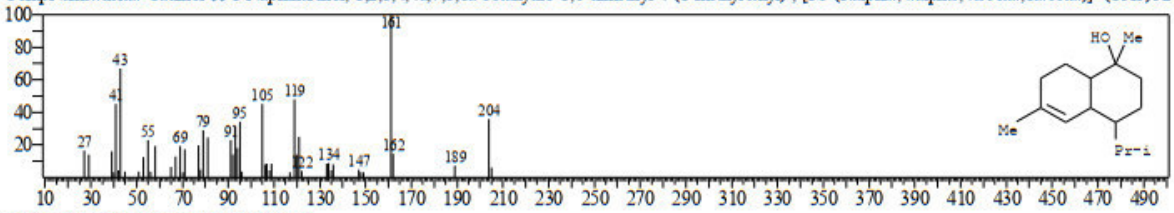
Hit#:1 Entry:124020 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H26 O CAS:19435-97-3 MolWeight:222 RetIndex:0
CompName:Torreyol $$ 1-Naphthalenol, 1,2,3,4,4a,7,8,8a-octahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4.beta.,4a.beta.,8a.beta.)]- (CAS) 5.BETA.-



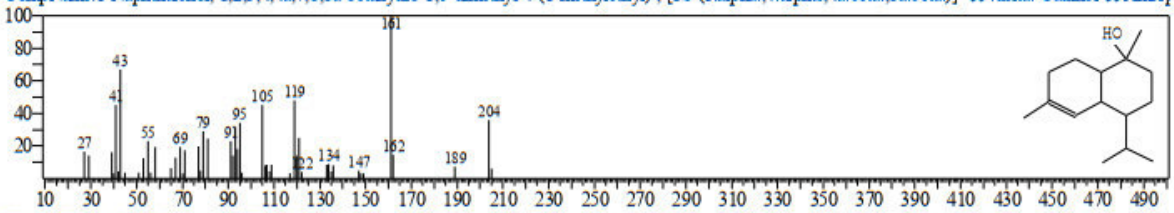
Hit#:2 Entry:57503 Library:NIST08.LIB
SI:94 Formula:C15H26O CAS:19435-97-3 MolWeight:222 RetIndex:1580
CompName:1-Naphthalenol, 1,2,3,4,4a,7,8,8a-octahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4.beta.,4a.beta.,8a.beta.)]- $$ 1.beta.-Cadin-4-en-10-ol



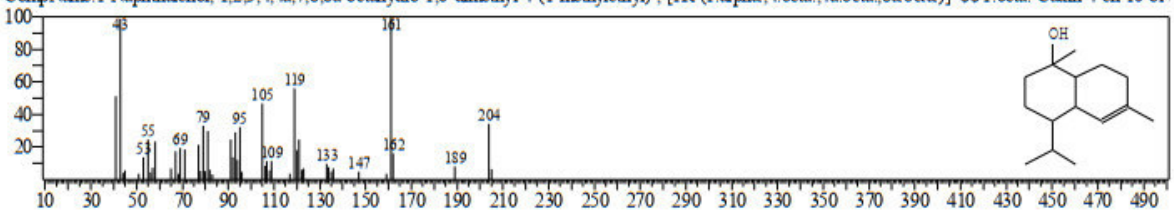
Hit#:3 Entry:123210 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C15 H26 O CAS:36564-42-8 MolWeight:222 RetIndex:0
CompName:.delta.-Cadinol $$ 1-Naphthalenol, 1,2,3,4,4a,7,8,8a-octahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,4.alpha.,4a.beta.,8a.beta.)]- (CAS) Au



