

**ESTUDIO COMPARATIVO DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LOS
METABOLITOS SECUNDARIOS PRESENTES EN FLORES Y HOJAS DE
Lantana camara var. acculeata EXTRAIDOS POR DIFERENTES TÉCNICAS**

GLADYS CRISTINA PINTO SANTAMARÍA

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE QUÍMICA
BUCARAMANGA
2010**

**ESTUDIO COMPARATIVO DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LOS
METABOLITOS SECUNDARIOS PRESENTES EN FLORES Y HOJAS DE
Lantana camara var. acculeata EXTRAÍDOS POR DIFERENTES TÉCNICAS**

GLADYS CRISTINA PINTO SANTAMARÍA

Trabajo presentado como requisito parcial para optar al título de Química

Directores:

Dra. ELENA E. STASHENKO, Química, Ph.D.

Dr. JAIRO RENÉ MARTINEZ, Químico, Ph.D.

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2010

AGRADECIMIENTOS

La autora expresa sus agradecimientos a:

A la Dra. Elena Stashenko y el Dr. Jairo Rene Martínez, por su orientación, comprensión y sus enseñanzas.

A las calificadoras, Dra. Aidé Perea y Dra. Luz Ángela Carreño por sus importantes observaciones.

A la Coordinadora de Vigilancia Tecnológica para el CENIVAM, Martha Cervantes, quien oportunamente prestó su ayuda para tener información bibliográfica actualizada.

A la Dra. Geovana Tafur y el químico, M. Sc., Amner Muñoz, que invirtieron su tiempo y su voluntad en proporcionar los consejos acertados y el apoyo incondicional a la autora.

A los estudiantes de Maestría en química, Ginna Arias, Carlos Ruiz y Nestor Marín, quienes dedicaron tiempo para contribuir al mejoramiento del presente escrito.

A mi padre, Rafael Pinto; familia y amigos que me llevaron con paciencia hacia la calma, para poder culminar el proceso de formación especialmente cuando se tiene una enfermedad como la esquizofrenia.

Finalmente, a todas las personas que de una u otra manera contribuyeron al proyecto y que, aunque no se mencionen, saben que tienen un pedacito del éxito obtenido.

DEDICATORIA.....

El libro "Manual del Guerrero de la Luz" (de Paulo Coelho), menciona:

"En cada uno de nosotros vive un guerrero de la luz,

Alguien capaz de escuchar el silencio de su corazón,

De aceptar sus derrotas sin dejarse abatir

Y de alimentar la esperanza,

en medio del cansancio y el desaliento...

No siempre son valientes ni actúan correctamente,

Sufren por cosas inútiles, a veces se consideran incapaces de crecer

Y con frecuencia se creen indignos de cualquier bendición o milagro...

Por eso son guerreros de luz, porque se equivocan,

Porque buscan una razón y no se detienen hasta encontrarla."

Ésta tesis de grado es una apología a la perseverancia
aún en los momentos más difíciles en que un ser humano
puede encontrarse .

Por eso la dedico a todos aquellos que con los mayores obstáculos,
enfermedades, factor económico, factor social, etc.
han culminado sus carreras y se aprestan a ser seres
de bien para una sociedad que necesita más corazones dispuestos
y menos mentes maquiavélicas.

Gladys Cristina Pinto S.

TABLA DE CONTENIDO

| | Pág. |
|----------------------------------------------------------------------|-------------|
| INTRODUCCION..... | 19 |
| 1. ESTADO DEL ARTE | 21 |
| 1.1 METABOLITOS SECUNDARIOS | 21 |
| 1.2 ACEITES ESENCIALES | 24 |
| 1.2.1 Definición | 24 |
| 1.2.2 Características de los AE..... | 25 |
| 1.2.3 Usos de los AE en la industria y su importancia económica..... | 26 |
| 1.3 LANTANA CAMARA VAR. ACCULEATA | 28 |
| 1.3.1 Usos etnofarmacológicos..... | 29 |
| 1.3.2 Composición química..... | 30 |
| 1.3.3 Análisis diacrónico de la producción científica..... | 31 |
| 1.3.4 Toxicología | 33 |
| 1.3.5. Análisis por área de aplicación. | 35 |
| 1.3.6 Actividad biológica del AE de Lantana cámara..... | 36 |
| 1.3.7 Control biológico de L. cámara | 38 |
| 1.3.8 Análisis del tipo de publicación | 39 |
| 1.4 MÉTODOS DE OBTENCIÓN DE LOS AE Y EXTRACTOS | 40 |
| 1.4.1 Hidrodestilación asistida por la radiación de microondas | 41 |
| 1.4.2 Destilación extracción simultánea con solvente..... | 41 |
| 1.4.3 Extracción con fluido supercrítico | 42 |
| 1.5 ANÁLISIS DE LA COMPOSICIÓN DEL AE Y EXTRACTOS..... | 44 |
| 1.5.1 Cromatografía de gases de alta resolución | 44 |
| 1.5.2 Interpretación de los cromatogramas. | 44 |
| 1.5.3 Cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas..... | 47 |
| 1.6 ANALISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES | 48 |
| 1.6.1 Método basado en las covarianzas | 49 |
| 1.6.2 Método basado en correlaciones..... | 49 |

| | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 2. PARTE EXPERIMENTAL | 51 |
| 2.1 RECOLECCIÓN DEL MATERIAL VEGETAL | 51 |
| 2.2 OBTENCIÓN DEL AE Y EXTRACTOS DE LANTANA CÁMARA VAR ACCULEATA | 51 |
| 2.2.1 Hidrodestilación asistida por la radiación de microondas | 51 |
| 2.2.2 Destilación- extracción con solvente simultánea | 53 |
| 2.2.3 Extracción con fluido supercrítico | 54 |
| 2.3 CARACTERIZACIÓN DE AE Y EXTRACTOS..... | 55 |
| 2.3.1 Separación por columna apolar | 55 |
| 2.3.2 Separación por columna polar | 56 |
| 3. ANÁLISIS DE RESULTADOS | 58 |
| 3.1 IDENTIFICACIÓN BOTÁNICA..... | 58 |
| 3.2 ANÁLISIS DE SUELOS | 58 |
| 3.3 RENDIMIENTO DEL AE | 59 |
| 3.4 COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL AE Y EXTRACTOS DE Lantana camara var. acculeata. | 60 |
| 3.4.1 Efecto de la técnica de extracción sobre el número y el tipo de metabolitos secundarios volátiles aislados de Lantana camara var. Acculeata | 69 |
| 3.4.2. Efecto de la parte de la planta empleada sobre el número y el tipo de metabolitos secundarios volátiles aislados de Lantana camara var. acculeata | 72 |
| 3.4.3. Evaluación de la reproducibilidad del método de extracción del AE con base en las áreas cromatográficas..... | 73 |
| 3.5 ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES DE LAS TÉCNICAS DE EXTRACCIÓN DEL AE Y EXTRACTOS DE HOJAS Y FLORES DE Lantana camara var, acculeata..... | 75 |
| 3.6 ANÁLISIS POR GC-MS DE LOS AE Y EXTRACTOS DE Lantana camara var. acculeata..... | 79 |
| 4. CONCLUSIONES | 84 |

| | |
|-------------------------|----|
| 5. RECOMENDACIONES..... | 85 |
| 6. BIBLIOGRAFÍA..... | 86 |

LISTAS DE FIGURAS

| | Pág. |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|
| Figura 1. Esquema de la biosíntesis de metabolitos secundarios. | 22 |
| Figura 2. Rutas biosintéticas de terpenos. 1. Ruta del mevalonato. 2. Ruta del fosfato de metileritriilo | 23 |
| Figura 3. Lantana cámara var. acculeata (complejo agroindustrial piloto CENIVAM). | 28 |
| Figura 4. Número de publicaciones sobre Lantana cámara, según la base de datos Scopus (Elsevier B.V). Ecuación de búsqueda: TITLE-ABS-KEY ("Lantana camera"). Número de registros: 545. Años 1965-2009. Fecha de consulta: 2 de mayo de 2009 | 32 |
| Figura 5. Número de publicaciones sobre Lantana cámara, según el área de aplicaciones encontradas en la base de datos Scopus (Elsevier B.V). Ecuación de búsqueda: TITLE-ABS-KEY ("Lantana camera"). Años 2000-2009. Fecha de consulta: 2 de mayo de 2009. | 35 |
| Figura 6. Triterpenos de importancia biológica en el control de enfermedades. | 38 |
| Tabla Nº 4. Resumen del análisis fisicoquímico de la parcela de siembra de Lantana cámara var acculeata. | 59 |
| Tabla Nº 5. Rendimientos de AE de Lantana camera reportados en la literatura | 60 |
| FIGURA 8. Perfiles cromatográficos de los AE y extractos de hojas de Lantana cámara, obtenidos por diferentes técnicas A. MWHD, B. SDE, C. SFE. Columna DB-5 (60 m), split 1:30, MSD (EI, 70 eV). | 63 |

| | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| FIGURA 9. Perfiles cromatográficos de los AE y extractos de flores de Lantana cámara, obtenidos por diferentes técnicas D. MWHD, F. SDE, G. SFE. Columna DB-5 (60 m), split 1:30, | 64 |
| Figura 10. Variación de las cantidades relativas (%), por familias de compuestos encontrados en hojas (H) y flores (F) de Lantana camara var. acculeata, con respecto a la técnica de extracción. | 70 |
| Figura 11. Localización eléctrica de los grupos químicos presentes en el AE. | 71 |
| Figura 12. Variación de las cantidades relativas (%), de los metabolitos secundarios mayoritarios encontrados en Lantana camara var. acculeata con respecto a la parte de la planta empleada | 73 |
| Figura 13. Familias de compuestos presentes en el AE y extractos de hojas y flores de Lantana camara var. acculeata, graficados en el plano conformado por los CP. | 77 |
| Figura 14. Grafico del AE y extractos de hojas y flores de Lantana camara var. acculeata en el plano conformado por los CP 1 y 2. | 78 |
| Figura.15. Dendograma de conglomerados (Clusters) de las técnicas de obtención de los AE y extractos de hojas y flores de Lantana cámara var acculeata. | 79 |
| Figura 16. Espectro de masas del trans-nerolidol. | 80 |
| Figura 17. Espectro de masas del α -zingibereno. (EI 70 eV). | 82 |

LISTA DE TABLAS

| | Pág. |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|
| Tabla 1. Componentes principales del AE de Lantana camara reportados en la literatura | 30 |
| Tabla 2. Eféctos tóxicos producidos por varias especies de L. camara | 34 |
| Tabla 3. Actividad biológica de algunos compuestos de Lantana camara. | 36 |
| Tabla 6. Cantidad relativa (%) e identificación de los metabolitos volátiles y semivolátiles presentes en hojas y flores de Lantana camara var. acculeata, aislados por diferentes técnicas de extracción. | 65 |
| Tabla 7. Estudio de la reproducibilidad de áreas cromatográficas de algunos compuestos del AE, obtenidos de hojas de Lantana camara var. acculeata. | 74 |
| Tabla 8. Estudio de la reproducibilidad de áreas de algunos compuestos del AE aislado de flores de Lantana camara var. acculeata. | 75 |
| Tabla 9. Valores de varianza obtenida para los factores extraídos del PCA. | 76 |

LISTA DE FOTOS

| | Pág. |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|
| Foto N°1. Equipo tipo Clevenger para hidrodestilación asistida por radiación de microondas. | 52 |
| Foto N° 2. Equipo de SDE modificado para solventes de alta densidad, según | 53 |
| Foto N°3. Equipo tipo <i>Soxhlet</i> de alta presión (J & W Scientific Folsom. CA, EE. UU:) | 54 |
| Foto N°4. Cromatógrafo de gases Agilent Technologies 6890 Plus Serie GC System, acoplado a un detector selectivo de masas (MSD) Agilent Technologies 5973 Network y un inyector automático Agilent Technologies 7683 Series. | 55 |
| Foto N°5 Cromatógrafo de gases Agilent Technologies 6890N Network Series GC, equipado con un MSD Agilent Technologies 5975 y un inyector automático Agilent Technologies 7683B Series inyector. | 57 |
| Foto N°6. Dibujo de una planta madura de <i>Lantana camara var acculeata</i> y su identificación taxonómica. | 58 |

LISTA DE ESQUEMAS

| | Pág. |
|-------------------------------------------------------------|-------------|
| Esquema 1. Rutas de fragmentación del trans-nerolidol | 81 |
| Esquema 2. Rutas de fragmentación del α -zingibereno | 83 |

LISTAS DE ANEXOS

| | |
|---------------------------------------------------------|-----|
| Anexo 1. Cienciometría. | 96 |
| Anexo 2. Resultados del análisis de suelos. | 98 |
| Anexo 3. Contribuciones a los factores en análisis PCA. | 100 |

RESUMEN:**TÍTULO: ESTUDIO COMPARATIVO DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LOS METABOLITOS SECUNDARIOS PRESENTES EN FLORES Y HOJAS DE *Lantana camara var. acculeata* EXTRAIDOS POR DIFERENTES TÉCNICAS*****Autor:** Gladys Cristina Pinto S.****Palabras Claves:** *Lantana camara var. acculeata*, aceite esencial, metabolitos secundarios, trans-nerolidol, α -zingibereno.

Lantana camara es una planta perteneciente a la familia de las *Verbenaceas*, que se encuentra en estado silvestre en la mayoría de los casos pero que también se la puede ver como planta de jardín. La *L. cámara*, es tóxica especialmente para animales de pastoreo e invasiva en terrenos que han sido acondicionados para siembra. Sin embargo, la planta produce un número importante de metabolitos en cantidad apreciable que poseen útil actividad biológica.

La presente investigación abarca la identificación de los componentes del AE y extractos de *Lantana camara var. acculeata*, cultivada en una parcela experimental del Centro Agroindustrial piloto CENIVAM, utilizando los métodos de hidrodestilación asistida por la radiación de microondas (MWHD), destilación extracción simultánea con solvente (SDE), y extracción con fluido supercrítico (SFE). La técnica analítica GC-MS en combinación con los índices de retención de Kóvats, se utilizaron para la determinación de los componentes del AE y su cuantificación por el método de patrón interno

El AE de las hojas de *Lantana camara var. acculeata*, fue del tipo sesquiterpenoide ya que más del 50% de los componentes identificados pertenecieron a esta familia. El rendimiento del AE de hojas fue del 0.06%, mientras que el de las flores no pudo ser calculado. Los compuestos mayoritarios fueron el *trans*-nerolidol (ca.15.2%), y el α -zingibereno (10.0%) para hojas y flores respectivamente. La comparación de la composición del AE de flores y hojas arrojó resultados interesantes cualitativamente, ya que hubo compuestos en le AE de flores que le proporcionaron una nota odorífera dulce y agradable.

*Trabajo de grado.

** Universidad Industrial de Santander, Facultad de ciencias, Escuela de Química.
Directores : Elena E. Stashenko y Jairo René Martínez.

ABSTRACT

TITLE: A COMPARATIVE STUDY OF THE CHEMISTRY OF SECONDARY METABOLITES IN LEAVES AND FLOWERS OF *Lantana camara* var. *acculeata* EXTRACTED BY DIFFERENT TECHNIQUES *

Author: Gladys S. Cristina Pinto **

Keywords: *Lantana camara* var. *acculeata*, essential oils, secondary metabolites, trans-nerolidol, α -zingiberene.

Lantana camara is a plant belonging to the family *Verbenaceae*, found wild in most cases but also could be seen as a garden plant. The *L. camara*, is especially toxic to grazing animals and invasive in areas that have been prepared for planting. However, the plant produces a large number of metabolites in significant amounts that have useful biological activity.

This research includes the identification of essential oil components and extracts of *Lantana camara* var. *acculeata*, grown in an experimental plot in a pilot Agroindustrial Center CENIVAM, using the methods of hydrodistillation assisted by microwave radiation (MWHD), simultaneous distillation solvent extraction (SDE) and supercritical fluid extraction (SFE). The GC-MS analytical technique in conjunction with Kovats retention indices were used to determine the components of the essential oil and its quantification by internal standard method.

The essential oil of leaves of *Lantana camara* var. *acculeata* was sesquiterpenoid rate and that over 50% of the components identified belong to this family. The performance of the essential oil of leaves was 0.06%, while the flowers could not be calculated. The main compounds were trans-nerolidol (ca.15.2%) and α -zingiberene (10.0%) for leaves and flowers, respectively. The comparison of the composition of the essential oil of flowers and leaves interesting results qualitatively, since it was composed in essential oil of flowers which gave him a sweet and pleasant odoriferous note.

*College tesis .

**Industrial University of Santander, Faculty of Science, School of Chemistry
Directores : Elena E. Stashenko y Jairo René Martínez.

ABREVIATURAS, SIGLAS

| | |
|-----------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| AE | Aceite esencial ó aceites esenciales. |
| CENIVAM | Centro Nacional de Investigación para la Agroindustrialización de Especies Aromáticas y Medicinales Tropicales. |
| CIBIMOL | Centro de Investigación en Biomoléculas. |
| CV | Coeficiente de variación. |
| FID | <i>Flame Ionization Detector</i> (Detector de ionización en llama) |
| GC | <i>Gas Chromatography</i> (Cromatografía de Gases). |
| GLP | <i>Good Laboratory Practice</i> (Buenas Prácticas de Laboratorio) |
| HRGC-FID | <i>High Resolution Gas Chromatography Flame Ionization Detector</i> (Cromatografía de gases de alta resolución con detector de ionización en llama). |
| HRGC-MS | <i>High Resolution Gas Chromatography Mass Spectrometry</i> (Cromatografía de gases de alta resolución acoplada a espectrometría de masas). |
| MS | <i>Mass Spectrometry</i> (Espectrometría de masas). |
| MSD | <i>Mass Selective Detector</i> (Detector selectivo de masas). |
| MWHD | <i>Microwave-assisted Hydrodistillation</i> (Hidrodestilación asistida por radiación de microondas). |
| m/z | Relación masa-carga. |
| PCA | <i>Principal Component Analysis</i> (Análisis de componentes principales) |
| SDE | <i>Simultaneous Distillation-Extraction</i> (Destilación-extracción simultánea). |
| SFE | <i>Supercritical Fluid Extraction</i> (Extracción con fluido supercrítico). |
| UIS | Universidad Industrial de Santander |
| US | Dólares estadounidenses. |

INTRODUCCION

Los procesos industriales actuales, que pretenden satisfacer las necesidades de la humanidad y conservar el equilibrio medioambiental han generado el auge en la búsqueda de sustancias de origen natural que presenten diversas características similares a los compuestos sintéticos utilizados. Entre las sustancias naturales con amplia aplicación figuran los aceites esenciales, que son una mezcla compleja de metabolitos secundarios volátiles de naturaleza química variable.

Los AE se han usado desde la antigüedad para el tratamiento de enfermedades, en productos de belleza, en cultos religiosos y hasta para momificación. La “quinta esencia”, nombre dado a los AE en la Edad Media; es de gran interés en la actualidad fundamentalmente porque proviene de materias primas naturales, que los hacen amigables con el entorno. Hoy los AE tienen aplicación en forma pura o como precursores en innumerables industrias para fabricar perfumes, cosméticos, en las industrias farmacéutica, textil, de plásticos, productos del hogar, entre otros [43,46].

El aceite de *Lantana cámara*, aunque no es muy comercial, posee cualidades medicinales propias de plantas de la familia Verbenaceae como también lo son plantas de los géneros *Lippia* y *Aloysia*. La *Lantana* es una planta perenne que abunda en zonas tropicales y subtropicales pero que al tener un grado de toxicidad alto se ha convertido en uno de los 10 arbustos más perseguidos [20], tanto que se advierte a los granjeros y criadores de animales de pastoreo, de su necesaria erradicación. Sin embargo, el estudio de sus volátiles en diferentes partes del mundo (**Tabla 1**), ha revelado la presencia de compuestos de características antioxidantes, antimicrobiales y antiparasitarias [42]. Por esta razón, es necesario que a través de la actividad científica se establezca la relación

entre los efectos medicinales y la naturaleza química del AE de diferentes especies vegetales, en particular de *Lantana camara*.

El Laboratorio de Cromatografía adscrito al Centro de Investigación en Biomoléculas (CIBIMOL) de la UIS, ha trabajado en el estudio de los AE (obtención, caracterización y aplicabilidad), a través del Centro de Investigación de Excelencia, CENIVAM, cuyo objeto es la puesta en marcha a nivel piloto de la cadena productiva de aceites esenciales en Colombia, para incorporar especies vegetales a la agroindustria nacional que ya hayan sido estudiadas exhaustivamente.

La presente investigación abarca la identificación de los componentes del AE y extractos de *Lantana camara var. acculeata*, utilizando los métodos de hidrodestilación asistida por la radiación de microondas (MWHD), destilación extracción simultánea con solvente (SDE), y extracción con fluido supercrítico (SFE). La técnica analítica GC-MS en combinación con los índices de Kóvats, se utilizaron para la determinación de los componentes del AE y su cuantificación por el método de patrón interno.

Entre los resultados obtenidos en este trabajo, se resalta un bajo rendimiento obtenido del AE tanto de hojas como de flores, lo que haría difícil su comercialización. Sin embargo, las propiedades de los componentes mayoritarios encontrados hacen indeclinable el interés en la especie *Lantana camara*, que además posee habilidades de propagación y sobrevivencia en condiciones adversas, envidiadas por cualquier cultivador. Entonces nos encontramos con que cada parte de la *Lantana* (hojas, flores, frutos, etc), es fuente de sustancias promisorias activas como insecticidas, bactericidas y fungicidas [19,40].

Algunos de los resultados obtenidos durante la investigación se publicaron en las memorias del X Congreso Colombiano de Fitoquímica, que se realizó en Popayan (2009).

1. ESTADO DEL ARTE

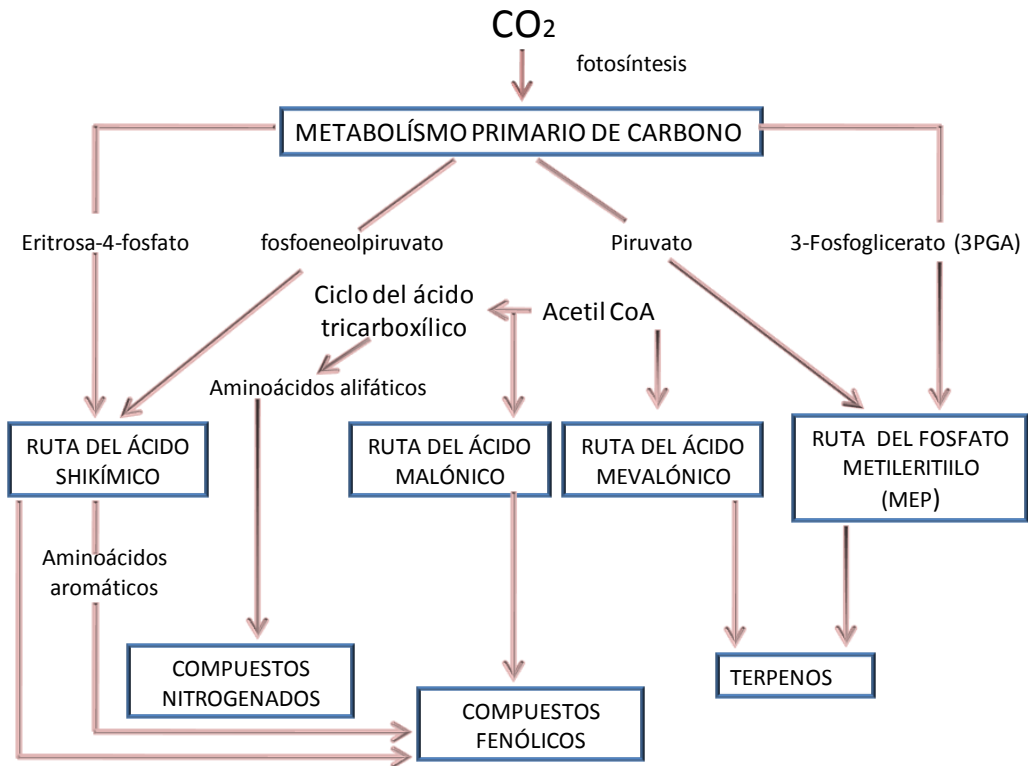
1.1 METABOLITOS SECUNDARIOS

Las plantas producen una gran variedad de compuestos orgánicos, que parecen no tener una función directa en su crecimiento, desarrollo y otras funciones vitales o del metabolismo primario. Sin embargo, en su hábitat natural las plantas están rodeadas por un gran número de enemigos potenciales, entre ellos, bacterias, virus, hongos, nematodos, insectos y herbívoros. Para defenderse, la planta emplea cierta clase de compuestos que se conocen como metabolitos secundarios [58]. Otras funciones desarrolladas por los metabolitos secundarios son servir como atrayentes de insectos en el proceso de polinización (ya sea en color, olor o tacto), como agentes en la competencia planta-planta o el trabajo simbiótico.

Los metabolitos secundarios pueden ser divididos químicamente en 3 grupos: terpenos, compuestos fenólicos y compuestos nitrogenados (Véase **Figura 1**). De éstos, se especifica la ruta metabólica de los terpenos que se presenta en la **Figura 2**.

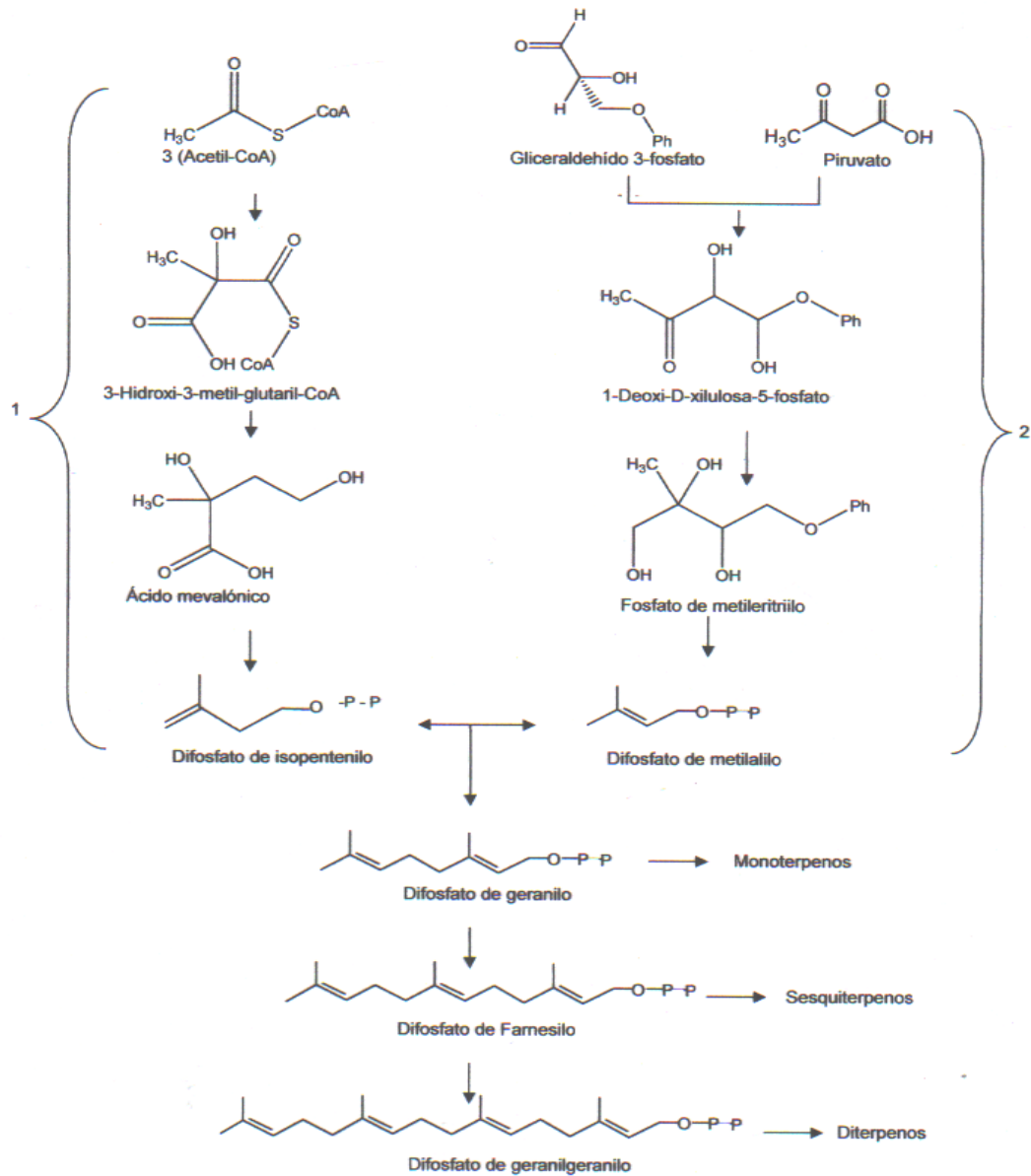
Los terpenos son sintetizados a partir de metabolitos primarios mediante dos mecanismos. Uno de los mejor estudiados, es el del ácido mevalónico, donde tres moléculas de acetyl-coenzima A se unen para formar este ácido. Este proceso se realiza de la siguiente manera: un intermediario de seis carbonos, sufre una serie de reacciones comenzando con la fosforilación del grupo del alcohol primario, seguido de la descarboxilación y deshidratación, para formar el difosfato de isopentenilo (IPP), que se convierte enzimáticamente al difosfato de dimetilalilo (DMAPP), se establece un equilibrio entre estos últimos. Estos productos son punto de partida para la síntesis de terpenos.

Figura 1. Esquema de la biosíntesis de metabolitos secundarios [58].



En otros estudios, se descubrió que el difosfato de isopentenilo también puede ser sintetizado a partir de intermediarios de la glicólisis u otras reacciones fotosintéticas y, en conjunto, formar la ruta del fosfato de metileritriilo (MEP), la cual ocurre en cloroplastos y otros plástidos. En esta ruta, el 3-fosfato gliceraldehído y dos átomos de carbono derivados del piruvato, se combinan para generar el intermediario MEP, el cual es eventualmente convertido al IPP y DMAPP [36].

Figura 2. Rutas biosintéticas de terpenos. 1. Ruta del mevalonato. 2. Ruta del fosfato de metileritriilo



A pesar de que son productos del metabolismo secundario de la planta, es importante agregar que algunos terpenos intervienen en el crecimiento o desarrollo de la planta; por ejemplo, diterpenos, como las giberelinas, que son un grupo de hormonas y triterpenos, como los brassinosteroides que es otra clase de hormona que regula el crecimiento. También, los esteroides son triterpenos que componen la membrana celular y los carotenóides, rojos, naranja y amarillos que son tetraterpenos, protegen a la planta y participan en la fotooxidación [58].

En el caso de plantas de la familia de las Verbenáceas, la producción de metabolitos secundarios se advierte con la simple consideración de sus hojas y tallos que poseen pelillos glandulares (llamados tricomas), en donde los terpenos se almacenan en un espacio de la pared celular [58].

1.2 ACEITES ESENCIALES

1.2.1 Definición

Existen diferentes definiciones de lo que es un aceite esencial, pero, en general, se tiene que: un aceite esencial o esencia, comprende un grupo de compuestos resultado del metabolismo secundario de un vegetal, extraídos mediante destilación por arrastre con vapor o hidrodestilación. Estos componentes son generalmente terpenos que están asociados o relacionados con otros compuestos orgánicos, la mayoría de ellos volátiles y en conjunto generan la fragancia de dicho vegetal [5].

Los AE son mezclas complejas de compuestos orgánicos volátiles y en su composición siempre está presente una porción de hidrocarburos de la serie polimetilénica del grupo de los terpenos con fórmula: $(C_5H_8)_n$, donde $n=2$, para monoterpenos ($C_{10}H_{16}$) y monoterpenoides ($C_{10}H_{18}O$); y $n=3$, para sesquiterpenos ($C_{15}H_{24}$) y sesquiterpenoides ($C_{15}H_{26}O$); junto con otros compuestos casi siempre

oxigenados como: alcoholes, aldehídos, ésteres, éteres y lactonas. Algunas esencias pueden contener derivados bencénicos tales como: fenoles, ésteres de hidrocarburos lineales, alcaloides, glucósidos y gran cantidad de compuestos heterocíclicos como derivados piridínicos, pirizidínicos, sulfuros y aminas [38, 46].

La hidrólisis de ciertos glicósidos, que ocurre en el protoplasma y la descomposición de la capa resinógena de la pared celular, son formas de producción de AE que generalmente están contenidos en el dictiosoma; organelos del retículo endoplasmático que contienen en su interior los productos del metabolismo secundario [27].

1.2.2 Características de los AE

Los AE pueden estar presentes en cualquier parte de la planta: en las flores (rosa, ylang-ylang, geranio), en la cáscara de frutas (naranja, limón, mandarina), en las hojas (eucalipto, limonaria, ciprés), en la corteza (canela, cedro), en las semillas (cardamomo, anís, eneldo), y en las raíces (sándalo, valeriana) [43].

Los AE tienen olor pronunciado y penetrante, de aspecto oleoso, líquidos a temperatura ambiente, solubles en alcohol absoluto, éter de petróleo y demás solventes orgánicos, poco solubles o insolubles en agua. Además son de fácil alteración bajo la acción del aire, la luz, la humedad, el calor y otras sustancias contaminantes [46].

Según Günther [21] la densidad de los AE varía entre 0.8—2.0 g/mL (15 °C), el índice de refracción entre 1.46—1.61 (20 °C), la gravedad específica varía en el rango de 0.696—1.188 (15°C), y los puntos de ebullición entre 150 y 300 °C.

1.2.3 Usos de los AE en la industria y su importancia económica

De acuerdo con sus propiedades, los aceites esenciales se utilizan ampliamente en diversos campos, por ejemplo, los aceites de eucalipto y limón se emplean principalmente en la industria farmacéutica debido a su acción terapéutica; el aceite de rosas se usa en perfumería; las esencias de elevado contenido fenólico tales como las de clavo y tomillo tienen propiedades antisépticas y algunas poseen actividad antiespasmódica, etc. También se ha demostrado, que los componentes de muchos AE interfieren negativamente en la respiración de diversas bacterias; por ende se usan en la conservación de alimentos y en productos cosméticos [5].