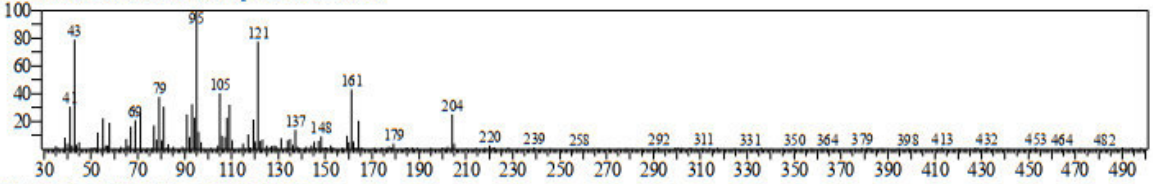
Hit#:4 Entry:57504 Library:NIST08.LIB
SI:93 Formula:C15H26O CAS:36564-42-8 MolWeight:222 RetIndex:1580
CompName:1-Naphthalenol, 1,2,3,4,4a,7,8,8a-octahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,4.alpha.,4a.beta.,8a.beta.)]- $$ .delta.-Cadinol $$ Amorp



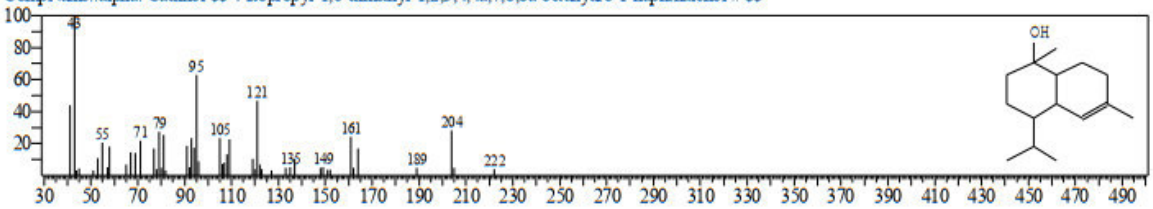
Hit#:5 Entry:19122 Library:NIST08s.LIB
SI:91 Formula:C15H26O CAS:19435-97-3 MolWeight:222 RetIndex:1580
CompName:1-Naphthalenol, 1,2,3,4,4a,7,8,8a-octahydro-1,6-dimethyl-4-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4.beta.,4a.beta.,8a.beta.)]- $$ 1.beta.-Cadin-4-en-10-ol



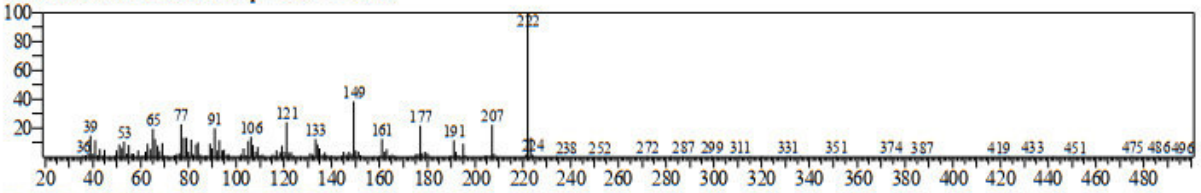
<< Target >>
Line#:45 R.Time:34.970(Scan#:6395) MassPeaks:285
RawMode:Averaged 34.965-34.975(6394-6396) BasePeak:95.05(3670)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



Hit#:1 Entry:57436 Library:NIST08.LIB
SI:86 Formula:C15H26O CAS:481-34-5 MolWeight:222 RetIndex:1580
CompName:.alpha.-Cadinol $$ 4-Isopropyl-1,6-dimethyl-1,2,3,4,4a,7,8,8a-octahydro-1-naphthalenol # $$



<< Target >>
Line#:46 R.Time:36.245(Scan#:6650) MassPeaks:315
RawMode:Averaged 36.240-36.250(6649-6651) BasePeak:222.05(13729)
BGMode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



Hit#:1 Entry:123731 Library:WILEY7.LIB
SI:89 Formula:C12 H14 O4 CAS:523-80-8 MolWeight:222 RetIndex:0
CompName:1,3-Benzodioxole, 4,7-dimethoxy-5-(2-propenyl)- (CAS) Apiol $$ Apiole $$ Apioline $$ Parsley apiole $$ Parsley camphor $$ 2,5-DIMETHOXYS