Según datos del Centro Económico Mundial [2]; el 50 % de los AE se usa en saborizantes especialmente, en bebidas; de 5% a 10% se emplea en fitoterapia y aromaterapia; de 20 a 25% se utiliza en fragancias y de 20 al 25% en química, para aislamiento de compuestos.

Como novedad, surgió un interés particular en la utilización de los AE en terapias alternativas, específicamente aromaterapia y aromacología por el efecto sedante y tranquilizador que ejerce el determinado olor sobre pacientes con enfermedades graves.

El valor comercial de los aceites esenciales, al igual que su uso, dependen básicamente de su composición química, la cual, a su vez, se ve afectada por diversos factores a saber: condiciones geobotánicas, métodos de cultivo, época de recolección, partes de la planta y métodos de obtención del aceite. Estas variables, lo desgastado de las cosechas y la falta de clasificación química adecuada, hacen que varíe el precio de los AE a escala mundial [5].

Diez esencias [25] representan el 85% del mercado mundial; ellas son: naranja, limón, menta, citronela, cedro, eucalipto, litsea, lemongras, lavanda y lavandinas. Sin embargo, existen más de 160 tipos de aceites esenciales que se manejan en

el mercado en menor proporción, la mayoría de éstos se utilizan en fragancias y como saborizantes.

En cuanto a las exportaciones mundiales los 6 principales países son: Estados Unidos con el 28%, Francia con el 15%, Reino Unido con el 8%, Brasil con el 7%, China con el 6% y Argentina también con el 6%. Observando el panorama de las importaciones se tiene que los Estados Unidos lidera con el 40%, le sigue el bloque occidental Europeo con el 30% y Japón con el 7%. No obstante, los porcentajes presentados, son los países en vías de desarrollo como Guatemala, Indonesia, India y México, los principales proveedores de aceites esenciales, puesto que los costos de su producción en estos países son más reducidos [41].

El libro anual de la Unión Internacional de Comercio indicó que el mercado mundial de aceites crece a un ritmo del 10% anual, y es alentador, ya que en el año 98 en el mundo se exportaron US\$ 7.435 millones e importaron US\$ 6.811 millones. Más recientemente en el 2003, la Unión de Estadísticas Comerciales [2], estimó la producción mundial de AE en 130.000 toneladas con un valor aproximado de US\$ 1 billón.

La industria de fragancias y sabores utiliza unas 700 materias primas (naturales o sintéticas), en cantidades mayores de 100 t/año; de éstas, unas 300 son de origen vegetal y se pueden dividir en 3 grandes categorías: aceites esenciales, productos aislados de esencias y productos obtenidos por semisíntesis a partir de esencias. El mercado mundial de productos naturales para sabores y fragancias representa US\$ 4.000 millones por año y los AE representan unas 48.000 t/año [5].

1.3 LANTANA CAMARA VAR. ACCULEATA

Figura 3. *Lantana camara* var. *acculeata* (complejo agroindustrial piloto CENIVAM).



El género *Lantana* fue descrito por primera vez en 1753 por Linnaeus, quien descubrió siete especies en total, seis de Sur América y una de Etiopía. El nombre *Lantana* proviene del latín antiguo “*Viburnum*” que significa arbustillo (follaje e inflorescencia pequeños). Este arbusto que pertenece a la familia Verbenaceae, de la cual existen más de 150 especies y parientes herbáceos, es nativo de zonas tropicales y subtropicales de América, pero alrededor del siglo XVI fue llevada a Europa y otras partes del mundo [19].

El nombre *camara* es un término coloquial del este de la India de donde provienen estudios importantes sobre esta planta [19]. La especie es un tanto difícil de describir taxonómicamente debido a la extendida hibridización y a los cambios que sufre la planta con la edad, especialmente, en su inflorescencia. La planta se conoce en varias partes del país con diferentes nombres, entre ellos se

encuentran: “sanguinaria”, “venturosa”, “cariaquita”, “gurupacha” y “cariaquillo” [19].

La variedad “acculeata” mide aproximadamente 60 cm de alto, se presenta bien ramificada, sus hojas son opuestas, pecioladas, subcordadas, dentadas con dientes agudos ovado-oblongas u oblongo-acuminadas, de 6 a 7 cm de largo y 2 - 4.5 cm de ancho. Las flores son sésiles y se encuentran en cabezuelas o corimbos globosos apretados y presentan 2 colores, 4 estambres didinamos, ovario de 4 celdas (con óvulos en cada uno). Los frutos son drupáceos, semiglobosos, carnosos y morados [18].

Por lo llamativo de su colorido, el crecimiento del ramaje y la reacción a la poda, las Lantanas han sido ampliamente usadas como cerca viva y, por supuesto, son abundantes en los jardines. Por su toxicidad y agresivo crecimiento (pues se extiende rápidamente y es invasiva), se la tiene en la lista de los 10 arbustos más nocivos [53,54]. Sin embargo, donde se han hecho estudios de terreno se ha encontrado que la Lantana mejora la fertilidad, especialmente, en suelos rocosos, grava y laterita; sirve para retener el humus en áreas desforestadas y es rica en elementos esenciales como potasio y manganeso.

1.3.1 Usos etnofarmacológicos

Diferentes partes de la planta se usan popularmente en sistemas tradicionales de medicina. Se emplea para el tratamiento de diferentes problemas como: cortadas, dolores, úlceras, hinchazones, fiebre, catarro, eczema, tétanos, malaria, tumores y reumatismo, entre otros. En el Salvador se utilizan las hojas y flores en infusión como antipirético; en Colombia se emplea la planta entera en decocción para facilitar el parto y como emenagogo; en Panamá se administra para controlar enfermedades de la piel y problemas digestivos; en Brasil la hoja sirve de tónico y febrífugo; en Guatemala se le atribuyen propiedades curativas de heridas, úlceras y contusiones e infecciones de la piel; y en México la raíz se utiliza para curar la

disentería y el dolor de muelas, entre otras [22]. Además se le atribuye a la *Lantana* propiedades estimulantes en los centros sensoriales e imaginativos así como propiedades tónicas pronunciadas.

1.3.2 Composición química

En la **Tabla 1** se presentan los principales componentes encontrados en el AE de *Lantana cámara*, cultivada en diferentes partes del mundo. Las composiciones difieren cualitativa- y cuantitativamente incluso en la misma región y ello es debido a la influencia no sólo de factores climáticos sino también condiciones de cultivo, pisos térmicos, edades de la planta e incluso régimen de crecimiento. Aparte está el método analítico que se haya empleado y las condiciones de la extracción.

Tabla 1. Componentes principales del AE de *Lantana cámara* reportados en la literatura

| INVESTIGADORES | AÑO | PAÍS | PARTE DE LA PLANTA | COMPUESTOS MAYORITARIOS | |
|--------------------------------|------|---------------|--------------------|--------------------------------|-----------------------|
| | | | | | Cantidad Relativa (%) |
| Peyron <i>et al</i> [40] | 1972 | Islas Comores | Hojas y flores | α -Humuleno | 21.8 |
| | | | | β -Cariofileno | 15 |
| | | | | γ -Terpineno | 7.7 |
| | | | | Citral | 16-22 |
| Salleh and Ahmed [40] | 1974 | Egipto | Flores | α -Cariofileno | 6-13 |
| | | | | β -Felandreno | 5-10 |
| | | | | β -Cariofileno | 19.8 |
| Mahmud <i>et al.</i> [40] | 1979 | Pakistán | Flores | Selineno | 13.8 |
| | | | | 1.8-Cineol | 10.4 |
| | | | | α -Farneseno | 29 |
| Singh and Manavalan [40] | 1991 | India | Partes aéreas | α -Felandreno | 16 |
| | | | | Longifoleno | 10 |
| | | | | β -Cariofileno | 19 |
| Möllenbeck <i>et al.</i> [40] | 1997 | Madagascar | Hojas | δ -3-Careno | 15 |
| Nagassoum <i>et al.</i> [40] | 1999 | Madagascar | Hojas y flores | Davanona | 12 |
| Nagassoum <i>et al</i> [40] | 1999 | Camerún | Hojas y flores | β -Cariofileno | 25 |
| | | | | Cariofileno –Epoxido | 7 |
| Da Silva <i>et al.</i> [11] | 1999 | Brasil | Partes aéreas | Limoneno | 16.5 |
| | | | | α -Felandreno | 16.4 |
| | | | | Germacreno-D | 13.2 |
| | | | | (-)- γ -Curcumeno-15-al | 14.9 |
| Weywerstahl <i>et al.</i> [60] | 1999 | Brasil | Partes aéreas | (-)-epi- β -Bisabolol | 13.8 |
| | | | | ar-Curcumeno | 9.7 |
| | | | | Sabineno | 33.43 |
| Fathy <i>et al.</i> [16] | 2000 | Egipto | Hojas y flores | 1,8-Cineol | 6.64 |

| | | | | | |
|-------------------------------------|------|------------|----------------|-----------------------------|-----------|
| | | | | tras- β -Cariofileno | 10.60 |
| | | | | Sabineno | 16.5-7.3 |
| Sefidkon [51] | 2001 | Irán | Hojas y flores | β -Cariofileno | 14.0-22.5 |
| | | | | 1,8-Cineol | 10-6.0 |
| | | | | Germacreno- | 20.5 |
| | | | | γ -elemeno | 10.3 |
| Khan <i>et al.</i> [28] | 2001 | India | Hojas | β -Cariofileno | 9.4 |
| | | | y | | |
| | | | Flores | β -elemeno | 14.5 |
| | | | | Germacreno-D | 10.6 |
| | | | | α -Copaeno | 10.7 |
| | | | | β -Cariofileno | 24.6 |
| Oyedeeji <i>et al.</i> [44] | 2003 | Nigeria | Hojas | α -Humuleno | 19.5 |
| | | | | Sabineno | 8.8 |
| | | | | Biciclosesquifelandreno | 16-18 |
| Stashenko <i>et al.</i> [55] | 2003 | Colombia | Partes aéreas | Trans- β -Cariofileno | 14-15 |
| | | | | α -zingibereno | 5-6 |
| | | | | (E)-Nerolidol | 43.4 |
| Pino <i>et al.</i> [45] | 2004 | Cuba | Hojas | γ -Cadineno | 7.6 |
| | | | | α -Humuleno | 4.9 |
| | | | | β -Cariofileno | 23.3 |
| Rana <i>et al.</i> [47] | 2005 | India | Hojas | α -Humuleno | 11.5 |
| | | | | Germacreno D | 10.9 |
| | | | | GermacrenoD | 15.85 |
| Sundufu <i>et al.</i> [57] | 2004 | China | Partes aéreas | β -Cariofileno | 12.35 |
| | | | | α -Humuleno | 9.31 |
| | | | | Davanona | 22-25 |
| Randrianalijaona <i>et al.</i> [48] | 2005 | Madagascar | Partes aéreas | β -Cariofileno | 11-13 |
| | | | | Sabineno | 9-11 |
| | | | | Cariofileno | 13.57 |
| Chowdhury <i>et al.</i> [9] | 2007 | Bangladesh | Hojas | α -Cariofileno | 11.76 |
| | | | | Germacreno D | 10.88 |

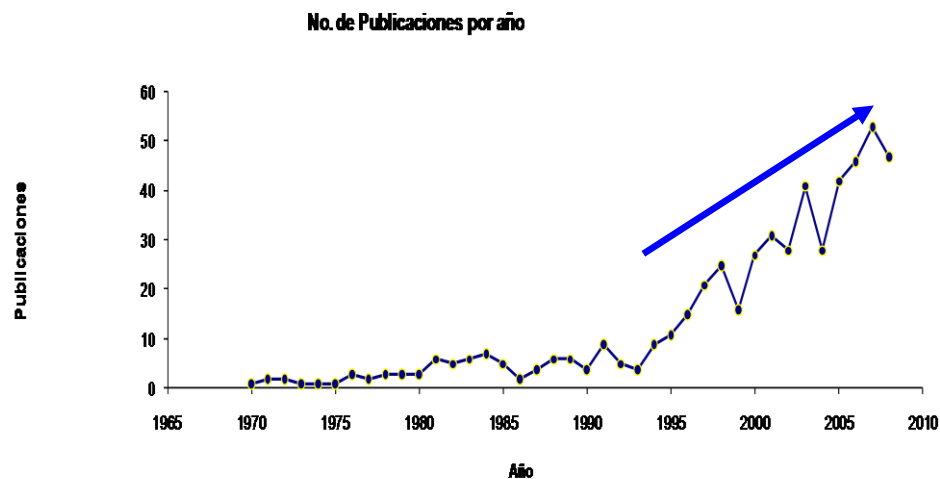
Fuente: autora del proyecto

1.3.3 Análisis diacrónico de la producción científica

El signo de nuestro tiempo está presidido por importantes transformaciones a escala mundial que van desde el preocupante cambio climático hasta la revolución tecnológica en el campo de las comunicaciones, configurando una nueva sociedad, la sociedad de la información y el conocimiento. Teniendo en cuenta esto, es necesario revisar en forma categorizada la información atinente al tema de investigación para poder aprovechar cada indicador cuantitativo y orientar la investigación de la mejor manera

(una definición extensa sobre bibliometría se encuentra en el **Anexo 1**). A continuación, se analiza la base de datos *Scopus* (Elsevier), utilizando “*Lantana camara*” como palabra-clave, parámetro de búsqueda con resultados discriminados así: 482 artículos, 22 revisiones, 4 artículos de prensa, 10 artículos en conferencias, 4 notas, 3 cartas y 20 publicaciones indefinidas.

Figura 4. Número de publicaciones sobre Lantana cámara, según la base de datos Scopus (Elsevier B.V). Ecuación de búsqueda: TITLE-ABS-KEY (“Lantana camara”). Número de registros: 545. Años 1965-2009. Fecha de consulta: 2 de mayo de 2009

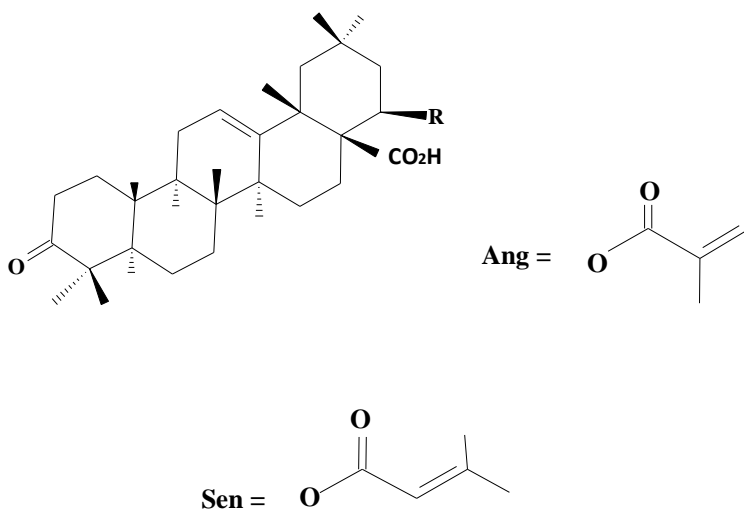


Este análisis determinó que la investigación-producción sobre este tópico no fue importante hasta los 80, apareciendo en años anteriores publicaciones con carácter ocasional según referencias consultadas. El crecimiento en esta área se acentúa a partir del año 1995 y la tendencia de aumento se conserva en la actualidad, aunque se han producido algunas bajas intermitentes en la producción intelectual en el periodo analizado.

1.3.4 Toxicología

L. camara es tóxica en cantidades determinadas (60 mg/kg por ingestión y 1-3 mg/kg vía intravenosa); habiéndose reportado casos de envenenamiento en Australia, India, Nueva Zelanda, Suráfrica y América [54].

De 29 especies, 8 han resultado tóxicas para animales de pastoreo en Australia, con presencia de los Lantadenos A (Ang) y B (Sen), que se muestran abajo, en concentraciones de 80 mg/kg y 200 mg/kg [52]. Sin embargo, la toxicidad no es acumulativa y sólo reviste gravedad cuando se consumen grandes cantidades en una sola ingesta.



Los lantadenos A, B, D, el derivado hidroxilado del A y el ácido icterogénico son los compuestos que causan el mayor daño presentándose como signos visibles de la intoxicación, la fotosensibilización en la piel y, por ello, dermatitis 2 días después de la ingestión de la *L. camara*; el síntoma se agrava extendiéndose a grandes áreas de la piel que luego se necrotizan. Otros síntomas son la pérdida de apetito, la ictericia y el amarillamiento de la membrana esclerótica y otras mucosas. El envenenamiento lleva a la muerte de animales de pastoreo en un tiempo de 1 a 3 semanas [19].

Las toxinas encontradas en la especie bajo análisis, también tienen efecto sobre los seres humanos, pero hasta ahora no hay reportes sobre muerte por esta causa [53]. En la **Tabla 2** se presenta la afectación que produce el envenenamiento por ingestión de *L. cámara*, observada en algunos países.

Tabla 2. Efectos tóxicos producidos por varias especies de *L. camara* [53].

| PLANTA | PAIS | ESPECIE AFECTADA | SÍNTOMAS |
|----------------------|----------------|--------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| L. cámara | Sur Africa | Ganado | Anorexia, severa depresión rumial, amarillamiento de las mucosas, estasis negra |
| | Florida EE.UU. | Caballos | Naríz rosa, colitis, hígado amarillento y dermatitis severa. |
| | | Perros | Vómito de sangre y daño hepático |
| | | Niños | Vómito, nauseas, dolor abdominal, pupilas dilatadas. |
| | Texas EE.UU. | Canguros | Anorexia, depresión, hígado inflamado, opacidad de las córneas, ictericia, dermatitis en orejas, manchas e hinchamiento general. |
| | Cuba | Ganado | Altos niveles de urea, ictericia, hepatitis tóxica, dermatitis, leucositosis neutrofilica. |
| | México | Ganado y ovejas | Depresión, inapetencia, constipación, eritema, pasividad en movimientos rumiales. |
| | Sur Africa | Cabras | Ictericia severa, constipación, deshidratación, hepatosis, distensión de la vesícula biliar. |
| | Nueva Zelanda | Ganado y ovejas | Colestásis, ictericia, fotosensibilización. |
| | India | Ganado | Anorexia, severa costipación, ictericia, peladuras en la piel, fotosensibilización y muerte. |
| | India | Ganado | Piel altamente necrotizada, embotamiento, anorexia. |
| | India | Ovejas y cabras | Anorexia, depresión, ojos amarillentos, hinchamiento de cara. |
| | India | Ovejas | Ictericia, costipación. respiración acelerada, edema de oídos, peladura de labios y ano. |
| Australia | Ganado | Enfermedad hepatotóxica. | |
| <i>L. camara</i> | India | Ovejas | Anorexia, anemia, ictericia, hinchamiento de orejas labios y rostro, orina oscura. |

| | | | |
|----------------------------|--------|------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <i>var acculeata</i> | India | Ganado y Bufalos | Anorexia, constipación, hinchamiento de cara, escoriación en el ocico, párpados hinchados y amarillentos, ictericia severa. |
| <i>L. camara var nivea</i> | Brasil | Ganado | Fotosensibilización y muerte. |
| <i>L. glutinosa</i> | Brasil | Ganado | Sensibilización hepatogénica. |

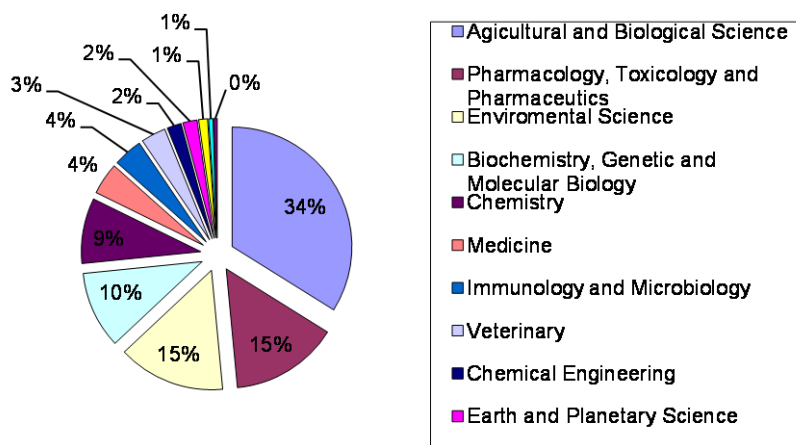
Fuente: Sharma [53].

1.3.5. Análisis por área de aplicación.

De las 10 áreas observadas en la base de datos; se destaca el área de agricultura y biología, principalmente, por los efectos tóxicos de la *Lantana*. Sin embargo, las áreas de farmacéutica y bioquímica también tienen un porcentaje importante ya que el concepto de planta nociva está evolucionando debido a la profundización en el estudio de sus componentes.

Figura 5. Número de publicaciones sobre *Lantana cámara*, según el área de aplicaciones encontradas en la base de datos Scopus (Elsevier B.V). Ecuación de búsqueda: TITLE-ABS-KEY (“*Lantana camara*”). Años 2000-2009. Fecha de consulta: 2 de mayo de 2009.

Publicaciones según el Area de Aplicación



1.3.6 Actividad biológica del AE de *Lantana cámara*

Los aceites esenciales de muchas especies de la familia Verbenaceae han despertado el interés de los científicos desde hace aproximadamente 40 años, puesto que éstos se han utilizado en medicina popular para tratar enfermedades tan importantes como la malaria. Los extractos de *Lantana camara* han exhibido propiedades antibacteriales, cardiotónicas, antipiréticas y antiespasmódicas [8]. Estudios fitoquímicos, han resultado en el aislamiento de varios esteroides, terpenoides y alcaloides que se han identificado como los responsables de las propiedades curativas que presenta la especie. Otras investigaciones se han realizado para conocer la aplicabilidad de los componentes del AE de *Lantana* como insecticida [7], agente antibacterial [24] y antimicrobial [50].

Un ejemplo concreto de la molécula con propiedades antimicrobiales, es el triterpeno Ursolato acetato cuya estructura se observa en la **Figura 6**. Éste compuesto posee probada actividad contra el *estafilococcus aureus* y *estafilococcus tyfi* [19]; con un índice de 1.6 y 0.8, respectivamente, comparando el *S. aureus* con cloramfenicol y el *S. tyfi* con tetraciclina en concentración de 30 µg/placa.

Tabla 3. Actividad biológica de algunos compuestos de *Lantana camara*.

| COMPUESTO | VARIEDAD DE LANTANA | PARTE DE LA PLANTA | ACTIVIDAD BIOLÓGICA |
|-----------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------|------------------------------|----------------------------------------------------------------------------|
| Lantadeno A (ácido 22β-angeloxy-3-oxoolean-12-en-28-oico) | <i>L. camara</i> variedades roja, naranja y rosada. Blanca | Hojas y tallos Raices | Antimicrobial Antiviral Antitumoral Antitubercular Alelopática |
| Lantadeno B (ácido 22β-dimetilacrililoxy-3-oxoolean-12-en-28-oico) | <i>L. camara</i> variedad roja | Hojas y tallos | Antiviral |
| Ácido 22β-isobutiroiloxi-3β-hidroxiolean-12-en-28-oico | <i>L. camara</i> variedad roja | Hojas y tallos | Antiviral |
| Ácido 22β-dimetilacrililoxy-3β- hidroxiolean-12-en-28-oico | <i>L. camara</i> variedad roja | Hojas y tallos | Antiviral |
| Icterogenin | | | |

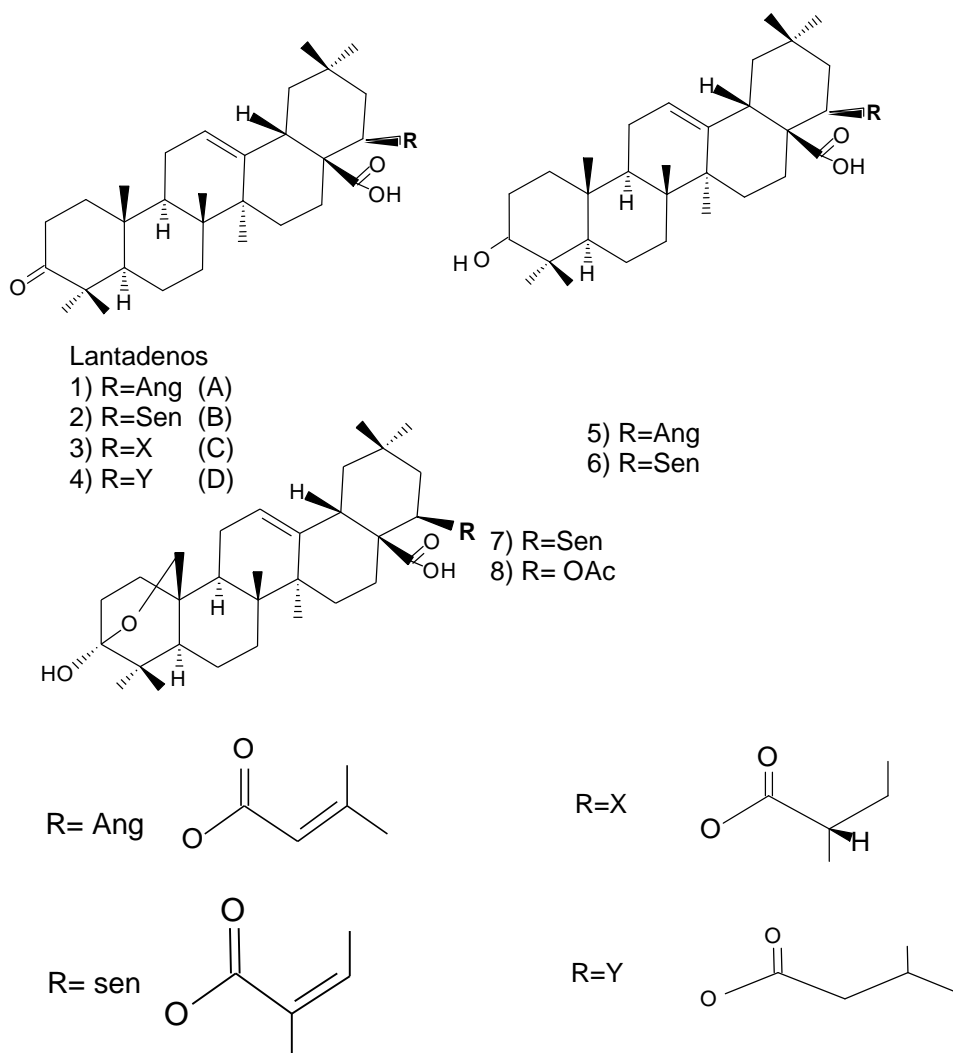
| | | | |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (ácido 22 β -angeliloxy-24-hidroxi-3-oxoolean-12-en-28-oico) | <i>L. camara</i> variedad naranja | Hojas y tallos | Hepatotóxico |
| Ácido oleanónico (ácido 3-oxoolean-12-en-28-oico) | | | Antiinflamatorio Inhibe la síntesis del leucotrieno |
| Ácido oleanólico (ácido 3 β -hidroxiolean-12-en-28-oico) | <i>L. camara</i> Variedades roja, naranja, rosada, blanca. <i>L. tiliaefolia</i> <i>L. indica</i> | Hojas, tallos y raíces | Antimicrobial Hepatoprotectivo Antiinflamatorio Antiperlipidémico Antitumoral Inhibe la glicógeno fosforilasa. |
| Ácido ursólico (ácido 3 β -hidroxours-12-en-28-oico) | <i>L. camara</i> * <i>L. tiliaefolia</i> <i>L. indica</i> | Hojas tallos y raíces | Antibacterial Hepatoprotectivo Antiinflamatorio Antitumoral |
| Ácido camarínico (ácido 22 β -acetoxo-3,25-epoxy-3 α -hidroxio-12-ursen-28-oico) | <i>L. camara</i> * | Partes visibles | Nematicida |
| Umuhengerina (5-hidroxy-6,7,3',4',5'-pentametoxy flavona) | L. trifolia | Hojas | Antibacterial |
| Camarasido (3,5-dihidroxy-4',6-dimetoxyflavonol-7-O-glucopiranosido) | <i>L. camara</i> * | Hojas | Antitumoral |
| Linarosido (7-O-(β -D-glucopiranosil)-6,4'-dimetoxy-5-hidroxy flavona) | <i>L. camara</i> * | Partes Visibles | Nematicida |
| Constituyentes del aceite esencial: β -cimeno, α -felandreno, α -pineno, cadineno, linalol, cineol, γ -terpineno y dipenteno | <i>L. camara</i> * | Hojas | Antibacterial |

Fuente: Sharma [53].

Otros triterpenos importantes son los compuestos No.7 y 8 (**Figura 6**), que son derivados del ácido oleanólico y que muestran actividad antimutagénica alta probada en ratas; produciendo un retroceso de la enfermedad en 76.7 y 60% respectivamente, comparada con la mitomicina, en concentración de 6.75 mg/kg.

Los lantadenos A-C y los compuestos 5 y 6, (**Figura 6**), inhibieron el virus Epstein-Bar y también son considerados valiosos inhibidores de promotores tumorales. Además de éstos, otros compuestos de la familia de los glicósidos y las quinonas han sido aislados de las diferentes partes de la *Lantana camara* [19].

Figura 6. Triterpenos de importancia biológica en el control de enfermedades.



1.3.7 Control biológico de *L. cámara*

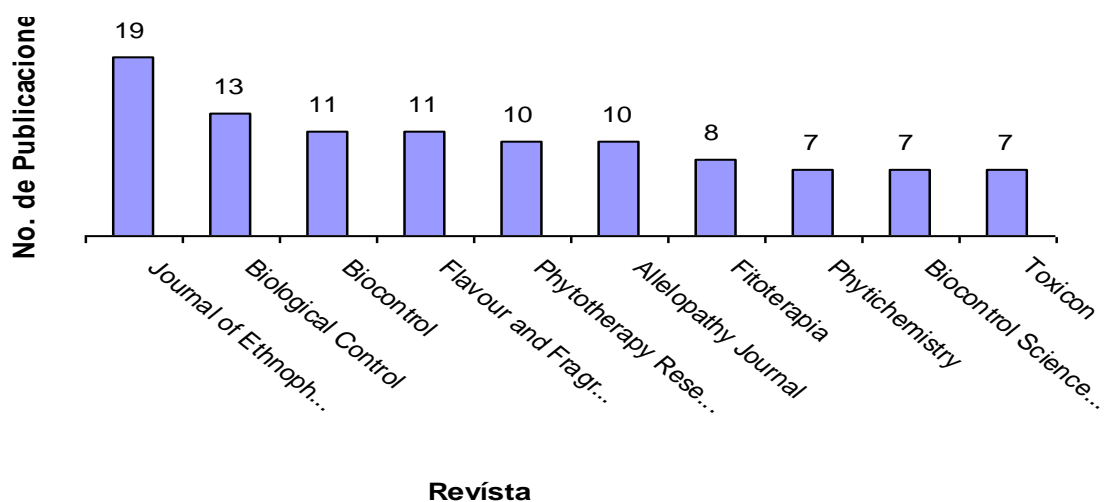
Hace aproximadamente 100 años que se ha tratado de erradicar a *L. camara* de los sitios donde esta planta se ha convertido en invasiva. Sin embargo la hibridización que se produce entre especies y variedades, junto a otros factores, complican un control adecuado [61].

La *Lantana camara* se considera como uno de los arbustos más nocivos y han sido muchos los agentes de su control, que se han probado, por ejemplo los insectos fitófagos [33]. Algunas de las especies controladoras utilizadas con éxito en Surafrica son: *Ofiomyia camarae* (Diptera: Agromizidae) y *Teleonemi scrupulosa* (Heteroptera : Tingidae), ambas especies actúan como inhibidores del crecimiento y capacidad reproductiva de la planta y se han presentado reducciones de más del 50% de la biomasa y niveles de población [10].

La erradicación de la *Lantana* se da, porque además de su toxicidad que afecta los rebaños de animales de pastoreo, se considera que la planta causa la degradación de la pastura y de los bosques nativos por competencia. Entre los países interesados en erradicar la planta se encuentran Australia, Sudáfrica, México, Brasil, Estados Unidos y otros [12].

1.3.8 Análisis del tipo de publicación

Figura 7. Número de publicaciones sobre *Lantana camara* según el medio de publicación encontrados en la base de datos Scopus (Elsevier). Ecuación de búsqueda TITLE-ABS-KEY (“*Lantana camara*”). Años 2000-2009. Fecha de consulta: 2 de mayo de 2009.



En este análisis, se han considerado sólo aquellas revistas que al menos han editado 7 o más documentos relativos al tópico analizado. Aquí el factor de impacto es el indicador considerado por la comunidad de investigadores como uno de los más importantes índices en la evaluación de la investigación.

En el gráfico se muestra que el interés mayoritario por la investigación sobre *Lantana camara* se presenta por las revistas de Control Biológico, que están en el segundo y tercer lugar después de la revista de Etnofarmacología, esto debido a la consideración de la planta como maleza y a las muchísimas alusiones que se encuentran sobre planta en medicina popular; pero también se observa un creciente interés de las revistas donde se reportan estudios pertinentes en agroindustria y fitoquímica, principalmente.

Los siguientes son los 3 autores más prolíficos que escribieron estudios sobre *Lantana camara* en orden decreciente:

Sharma O.P.

Dawra R.K.

Begum S.

El primer autor, estudia aspectos relacionados con la toxicidad de la *Lantana*; siendo la India el país de donde proceden estos estudios. En orden de importancia, los demás autores escriben sobre usos de biocontrol de la especie y se resaltan algunas investigaciones sobre su función antimicrobial.

1.4 MÉTODOS DE OBTENCIÓN DE LOS AE Y EXTRACTOS

Los aceites esenciales y extractos se pueden obtener por diversos métodos, los cuales se han desarrollado de acuerdo con las propiedades de los compuestos

presentes en éstos y según la parte de la planta empleada. Se resumen los métodos más apropiados para la extracción del aceite esencial de *Lantana camara* con base en estudios anteriores realizados con plantas de la misma familia por ejemplo, *Lippia alba*; en Colombia y otras partes del mundo [13, 26].

1.4.1 Hidrodestilación asistida por la radiación de microondas

Actualmente, se ha popularizado el uso de la radiación de microondas (MW) como agente acelerador en la extracción del AE. En la hidrodestilación (HD), el agua se calienta por la acción de las microondas; este calentamiento ocasiona la ruptura de los sacos y receptáculos oleíferos de las células del vegetal, liberando líquidos orgánicos los cuales se dispersan y se disuelven en el solvente usado (cuando se utilice), que debe ser transparente a la radiación, por ejemplo, CCl₄, hexano o tolueno [13].

La principal ventaja de esta técnica es su rapidez, pues pueden lograrse extracciones en minutos; en el ámbito de laboratorio no representa gran gasto económico y los productos de la extracción se encuentran libres de contaminantes, además se evita la descomposición térmica de terpenos.

1.4.2 Destilación extracción simultánea con solvente

Un método ideal de extracción debe ser rápido, simple y económico; producir una recuperación cuantitativa de analitos sin pérdida, ni degradación, y muestras listas para análisis inmediato, sin su concentración adicional ni fraccionamiento y que además no genere desechos de laboratorio. Sin embargo, muchos de los métodos usados para la estimación de los componentes del material orgánico volátil que son comúnmente aplicados, resultan en una severa pérdida, pues las soluciones que contienen el extracto deben ser concentradas por evaporación.

Nickerson y Likens en 1964, precisamente pensando en solucionar algunos inconvenientes de las técnicas extractivas desarrollaron el equipo que provee una condensación simultánea del vapor destilado y del solvente orgánico inmiscible con agua. Ambos líquidos son continuamente recirculados y así los compuestos solubles son transferidos de la fase acuosa al solvente. De esta forma, los componentes pueden ser cuantitativamente evaluados. Según Godefroot *et al.* [20], la única desventaja visible de la técnica es el paso último de evaporación del solvente, por ello, los autores modificaron el método de Nickerson y Likens para microescala sin concentración del extracto.

Las ventajas más importantes de este método son:

1. Una simple operación para remover los compuestos volátiles de la matriz biológica y concentrarlos.
2. Requiere volúmenes pequeños de solvente (2mL), reduciendo la formación de artefactos en la etapa de su concentración.
3. Se logra la recuperación de los compuestos aromáticos con gran eficiencia.
4. El sistema puede ser operado bajo presión y temperatura reducidas; así se disminuye la posibilidad de descomposición de compuestos.
5. No requiere el paso de concentración adicional.

1.4.3 Extracción con fluido supercrítico

Las investigaciones de 20 años atrás [14] sobre la naturaleza peligrosa de muchos solventes comúnmente usados, los costos y el daño medioambiental de éstos, por los vapores peligrosos arrojados a la atmósfera; llevaron al desarrollo de un método alternativo para extraer muestras con fluido supercrítico.

- **Definición**

Una sustancia que está por encima de su presión y temperatura críticas está definida como fluido supercrítico. Esta sustancia existe como una fase fluida con características de ambas fases, gas y líquido.

- **Propiedades del fluido**

Las propiedades especiales de los fluidos cerca al punto crítico hacen de ellos el medio ideal para la transferencia de masa. Principalmente, una densidad alta favorece la capacidad para disolver. La difusividad molecular del fluido es substancialmente más alta que la de los líquidos normales; además la viscosidad es casi tan baja como la de los gases, lo que facilita el bombeo y la convección natural. La densidad del fluido a una temperatura y a una atmósfera reducida, varía entre 0.9 y 1.2 g/L. Comparando, la densidad reducida del solvente puede cambiar de un valor de 0.1 g/L como vapor, a 2.5 g/L como líquido, lo que designa al fluido supercrítico como poseedor de la solvencia de un líquido excepcional [23].

- **Características del fluido utilizado**

El dióxido de carbono (CO_2), ha sido utilizado para la mayoría de estudios de SFE, principalmente, por sus características prácticas atractivas: bajas temperatura y presión críticas (31.3 °C y 73 bar), baja toxicidad, alta pureza y bajo costo. Sin embargo, el dióxido de carbono supercrítico no tiene la suficiente fuerza como solvente a la presión típica en que trabaja (80 a 600 atm), para extraer cuantitativamente analitos muy polares [17, 23].

En términos generales, el dióxido de carbono es excelente medio para la extracción de especies no polares tales como alcanos y terpenos y también es adecuado para especies moderadamente polares como hidrocarburos aromáticos

policíclicos (PAHs), bifenilos policlorados (PCBs), aldehídos, ésteres, pesticidas organoclorados, alcoholes y grasas. A todo esto hay que agregar que se considera como regla general que: “compuestos que puedan ser analizados por medios cromatográficos pueden ser cuantitativamente extraídos por SFE de dióxido de carbono” [23].

1.5 ANÁLISIS DE LA COMPOSICIÓN DEL AE Y EXTRACTOS

1.5.1 Cromatografía de gases de alta resolución

Los aceites esenciales son mezclas de más de 300 componentes cuya fracción volátil representa del 90-95% [27], por eso se requiere de una técnica de separación eficiente como la cromatografía de gases de alta resolución (HRGC) que ha demostrado resultados adecuados en un amplio rango de compuestos [15].

Los siguientes son bloques principales que conforman el cromatógrafo: Un inyector (*split-splitless*), una columna capilar para separación de mezclas y un detector que puede ser selectivo. Para análisis de los AE se usa un detector de ionización en llama (FID), considerado como un detector casi universal.

1.5.2 Interpretación de los cromatogramas.

En la identificación de los componentes de un aceite esencial o un extracto, el parámetro a observar es el tiempo de retención de cada uno de los componentes de la muestra problema. Cuando se lleva a cabo la caracterización de la muestra, es muy difícil hacer reproducibles todos los parámetros cromatográficos que afectan el tiempo de retención; entonces se recurre a realizar una medición relativa de estos tiempos comparándolos con el componente de referencia que se añade a la muestra, que usualmente son hidrocarburos lineales u otra serie homóloga [35].

El sistema de índices de retención, propuesto por Kováts, permite describir la interacción específica entre el soluto y la fase estacionaria. Expresa el comportamiento de los tiempos de retención de un compuesto a lo largo de una escala uniforme usando como referencia una serie de *n*-parafinas. Adicionalmente, para hacer reproducibles los análisis es importante hallar los índices de Kováts en dos columnas de polaridad diferente [37].

La identificación de los componentes se realiza mediante la comparación de los índices de Kováts, reportados en la literatura, con los calculados para el analito y para las sustancias patrón analizados bajo las mismas condiciones. Los índices de retención [37] pueden ser calculados tanto para condiciones isotérmicas como para la temperatura programada mediante las siguientes ecuaciones:

Índice de Kováts para régimen isotérmico:

$$I_K = 100n + 100 \left[\frac{\log t_x - \log t_n}{\log t_N - \log t_n} \right] \quad (1)$$

Índice de Kováts para régimen de temperatura programada:

$$I_K = 100n + 100 \left[\frac{t_x - t_n}{t_N - t_n} \right] \quad (2)$$

Donde $n < N$

n = Número de átomos de carbono en el *n*-alcano que eluye antes del compuesto de interés.

t_x = Tiempo de retención del analito.

t_n = Tiempo de retención del *n*-alcano que eluye antes del compuesto de interés.

t_N = Tiempo de retención del *n*-alcano que eluye después del compuesto de interés.

- **Estandarización externa**

Este método consiste en preparar soluciones de trabajo de los compuestos patrón de las sustancias que se suponen se encuentran en la muestra problema, que se analizan bajo las mismas condiciones cromatográficas que las muestras a cuantificar [37]. Con los datos obtenidos de las áreas cromatográficas de los compuestos patrón, se construye una curva de calibración y se hallan los factores de respuesta. La concentración de cada soluto en la muestra se obtiene mediante la siguiente ecuación:

$$C_i = R_F a_i \quad (3)$$

Donde, C_i = concentración del analito

R_F = factor de respuesta del detector

a_i = área del analito en la muestra.

- **Estandarización interna**

Este método implica la adición de una sustancia-patrón de concentración conocida, que debe eluir cerca de los compuestos de interés, pero sin interferir con éstos, además debe ser estructuralmente similar a los componentes que se cuantifican. La concentración del analito se determina mediante la siguiente relación:

$$RRf = \left[\frac{C_i / a_i}{C_{istd} / a_{istd}} \right] \quad (4)$$

Donde:

C_i = concentración del analito

RR_F = factor de respuesta relativo al estándar interno

C_{istd} = concentración de estándar interno

a_{istd} = área cromatográfica del estándar interno

a_i = área cromatográfica del analito

Este método tiene las siguientes ventajas:

1. La posibilidad de inyectar el patrón con la muestra, lo cual minimiza errores en la preparación de la muestra y en su inyección.
2. La cuantificación de múltiples componentes permite obtener resultados más reproducibles [37].

En general, la HRGC proporciona información sobre la complejidad de las muestras y cantidad de sus componentes; sin embargo, para establecer plenamente la identidad del compuesto esta técnica se acopla a la espectrometría de masas (MS) o a la espectroscopía de infrarrojo (IR).

1.5.3 Cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas

En esta técnica se combinan la habilidad de la HRGC para separar los componentes de una mezcla compleja con la capacidad de la espectrometría de masas (MS) para identificarlos lo que convierte la técnica GC-MS en una poderosa herramienta capaz de separar e identificar múltiples componentes presentes en una muestra en cantidades muy pequeñas, 10 pg [13].

El procedimiento de la HRGC-MS, consiste en la separación de los compuestos en la columna cromatográfica; luego, las sustancias separadas se conducen a la cámara de ionización, que presenta un alto vacío y las moléculas pueden moverse

libremente e interactuar con los electrones de alta energía (70 eV), formando iones moleculares con exceso de energía que se fragmentan en sus iones respectivos. Los fragmentos positivos son separados de acuerdo con su relación m/z y se registran con sus intensidades, en forma de espectros de masas. Estos espectros ofrecen información sobre la identidad de la molécula al ser comparados con los de la base de datos o con los de sustancias patrón (35).

La HRGC-MS, permite realizar en una sola operación, para muestras del volumen de 1 μL , un análisis cualitativo junto con una indicación de las proporciones de los componentes [13].

1.6 ANALISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES

El análisis de componentes principales (PCA), es una técnica estadística que fue propuesta a principios del siglo pasado por Karl Pearson como parte del análisis de factores. Sin embargo, la complejidad de los cálculos retrasaron su desarrollo hasta la aparición de los computadores y su utilización en la segunda mitad del siglo XX.

En estadística, el PCA es una técnica utilizada para reducir la dimensionalidad de un conjunto de datos. Intuitivamente la técnica sirve para determinar el número de factores subyacentes explicativos tras un conjunto de datos que muestren la variabilidad de éstos.

Podría afirmarse que el objetivo principal que persigue el PCA es la representación de las medidas numéricas de distintas variables en un espacio de pocas dimensiones donde nuestros sentidos puedan percibir relaciones que de otra manera permanecerían ocultas en dimensiones superiores. Dicha representación debe ser tal que al desechar dimensiones superiores

(generalmente de la tercera o cuarta en adelante) la pérdida de información sea mínima [30].

Técnicamente, el PCA busca la proyección según la cual, la información quede mejor representada en términos de mínimos cuadrados. El PCA se emplea sobre todo en el análisis exploratorio de datos y para construir modelos predictivos.

Básicamente lo que se hace es construir un nuevo sistema de coordenadas ortogonales en el cual los puntos puedan ser representados de una manera tal que sus proyecciones sobre el nuevo primer eje recojan la mayor cantidad posible de variación y las representaciones sobre el segundo eje recoja el resto de variación. Una vez seleccionados los componentes principales, éstos se representan en una matriz.

Existen métodos para calcular el PCA, entre los que están el basado en las covarianzas y el basado en las correlaciones.

1.6.1 Método basado en las covarianzas

Es el más usado cuando todos los datos son homogéneos y tienen las mismas unidades. Cuando se usan valores muy variables o magnitudes que tienen unidades diferentes, resulta más adecuado para interpretar los resultados el método basado en correlaciones, que siempre es aplicable sin restricción alguna.

1.6.2 Método basado en correlaciones

El método parte de la matriz de correlaciones, donde se considera el valor de cada una de las m variables aleatorias F_j . Para cada uno de los n individuos se toma el valor de estas variables y se escribe el conjunto de datos en forma de matriz:

$$\left(F_j^\beta \right)_{j=1, \dots, m}^{\beta=1, \dots, n} \quad (5)$$

Obsérvese que cada conjunto

$$\mathcal{M}_j = \{F_j^\beta | \beta = 1, \dots, n\} \quad (6)$$

Puede considerarse una muestra aleatoria para la variable F_j . A partir de los $m \times n$ datos correspondientes a las m variables aleatorias, puede construirse la matriz de correlación muestral que viene definida por:

$$\mathbf{R} = [r_{ij}] \in M_{m \times m} \quad \text{con } r_{ij} = \frac{\text{cov}(F_i, F_j)}{\sqrt{\text{var}(F_i)\text{var}(F_j)}} \quad (7)$$

Puesto que la matriz de correlaciones es simétrica entonces resulta diagonalizable y sus valores propios λ_i se verifican:

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i = 1$$

Debido a la propiedad anterior, estos m valores propios reciben el nombre de casos de cada uno de los m componentes principales. Los factores principales identificados matemáticamente se representan por la base de vectores propios de la matriz \mathbf{R} . Es claro, que cada una de las variables puede ser expresada como combinación lineal de los vectores propios o componentes principales.

2. PARTE EXPERIMENTAL

2.1 RECOLECCIÓN DEL MATERIAL VEGETAL

Hojas y flores de *Lantana camara* var. *acculeata*, se recolectaron de individuos sembrados en parcelas ubicadas en el Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM; éstas no constituyeron un cultivo sistemático. Las plantas, fueron adaptadas a un suelo, cuyo análisis se presenta en el **Anexo 2**, y se tomaron las muestras de un periodo de maduración de 3 meses en adelante. Las plantas fueron reproducidas a través de esquejes de una planta madre cultivada en la ciudad de Bucaramanga. Las porciones de muestra para las extracciones comprendieron individuos sin distinción de tamaño, tope o ras de la planta, color o estado de deterioro (especialmente para la MWHD que requiere gran cantidad de muestra, comparado con las otras 2 técnicas de extracción).

2.2 OBTENCIÓN DEL AE Y EXTRACTOS DE LANTANA CÁMARA VAR ACCULEATA

Se emplearon las técnicas MWHD, SDE y SFE para obtener un perfil completo de los metabolitos secundarios volátiles de *Lantana camara* var *acculeata*. Según el procedimiento descrito en el trabajo Stashenko y colaboradores [56].

2.2.1 Hidrodestilación asistida por la radiación de microondas

Para la extracción por éste método se empleó material vegetal fresco, de un peso aproximado de 300 g. Las plantas fueron podadas y separadas las hojas de las flores. En el caso de las hojas, éstas se picaron para aumentar el área de contacto. Todos los datos de peso de las muestras se tomaron en una balanza analítica METTLER TOLEDO AG 285.

La metodología empleada fue desarrollada por Stashenko y colaboradores [56]. Se usó un equipo tipo Clevenger con reservorio de destilación Dean-Stark y calentamiento con un horno microondas LG modelo MS-1242ZK, con potencia de

salida de 800 W y frecuencia de radiación de 2.5 GHz. Se adicionaron 300 mL de agua destilada en cada extracción, la muestra se irradió por un periodo 80 min en 4 secciones de 20 min, con el horno al 70%. La **Figura 8** muestra una vista general del equipo empleado en la destilación. El rendimiento del AE se obtuvo por relación de pesos del aceite esencial y el material vegetal empleado.

Para el análisis GC-MS, se tomaron 50 μ L del aceite y se preparó una muestra con 0.5 μ L de *n*-tetradecano como estándar interno usando diclorometano como agente de dilución.



Foto N°1. Equipo tipo Clevenger para hidrodestilación asistida por radiación de microondas.

2.2.2 Destilación- extracción con solvente simultánea

En la **Foto N°1** se observa el cuerpo extractor y sujetos a éste, a la derecha, balón de muestra en baño de aceite, a la izquierda, el solvente en baño de agua. En la parte superior aparece una conexión donde un refrigerante ayuda en el proceso de destilación.

Los extractos se obtuvieron aplicando la metodología descrita por Godefroot *et al* [46]. Se utilizaron 16.30 g de material vegetal fresco (hojas y flores, respectivamente), al cual se le adicionaron 40 mL de agua destilada. Se utilizaron 4 mL de diclorometano en el balón de muestra y 2 mL en el cuerpo del extractor. Las temperaturas del baño de aceite y del baño de agua fueron 110 y 65°C, respectivamente. El tiempo total de la extracción fue de 1 h y 45 min.

El extracto resultante se secó con sulfato de sodio anhidro, luego, se concentró con nitrógeno, y se le adicionaron 0.5 µL del patrón interno (*n*-tetradecano), se aforó a 1 mL con diclorometano, y la muestra quedó lista para su análisis GC-MS.

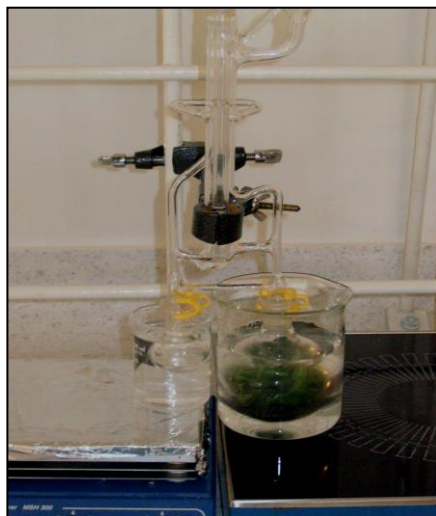


Foto N° 2. Equipo de SDE modificado para solventes de alta densidad, según

2.2.3 Extracción con fluido supercrítico

Los extractos fueron obtenidos usando 10 g de muestra de hojas y flores. La extracción se realizó en un equipo de extracción tipo *Soxhlet* de alta presión (J & W Scientific Folsom. CA, EE.UU.), empleando 300 g de CO₂ como disolvente (**Foto N° 3**). El equipo fue sumergido en un baño María a 52°C, donde el sistema alcanzó una presión de 1100 psi. El tiempo de extracción fue de 2 horas. Posteriormente, el sistema fue enfriado hasta conseguir una presión de 500 psi, después de ello se inició la despresurización por volatilización de CO₂. Los extractos fueron recogidos en diclorometano y trasvasados a tubos, donde fueron concentrados con una corriente de nitrógeno, hasta un volumen inferior a 1 mL y se les adicionaron 0.5 µL de *n*-tetradecano como *istd*, aforando a 1 mL con el mismo solvente. Las muestras así preparadas fueron pasadas a viales estándar de 1.5 mL, para su posterior análisis por GC-MS. Este procedimiento se llevó a cabo por triplicado, para obtener datos de reproducibilidad.



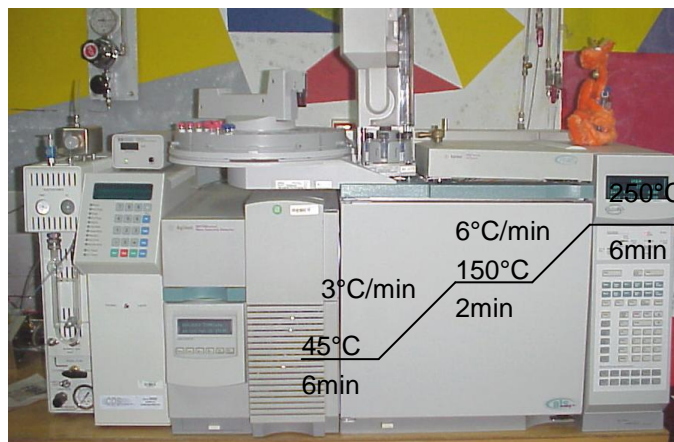
Foto N°3. Equipo tipo *Soxhlet* de alta presión (J & W Scientific Folsom. CA, EE. UU:)

2.3 CARACTERIZACIÓN DE AE Y EXTRACTOS

Para los análisis cualitativo y cuantitativo de los AE y extractos, que se realizaron por GC-MS, se utilizaron dos columnas capilares de polaridad diferente.

2.3.1 Separación por columna apolar

La columna capilar utilizada de sílice fundida fue: DB-5MS (J & W *Scientific Folsom*, CA., EE.UU.) de 60 m X 0.25 mm (d.i.) X 0.25 μm (d_f), con fase estacionaria de 5%-fenil-poli(metilsiloxano). La programación de temperatura del horno fue de 45 °C (5 min) @ 5 °C/min, hasta 150 °C (2 min) @ 4 °C/min, hasta 250 °C (5 min), @ 10 °C/min, hasta 275 °C (15 min). El análisis se realizó en un equipo GC *Agilent Technologies 6890 Plus* (HP, Palo Alto, CA, EE.UU.), acoplado a un detector selectivo de masas *Agilent Technologies MSD 5973 Network*, equipado con un puerto de inyección *split/splitless* (250 °C, relación *split* 1:30) y in inyector automático *Agilent 7863*. En la **Foto N° 4** se observa el equipo descrito y los parámetros operacionales empleados.



Agilent Technologies 6890 Plus-MSD

Foto N°4. Cromatógrafo de gases Agilent Technologies 6890 Plus Serie GC System, acoplado a un detector selectivo de masas (MSD) Agilent Technologies 5973 Network y un inyector automático Agilent Technologies 7863 Series.

Los espectros de masas se obtuvieron por impacto de electrones (EI), de 70 eV de energía. Las temperaturas de la cámara de ionización y de la línea de transferencia fueron 230 y 285 °C, respectivamente. El gas de arrastre utilizado fue helio (99.995%, Aga Fano, S.A.), con flujo constante de 1 mL /min.

Las corrientes iónicas reconstruidas (TIC), fueron obtenidas en un analizador cuadrupolar, con un barrido automático de frecuencia (*full scan*), a 4.75 scan/s en el rango de masas m/z 40-350.

Los componentes de los AE y extractos se identificaron por medio de la comparación de los índices de Kováts calculados y los encontrados en la literatura [2]; también con base en los espectros de masas que se confrontaron con los de las bases de datos Adams, Nist05 y Wiley7N.

2.3.2 Separación por columna polar

Se utilizó una columna capilar DB-WAX (J & W *Scientific Folsom*, CA., EE.UU.) de 60 m X 0.25 mm (d.i.) X 0.25 μm (d_f), con fase estacionaria entrecruzada e inmobilizada de poli(etilenglicol). La programación de temperatura del horno fue de 45 °C (5 min) @ 3 °C/min, hasta 150 °C (3 min) @ 4 °C/min, hasta 220 °C (5 min). El cromatógrafo empleado fue un *Agilent Technologies 6890N Network series* GC acoplado al detector selectivo de masas *Agilent Technologies 5975*. Se utilizó un inyector automático *Agilent Technologies 7683B series injector*, el puerto de inyección *split/splitless* estuvo a 250 °C con relación *split* de 1:50. Los demás parámetros operacionales fueron los mismos del literal anterior. En la **Foto N°5** se observa el equipo descrito y los parámetros operacionales empleados.



Foto N°5 Cromatógrafo de gases Agilent Technologies 6890N Network Series GC, equipado con un MSD Agilent Technologies 5975 y un inyector automático Agilent Technologies 7683B Series inyector.

3. ANÁLISIS DE RESULTADOS

3.1 IDENTIFICACIÓN BOTÁNICA

La caracterización taxonómica de la planta se llevó a cabo en el Instituto de Ciencias Naturales, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia (Bogotá). El pliego testigo de la planta quedó depositado como muestra permanente en el Herbario Nacional Colombiano (COL, Bogotá), así: *Lantana camara var. acculeata*, No. COL 512100. La planta fue clasificada por el doctor Jose Luís Fernandez. En la **Foto N°.6** se muestra la identificación taxonómica general de la planta.

Foto N°6. Dibujo de una planta madura de *Lantana camara var acculeata* y su identificación taxonómica.



Ficha taxonómica general:

- Reino: *Plantae*
- Phylum: *Embryophyta*
- Clase: *Magnoliopsida* (dicotiledonias)
- Orden: *Lamiales*
- Familia: *Verbenaceae*
- Género: *Lantana*
- Especie: *cámara*
- Variedad: *acculeata*

3.2 ANÁLISIS DE SUELOS

El análisis del suelo de las parcelas del Centro de Investigación de Excelencia, CENIVAM, fue realizado por el Laboratorio de Suelos de la UIS, dirigido por el Dr. Jaime Camargo. Las muestras se tomaron de 5 puntos diferentes en el área del total la parcela de cultivo; en hoyos de 40 cm se obtuvieron muestras de cada

capa de suelo extraído. Los resultados del análisis de suelos se resumen en la **Tabla Nº 4**, en el **Anexo 2** se encuentra la tabla completa.

Tabla Nº 4. Resumen del análisis fisicoquímico de la parcela de siembra de *Lantana cámara var acculeata*.

| Textura | Acidez | Materia orgánica | Nitrógeno total (N) | Elementos menores | Nivel de sodio (Na) |
|--------------------------|---------------|-------------------------|----------------------------|--------------------------|----------------------------|
| Franco-arcilloso arenoso | Mediana | Bajo | Bajo | Bajo | Normal |

Los resultados mostrados en la **Tabla 4** indicaron que el suelo del cultivo tenía un contenido bajo en minerales y elementos menores, por lo que fue necesario enriquecerlo con nutrientes para el desarrollo óptimo de la especie (e.g. tratamiento con abono y la adición de elementos importantes como el nitrógeno). Sin embargo, la *Lantana camara* es una planta silvestre que a menudo se encuentra en la orilla de los caminos y muchos la catalogan como maleza. Esto indica la persistencia de la planta en sitios con condiciones adversas.

3.3 RENDIMIENTO DEL AE

El AE de hojas frescas de *Lantana camara var. acculeata* obtenido mediante MWHD presentó un olor intenso y penetrante y un color verde traslúcido. El rendimiento del AE de esta parte de la planta fue de 0.03 a 0.06% (p/p).

El rendimiento del AE de las flores de *Lantana camara var. acculeata* no se pudo determinar, debido a la poca cantidad extraída, sin embargo, para su análisis por GC-MS fue necesario disolverlo en la trampa Dean-Stark con diclorometano (2 mL).

En la **Tabla Nº 5** se indican rendimientos de AE obtenidos de hojas y flores para diferentes variedades de *Lantana cámara*, reportados en la literatura.

Tabla N° 5. Rendimientos de AE de *Lantana camara* reportados en la literatura

| Parte de la planta | Rendimiento (%) | País | Referencia |
|---------------------------|------------------------|----------------------|---------------------------------------|
| Hojas y flores | 0.05-0.08 (v/p) | India | [Khan, M. <i>et al</i>] |
| Hojas | 0.44 (p/p) | Nigeria | [Oyedeji. O.A. <i>et al</i>] |
| Hojas y flores | 0.63 (p/p) | Irán | [Sefidkon, F.] |
| Hojas y flores | 0.18 (p/p) | Madagascar | [Randrianalijaona J.A. <i>et al</i>] |
| Hojas y flores | 0.06 y 0.08 (v/p) | Madagascar y Camerún | [Ngassoum M.B. <i>et al</i>] |

Con base en los datos, que se muestran en la **Tabla 5**, se observó que el AE obtenido de hojas de *Lantana camara var acculeata*, presentó un rendimiento bajo, ya que la mayoría de las especies aromáticas comerciales presentan rendimientos mayores que el 0.1 % [31].

3.4 COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL AE Y EXTRACTOS DE *Lantana camara var. acculeata*.

A fin de obtener datos representativos sobre la composición de los metabolitos volátiles y semivolátiles aislados de hojas y flores de *Lantana camara var. acculeata*, se utilizaron las técnicas de MWHD, SDE y SFE para la extracción. Los extractos y AE fueron analizados por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS), usando los parámetros operacionales expuestos en la **Sección 2.3** de la Parte Experimental.

Los metabolitos volátiles aislados por MWHD fueron detectados por GC-MS, se encontraron 82 y 66 componentes respectivamente para hojas y flores, en cantidades relativas >0.03%. De ellos, se identificaron positivamente por RI (en columnas polar y apolar) y MS (EI, 70 eV), 74 y 54 compuestos que representaron el 90 y 81% respectivamente, bajo los parámetros de integración aplicados (umbral de integración, *Thshd* = 18 y área de rechazo de pico de base = 0.05).

Por el método SDE los compuestos detectados fueron 56 y 36 para hojas y flores respectivamente, en las mismas cantidades relativas que para MWHD y se identificaron positivamente 47 y 35 compuestos, que representaron el 83 y el 97%, bajo los parámetros de integración: $Thshd = 16$ y área de rechazo de pico de base = 0.05. Por SFE se detectaron 73 y 40 compuestos (para hojas y flores, respectivamente), y se identificaron positivamente 50 y 29 compuestos, que representaron el 68 y 73%; bajo los parámetros de integración : $Thshd = 14$ y área de rechazo de pico de base 0.05.

En las **Figuras 8 y 9** se observan los perfiles cromatográficos obtenidos, que corresponden a las mezclas de compuestos aislados por MWHD, SDE y SFE de hojas y flores de *Lantana camara* var *acculeata*, respectivamente.

En la **Tabla 6** se registran la identificación y la cantidad relativa (%) de los compuestos presentes en los AE y extractos en hojas y flores de *Lantana camara* var. *acculeata*, así como sus t_R e RI calculados a partir de los tiempos de retención en las dos columnas de fases estacionarias ortogonales.

El aceite esencial de las hojas de *Lantana* presentó un color verde aceituna y una nota odorífera herbácea intensa. Este aceite, es del tipo sesquiterpenoide, puesto que más del 50% de su composición la representan compuestos del tipo $C_{15}H_{24}$ y sus productos de oxidación. El componente mayoritario fue el *trans*-nerolidol (ca.15.2%); este sesquiterpeno oxigenado es junto con el farnesol, uno de los compuestos clave en la biosíntesis de sesquiterpenos [39]. También es un prometedor coadyuvante de los medicamentos utilizados contra la Leishmaniasis [5], y es efectivo contra algunas cepas de microorganismos patógenos [3,8,29].

El aceite esencial de las flores de *Lantana camara* var. *acculeata* presentó un tono ligeramente amarillo a la vista y nota odorífera dulce y agradable. Este aceite también fue de carácter sesquiterpenoide; teniendo como componente mayoritario

el α -zingibereno (ca. 10%). El zingibereno es el principal componente del jengibre que tiene muchos usos medicinales y además se utiliza ampliamente en perfumería [59].

En la **Tabla 1**, se observa que sólo la composición del AE de *Lantana cámara*, cultivada en Cuba, coincide con el componente mayoritario, el *trans*-nerolidol encontrado en esta investigación. En cambio el α -zingibereno, sólo aparece como compuesto mayoritario en el AE de *Lantana camara* descrito por Stashenko y colaboradores [55]. Estas coincidencias se deben, probabelmente a que la zona tropical dónde se cultivan es similar, sin embargo, la variedad estudiada es diferente pues ambos estudios se realizaron con la variedad roja de flor o “banderita española”. Como se anotó en la primera parte del libro, los factores que influyen en el resultado de la identificación pueden ser varios, pero debe haber una constante que represente la especie o en este caso la variedad investigada. Estos marcadores a los que se hace referencia, se buscan entre los componentes mayoritarios, sin embargo, es difícil establecerlos aquí con tantas fuentes de variación y no se han encontrado estudios más asequibles a esta comparación.

FIGURA 8. Perfiles cromatográficos de los AE y extractos de hojas de Lantana cámara, obtenidos por diferentes técnicas . A. MWH, B. SDE, C. SFE. Columna DB-5 (60 m), split 1:30, MSD (EI, 70 eV).

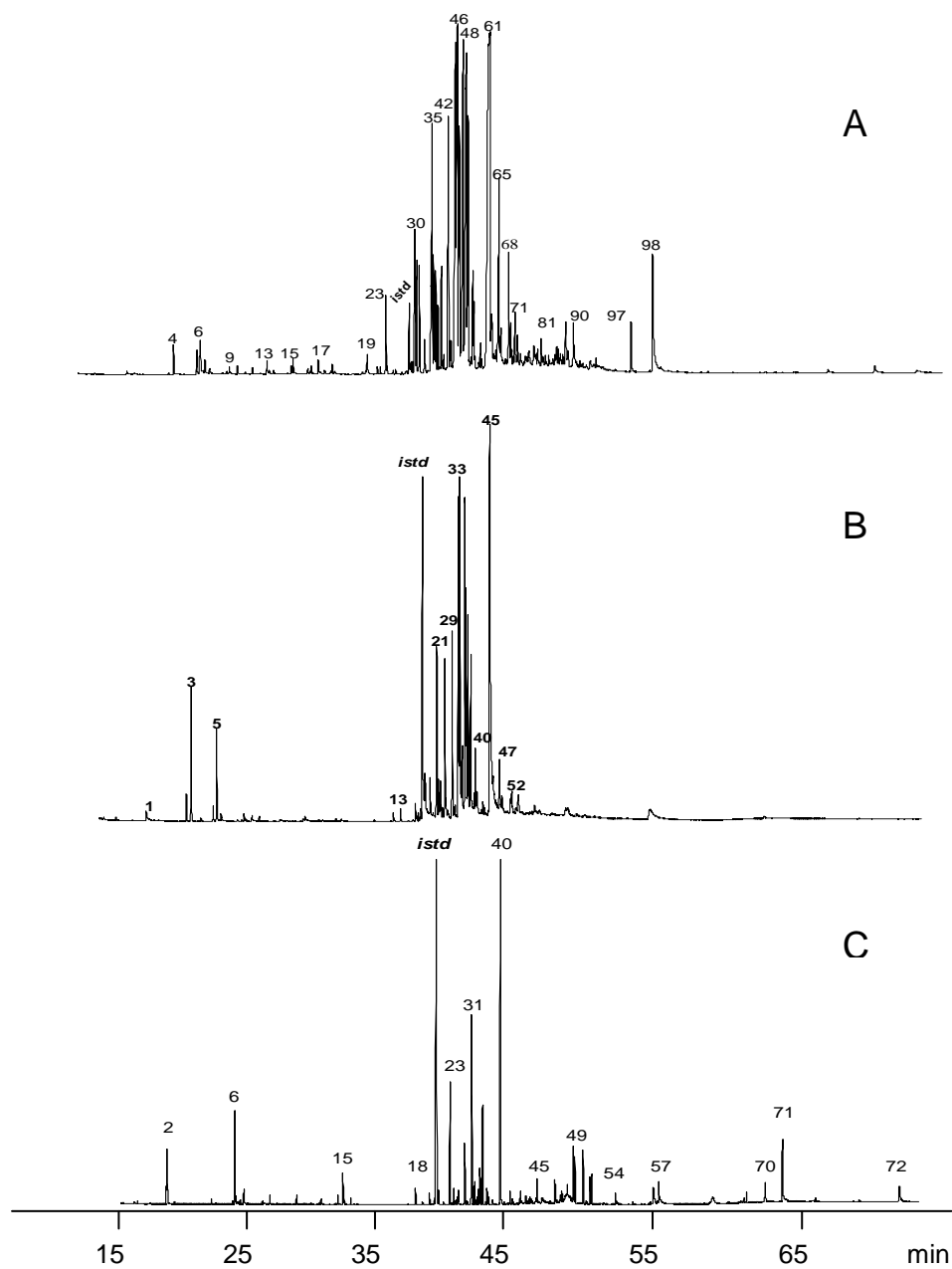


FIGURA 9. Perfiles cromatográficos de los AE y extractos de flores de *Lantana cámara*, obtenidos por diferentes técnicas D. MWHD, F. SDE, G. SFE. Columna DB-5 (60 m), split 1:30,

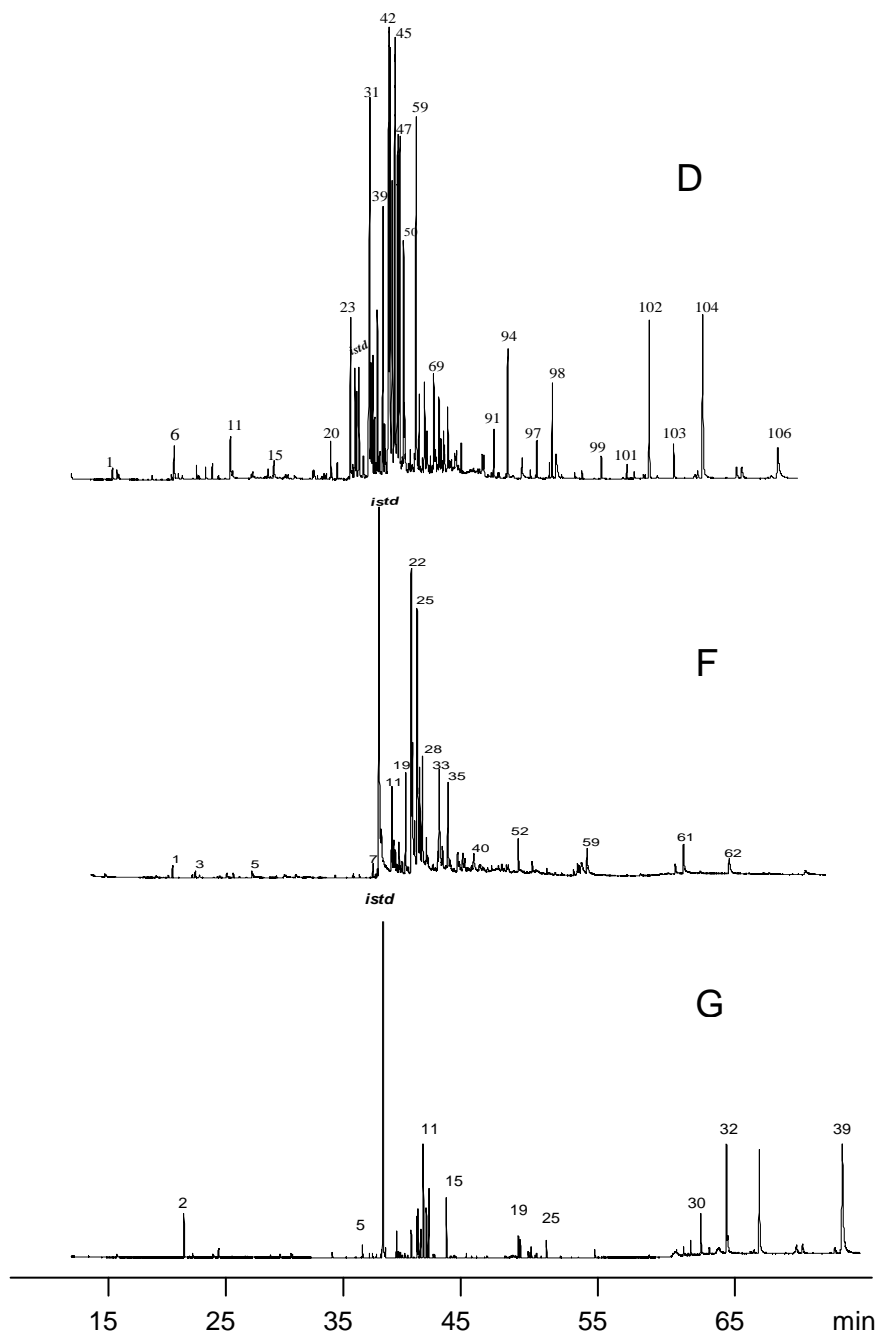


Tabla 6. Cantidad relativa (%) e identificación de los metabolitos volátiles y semivolátiles presentes en hojas y flores de *Lantana camara* var. *acculeata*, aislados por diferentes técnicas de extracción.

| Pico ^a | Compuestos | Tipo | RI ^b | | Cantidad Relativa ^c (% ± s)(n=3) | | | | | |
|-------------------|---------------------------------------|------|-----------------|--------|----------------------------------------------|-------------|--------------|-------------|-------------|-------------|
| | | | DB-5 | DB-WAX | MWHD | | SDE | | SFE | |
| No. | | | | | Hojas | Flores | Hojas | Flores | Hojas | Flores |
| 1 | <i>trans</i> -2-Hexenal | OC | 846 | | ----- | ----- | ----- | ----- | 0,66 ± 0,03 | ----- |
| 2 | <i>cis</i> -3-Hexenol | OC | 850 | 1382 | ----- | tr | 0,39 ± 0,03 | ----- | 2,71 ± 0,41 | ----- |
| 3 | α-Tujeno | M | 924 | 1022 | ----- | ----- | 0,51 ± 0,05 | ----- | ----- | ----- |
| 4 | α-Pineno | M | 937 | 1017 | 0,13 ± 0,1 | tr | 2,59 ± 0,14 | 0,55 ± 0,03 | 0,23 ± 0,01 | ----- |
| 5 | Sabineno | M | 976 | 1115 | 0,12 ± 0,1 | tr | 0,33 ± 0,005 | 0,28 ± 0,09 | 0,13 ± 0,01 | ----- |
| 6 | β-Pineno | M | 982 | 1101 | 1,28 ± 0,3 | tr | 1,97 ± 0,03 | ----- | 0,38 ± 0,03 | ----- |
| | +1-Octen-3-ol | OC | | | | | | | 4,04 ± 0,26 | 2,48 ± 0,29 |
| 7 | 3-Octanol | OC | 988 | | ----- | ----- | ----- | ----- | 0,81 ± 0,02 | ----- |
| 8 | β-Myrceno | M | 990 | 1159 | 0,09 ± 0,1 | tr | 0,20 ± 0,04 | ----- | 0,19 ± 0,02 | ----- |
| 9 | Limoneno | M | 1033 | 1193 | 0,06 ± 0,1 | tr | 0,17 ± 0,03 | ----- | 0,10 ± 0,02 | ----- |
| 10 | <i>trans</i> -β-Ocimeno | M | 1047 | 1247 | 0,09 ± 0,1 | tr | 0,20 ± 0,02 | 0,30 ± 0,08 | ----- | ----- |
| 11 | γ-Terpineno | M | 1062 | | ----- | tr | 0,14 ± 0,04 | 0,32 ± 0,04 | ----- | ----- |
| 12 | <i>cis</i> -Hidrato de sabineno | MO | 1074 | 1993 | 0,08 ± 0,1 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 13 | Linalol | MO | 1100 | 1542 | 0,26 ± 0,1 | 0,48 ± 0,1 | ----- | 0,31 ± 0,17 | 0,41 ± 0,01 | ----- |
| | + 2-Metilbutirato de 2-metilbutilo | OC | | | | | | | | ----- |
| 14 | <i>cis</i> -Verbenol | MO | 1148 | | 0,15 ± 0,1 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| | + <i>trans</i> -Pinocarveol | OC | | | | | | | | ----- |
| 15 | <i>trans</i> -Verbenol | MO | 1151 | | 0,38 ± 0,12 | ----- | 0,15 ± 0,02 | ----- | 0,27 ± 0,05 | ----- |
| 16 | Terpinen-4-ol | MO | 1187 | 1637 | 0,11 ± 0,1 | ----- | ----- | ----- | 0,34 ± 0,06 | ----- |
| 17 | α-Terpineol | MO | 1200 | 1700 | 0,16 ± 0,1 | 0,22 ± 0,1 | ----- | ----- | 0,27 ± 0,01 | ----- |
| 18 | Isovalerato de <i>cis</i> -2 hexenilo | OC | 1229 | | 0,10 ± 0,1 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 19 | Carvacrol | OC | 1302 | 2206 | 0,27 ± 0,1 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 20 | Tiglato de hexenilo | OC | 1321 | | 0,09 ± 0,1 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 21 | 1,5,5-Trimetil-6-metilen-ciclohexeno | S | 1328 | | 0,07 ± 0,1 | ----- | 0,16 ± 0,02 | ----- | ----- | ----- |
| 22 | Bicicloelemeno | S | 1339 | 1482 | 0,84 ± 0,02 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 23 | δ-Elemeno | S | 1341 | 1469 | 0,11 ± 0,03 | ----- | ----- | 0,20 ± 0,03 | ----- | ----- |
| 24 | α-Cubebeno | S | 1354 | 1458 | ----- | 0,16 ± 0,04 | 0,30 ± 0,02 | 0,26 ± 0,07 | 0,91 ± 0,12 | ----- |

| | | | | | | | | | | |
|----|---------------------|----|------|------|--------------|--------------|--------------|-------------|-------------|-------------|
| 25 | Eugenol | OC | 1356 | 2165 | | tr | | | tr | 0,96 ± 0,11 |
| 26 | iso-Italiceno | S | 1382 | 1504 | 0,63 ± 0,006 | ----- | 0,25 ± 0,07 | ----- | ----- | ----- |
| 27 | α-Copaeno | S | 1385 | 1497 | 0,77 ± 0,02 | 1,79 ± 0,1 | 0,45 ± 0,07 | 0,55 ± 0,05 | 0,48 ± 0,03 | ----- |
| 28 | α-Elemeno | S | 1389 | 1949 | 0,12 ± 0,003 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 29 | 7-epi-Sesquitujeno | S | 1392 | 1537 | 0,12 ± 0,003 | 1,07 ± 0,12 | 0,15 ± 0,02 | 5 ± 1,69 | ----- | 0,75 ± 0,07 |
| 30 | β-Elemeno | S | 1397 | 1524 | 2,30 ± 0,19 | 1,45 ± 0,14 | 0,25 ± 0,03 | 0,38 ± 0,16 | 0,27 ± 0,05 | 0,55 ± 0,01 |
| | + β-Cubebeno | S | | | | | | | | |
| | + β-Bourboneno | S | | | | | 0,05 ± 0,008 | | | |
| | α-cis-Bergamoteno | S | 1400 | | ----- | 0,12 ± 0,02 | 2,06 ± 0,09 | ----- | 0,74 ± 0,02 | ----- |
| 31 | Sesquitujeno | S | 1406 | 1558 | 1,17 ± 0,12 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 32 | Italiceno | S | 1418 | 1550 | 0,77 ± 0,18 | 0,37 ± 0,09 | 1,05 ± 0,09 | ----- | 0,15 ± 0,01 | ----- |
| 33 | cis-Tujopseno | S | 1433 | | 1,52 ± 0,13 | ----- | 0,84 ± 0,01 | 1,42 ± 0,20 | ----- | ----- |
| 34 | α-trans-Bergamoteno | S | 1435 | | ----- | 0,21 ± 0,01 | ----- | 0,30 ± 0,14 | ----- | ----- |
| 35 | trans-β-Cariofileno | S | 1435 | 1607 | 4,34 ± 0,63 | 7,87 ± 0,57 | 4,77 ± 0,75 | 4,47 ± 0,74 | 6,48 ± 0,13 | 1,95 ± 0,03 |
| | + α-Cedreno | S | | | | | | | | |
| 36 | Aromadendreno | S | 1436 | | ----- | 1,02 ± 0,17 | 0,29 ± 0,05 | 1,85 ± 0,61 | 0,33 ± 0,03 | ----- |
| 37 | β- Copaeno | S | 1443 | 1601 | 1,25 ± 0,01 | 1,18 ± 0,19 | 0,70 ± 0,1 | 0,89 ± 0,04 | 0,84 ± 0,04 | ----- |
| 38 | Sesquisabineno | S | 1448 | | 0,71 ± 0,04 | ----- | 0,34 ± 0,06 | 0,42 ± 0,07 | ----- | ----- |
| 39 | trans-β-Farneseno | S | 1455 | 1668 | 1,26 ± 0,005 | 2,0 ± 0,02 | 0,55 ± 0,02 | 0,50 ± 0,01 | 0,59 ± 0,03 | 0,26 ± 0,03 |
| 40 | α-Guaieno | S | 1461 | 1651 | 0,19 ± 0,006 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 41 | γ-Patchuleno | S | 1470 | | ----- | 0,52 ± 0,04 | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 42 | α-Humuleno | S | 1471 | 1681 | 4,21 ± 0,12 | 4,22 ± 0,58 | 4,08 ± 0,18 | 4,77 ± 1,02 | 3,11 ± 0,06 | 1,78 ± 0,03 |
| | + cis-α-Bisaboleno | S | | | | | | | | |
| 43 | β-Acoradieno | S | 1473 | 1667 | ----- | 0,32 ± 0,006 | 0,29 ± 0,03 | 0,34 ± 0,09 | ----- | ----- |
| 44 | Allo-aromadendreno | S | 1474 | 1656 | 0,26 ± 0,008 | ----- | 0,28 ± 0,08 | ----- | ----- | ----- |
| 45 | α-Acoradieno | S | 1477 | | 0,30 ± 0,004 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 46 | γ-Curcumeno | S | 1487 | 1697 | 8,01 ± 0,85 | 9 ± 1,55 | 7,27 ± 0,33 | 7 ± 1,83 | ----- | 2,74 ± 0,21 |
| 47 | ar-Curcumeno | S | 1491 | 1780 | 6,78 ± 0,01 | 8 ± 1,80 | 9,77 ± 0,64 | 8,17 ± 3,46 | 9,51 ± 0,23 | 3,25 ± 0,04 |
| 48 | Germacreno D | S | 1496 | 1721 | 4,33 ± 0,04 | 4,99 ± 0,29 | 1,95 ± 0,55 | 4,37 ± 0,43 | 1,30 ± 0,01 | 1,97 ± 0,10 |
| 49 | Viridifloreno | S | 1499 | 1705 | ----- | ----- | 5,45 ± 0,12 | ----- | 0,72 ± 0,01 | ----- |
| 50 | α-Zingibereno | S | 1505 | 1727 | 7,14 ± 0,72 | 10 ± 1,62 | 7,03 ± 0,47 | 8,84 ± 0,85 | 0,36 ± 0,03 | 7,19 ± 0,60 |
| 51 | Biclogermacreno | S | 1513 | 1747 | 7,60 ± 0,44 | 6,66 ± 0,29 | 5,08 ± 0,3 | 8 ± 1,11 | 2,26 ± 0,01 | 2,70 ± 0,78 |
| 52 | β-Curcumeno | S | 1517 | 1614 | 3,33 ± 0,50 | 4,71 ± 1,04 | 4,65 ± 0,01 | 4,68 ± 0,89 | 5,11 ± 0,38 | 4,41 ± 0,23 |
| 53 | α-Alaskeno | S | 1524 | | 0,06 ± 0,004 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |

| | | | | | | | | | | |
|----|-------------------------------------------------------------------------|----------|------|------|------------------|------------------------------------|-----------------|-----------------|------------------|-----------------|
| 54 | γ -Cadineno | S | 1526 | 1896 | ----- | 0,27 \pm 0,1 | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 55 | δ -Cadineno | S | 1529 | 1765 | 0,04 \pm 0,006 | 2,20 \pm 0,38 | ----- | 1,54 \pm 0,39 | 0,72 \pm 0,02 | ----- |
| 56 | β -Sesquifelandreno | S | 1532 | 1647 | 0,99 \pm 0,13 | 0,78 \pm 0,02 | 0,92 \pm 0,04 | 1,35 \pm 0,49 | 0,41 \pm 0,05 | ----- |
| 57 | <i>trans</i> -Cadina-1,4-dieno | S | 1540 | | ----- | 0,14 \pm 0,02 | 0,13 \pm 0,04 | ----- | ----- | ----- |
| 58 | γ -Cupreneno | S | 1542 | | ----- | 0,10 \pm 0,03 | 0,16 \pm 0,03 | ----- | ----- | ----- |
| 59 | cis-Calameneno | S | 1544 | 1843 | 0,11 \pm 0,001 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 60 | Italiceno éter | SO | 1548 | 1854 | 0,28 \pm 0,005 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 61 | <i>trans</i> -Nerolidol | SO | 1572 | 2039 | 15,23 \pm 0,57 | 6,89 \pm 0,71 | 17 \pm 1,06 | 9 \pm 1,87 | 18,17 \pm 0,40 | 5,05 \pm 0,37 |
| 62 | Germacreno B | S | 1576 | 1843 | 0,58 \pm 0,1 | 0,82 \pm 0,06 | 2,78 \pm 0,34 | 2,45 \pm 0,21 | ----- | ----- |
| 63 | Apofarnesol-z-dihidro* | SO | 1583 | | 0,63 \pm 0,008 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 64 | ar-Turmerol* | SO | 1587 | | 0,61 \pm 0,04 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 65 | Espatuleno | SO | 1596 | 2137 | 4,71 \pm 0,27 | 1,34 \pm 0,13 | 2,10 \pm 0,23 | 5,10 \pm 0,18 | 0,68 \pm 0,11 | ----- |
| 66 | Óxido de cariofileno | SO | 1600 | 2000 | 1,31 \pm 0,14 | 0,78 \pm 0,13 | ----- | ----- | 0,45 \pm 0,06 | ----- |
| 67 | Viridiflorol | SO | 1607 | 2112 | ----- | 0,22 \pm 0,02 | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 68 | Zingibereno | SO | 1624 | 2037 | 1,58 \pm 0,001 | 1,38 \pm 0,16 | ----- | ----- | 0,62 \pm 0,04 | ----- |
| 69 | Epóxido de humuleno II + epi-Cedrol | SO SO | 1629 | 2060 | 0,58 \pm 0,02 | 0,26 \pm 0,01 0,19 \pm 0,01 | 0,87 \pm 0,29 | 0,57 \pm 0,19 | ----- | ----- |
| 70 | CubenoI* | SO | 1637 | 1993 | 0,15 \pm 0,01 | 0,23 \pm 0,06 | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 71 | Himachalol* | SO | 1641 | | 0,88 \pm 0,07 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 72 | Iso-Espatuleno | SO | 1648 | | 0,70 \pm 0,06 | 0,48 \pm 0,07 | 0,93 \pm 0,2 | ----- | ----- | ----- |
| 73 | ValerianoI* | SO | 1656 | 2231 | 0,19 \pm 0,01 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 74 | α -Muurolo | SO | 1666 | 2148 | ----- | 0,93 \pm 0,18 | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 75 | 5-neo-Cedranol* | SO | 1671 | | 0,11 \pm 0,004 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 76 | Heptadecano | SO | 1695 | | ----- | 0,41 \pm 0,06 | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 77 | 11- α -H-Himachal-4-en-1- β -ol | SO | 1695 | | 0,40 \pm 0,03 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 78 | Amorfa-4,9-dien-2-ol | SO | 1700 | | 0,17 \pm 0,01 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 79 | Compuesto oxigenado C ₁₅ H ₂₄ O ₂ (NI) | SO | 1706 | | 0,20 \pm 0,001 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 80 | Tetradecanal | H | 1713 | | ----- | 0,28 \pm 0,04 | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 81 | Compuesto oxigenado C ₁₅ H ₂₄ O (NI) | SO | 1718 | | 0,27 \pm 0,02 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 82 | <i>trans-trans</i> -Farnesol | SO | 1724 | | 0,18 \pm 0,007 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 83 | <i>cis</i> -Sesquilavandulil acetato* | SO | 1734 | | 0,10 \pm 0,005 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 84 | isoaromadendreno epóxido | SO | 1741 | | 1,34 \pm 0,13 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 85 | β -Costol | SO | 1760 | | 0,12 \pm 0,02 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |

| | | | | | | | | | | |
|-----|-------------------------------------------------------------------------|----|------|------|--------------|-------------|-------------|-------|-------------|--------------|
| 86 | Drimenol * | SO | 1766 | | 0,31 ± 0,007 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 87 | Compuesto oxigenado C ₁₅ H ₂₄ O ₂ (NI) | SO | 1772 | | 0,18 ± 0,003 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 88 | Compuesto oxigenado C ₁₅ H ₂₄ O ₂ (NI) | SO | 1778 | | 0,16 ± 0,01 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 89 | β-Bisabolenol | SO | 1785 | | 0,31 ± 0,004 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 90 | Compuesto oxigenado C ₁₅ H ₂₆ O ₂ (NI) | SO | 1794 | | 0,84 ± 0,16 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 91 | Compuesto oxigenado C ₁₅ H ₂₆ O ₂ (NI) | SO | 1803 | | 0,25 ± 0,001 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 92 | Compuesto oxigenado C ₁₆ H ₂₈ O ₂ (NI) | OC | 1821 | | 0,77 ± 0,27 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 93 | Hidrocarburo lineal (NI) | H | 1843 | | 0,06 ± 0,01 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 94 | Longifolenaldehído* | OC | 1865 | | 0,22 ± 0,02 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 95 | Nonadecano | H | 1897 | 1900 | ----- | 1,26 ± 0,02 | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 96 | <i>trans-trans</i> -Geranil -linalol | OC | 2029 | 2026 | 0,45 ± 0,09 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 97 | Heneicosano | H | 2096 | 2100 | ----- | 0,76 ± 0,17 | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 98 | Fitol | OC | 2112 | 2597 | 2,24 ± 0,32 | 0,79 ± 0,09 | 1,22 ± 0,13 | tr | 2,39 ± 0,06 | 0,33 ± 0,01 |
| 99 | Tricosano | H | 2300 | 2300 | ----- | 0,23 ± 0,05 | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 100 | Tetracosano | H | 2396 | 2400 | ----- | 0,14 ± 0,01 | ----- | ----- | ----- | 12,96 ± 0,70 |
| 101 | Pentacosano | H | 2496 | 2474 | ----- | 1,66 ± 0,28 | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 102 | Hexacosano | H | 2547 | 2600 | ----- | 0,40 ± 0,1 | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 103 | Heptacosano | H | 2611 | 2700 | ----- | 2,87 ± 0,74 | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 104 | Octacosano | H | 2725 | 2800 | ----- | 0,38 ± 0,1 | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 105 | Escualeno | OC | 2741 | | 0,16 ± 0,02 | ----- | ----- | ----- | ----- | ----- |
| 106 | Nonacosano | H | 2867 | 2900 | ----- | 1,09 ± 0,13 | ----- | ----- | ----- | 20,96 ± 2,5 |

| | |
|--------------------------------|----|
| Hidrocarburos monoterpénicos | M |
| Monoterpenos oxigenados | MO |
| Hidrocarburos sesquiterpénicos | S |
| Sesquiterpenos oxigenados | SO |
| Otros compuestos oxigenados | OC |
| Hidrocarburos lineales | H |

^a Número de pico en las Figuras 14 y 15

^b Índices de Retención determinados experimentalmente en las columnas DB-5 y DB-WAX.

^c Promedio de tres extracciones independientes, % ± $\sigma \cdot t / \sqrt{n}$; n=3; t=4,30; σ =desviación estándar

N.I. No identificado.

tr Detectado en trazas.

*Identificado tentativamente.

3.4.1 Efecto de la técnica de extracción sobre el número y el tipo de metabolitos secundarios volátiles aislados de *Lantana camara* var. *Acculeata*

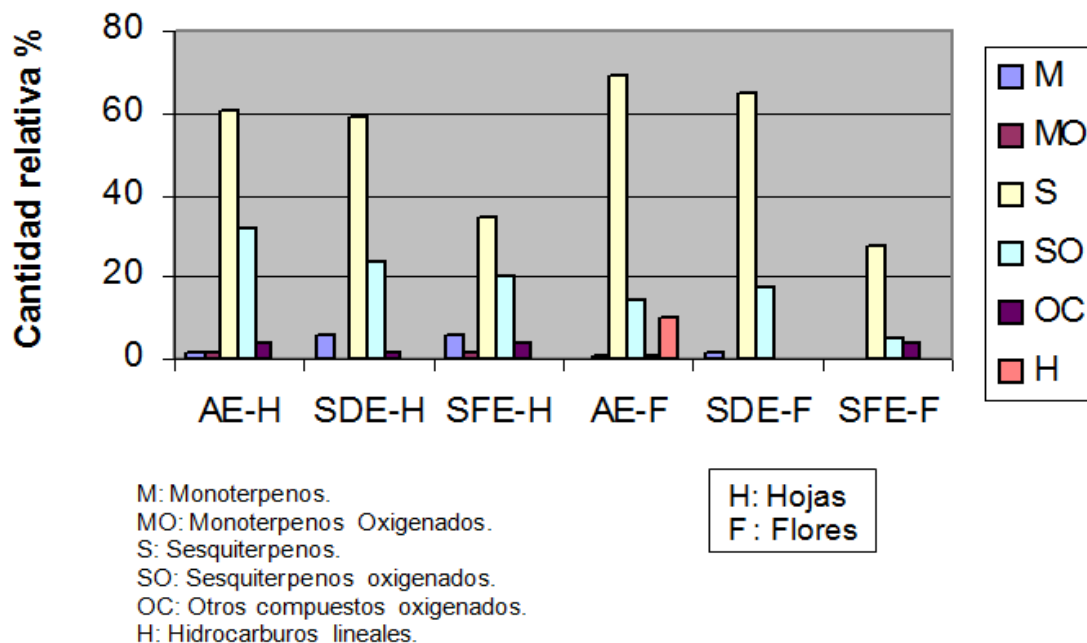
La composición química de los AE y extractos aislados de hojas y flores de *Lantana camara* var. *acculeata*, aunque presentó diferencias de tipos cualitativo y cuantitativo, tuvo como característica común que en cada uno de los 6 casos el contenido de sesquiterpenos fue muy alto en comparación con las otras familias de compuestos presentes.

Las tres técnicas de extracción utilizadas, *i.e.*, MWHD, SDE y SFE, se basan en mecanismos de acción que difieren en los principios fisicoquímicos que las originan. Teniendo en cuenta esto, se observa que hay una reducción en la cantidad de compuestos extraídos de técnica a técnica. MWHD fue la técnica que permitió extraer mayor número de compuestos, seguida de SDE y, finalmente SFE. Se deduce de esto, que el paso de la evaporación en el caso de SDE y la despresurización en el caso de SFE son determinantes y críticas puesto que la fracción más volátil de los compuestos obtenidos sufrió una reducción considerable.

Una precaución adicional que debe observarse, es que, aparte de trabajar en su mayor medida con material seco, las muestras no deben conservarse por un tiempo prolongado ya que la fracción extraída es muy sensible a la luz y los cambios de temperatura. Esto puede generar cambio en la composición química de los AE y extractos.

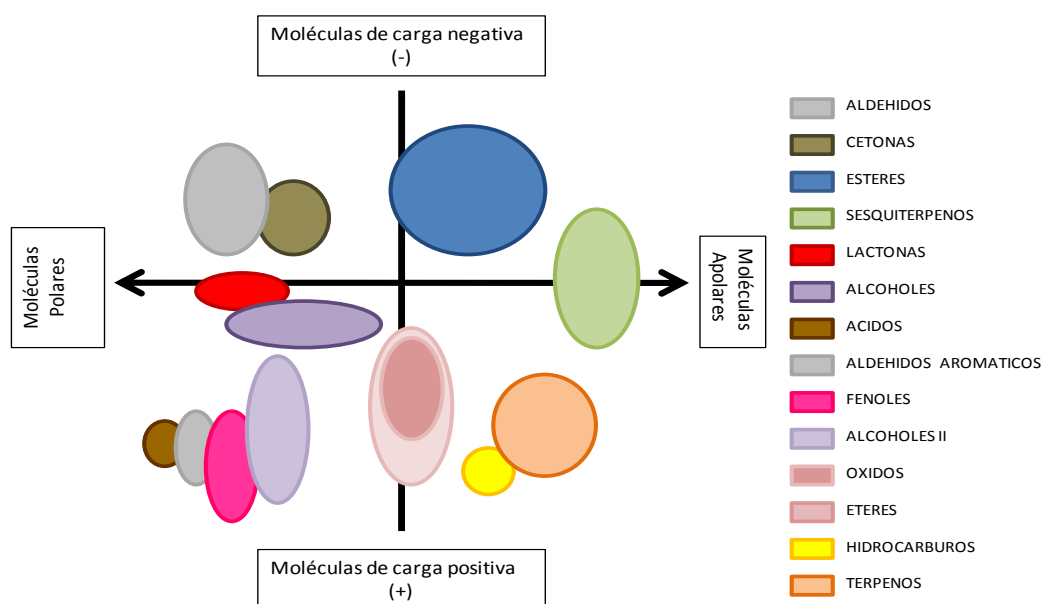
La **Figura 10** muestra la distribución por grupos de familias de los compuestos y extractos de *Lantana camara* var *acculeata* obtenidos por diferentes métodos de extracción.

Figura 10. Variación de las cantidades relativas (%), por familias de compuestos encontrados en hojas (H) y flores (F) de *Lantana camara* var. *acculeata*, con respecto a la técnica de extracción.



Las condiciones de trabajo para SDE y SFE fueron las que se estandarizaron por Stashenko y colaboradores [56], para diferentes especies vegetales. Sin embargo, las condiciones de trabajo para el MWHD que se describen en la **Sección 2.2.1**, de la Parte Experimental fueron establecidas para esta investigación. Esto condujo a los resultados ya conocidos, pero es necesario adicionar, que al autor le inquieta la escasa aparición de la familia OC en los perfiles y la presencia de la familia H sólo en el AE de flores, pues en otros estudios del CENIVAM [49], no solo no se presenta esta tendencia sino que se concluye que cada técnica descubre una especial afinidad por determinadas familias de compuestos, tal como lo expresan Medivelso y Olivares [34] en su trabajo sobre geranio.

Figura 11. Localización eléctrica de los grupos químicos presentes en el AE.



El mapa de colores de la **Figura 11**, muestra la distribución de algunos de los principales grupos funcionales que se espera encontrar en los compuestos presentes en los AE, por sus propiedades eléctricas. Esta disposición obtenida del libro sobre Plantas aromáticas y su uso en aromaterapia de Márquez [32], deja ver que compuestos como los terpenos son de marcada tendencia apolar, en especial los sesquiterpenos y sus análogos oxigenados. Comparando este resultado con el gráfico de la **Figura 10**, se puede observar la extracción en las tres técnicas utilizadas, es eficiente para separar una fracción apolar, pero no se aislaron los compuestos oxigenados polares.

La razón de utilizar 3 técnicas de extracción diferentes, fue para ampliar el rango de compuestos obtenidos para completar un perfil. Sin embargo, en este caso los resultados arrojaron una tendencia general en la manera como se presentan las familias de compuestos.

3.4.2. Efecto de la parte de la planta empleada sobre el número y el tipo de metabolitos secundarios volátiles aislados de *Lantana camara* var. *acculeata*

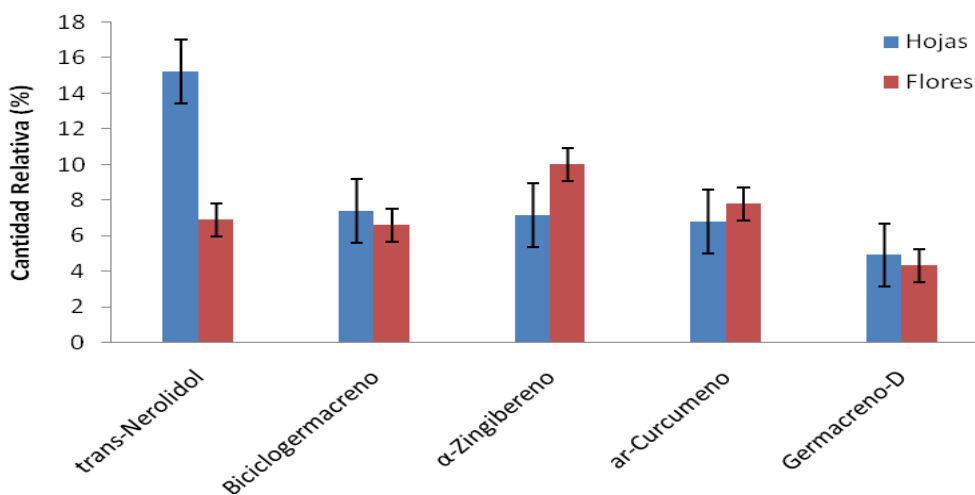
Según la fisiología vegetal de Avalos [4], no todos los metabolitos secundarios se encuentran en los diferentes grupos de plantas. Estos metabolitos podrían identificarse como “diagnóstico” para reconocer un tipo determinado de material vegetal, puesto que los metabolitos se sintetizan en pequeñas cantidades y no de forma generalizada, su producción está restringida a un determinado género, familia o incluso a algunas especies.

De otra parte, según Güenther [21], cada parte de la planta tiene un flujo determinado de aceite esencial según las necesidades de su ontogenia. Por ejemplo, en época de floración se encontrará mayor flujo de aceite esencial yendo hacia la flor. Esto nos dice que un estudio sobre la producción de aceite de la planta debe hacerse en las distintas etapas de su desarrollo controlando rigurosamente las condiciones ambientales.

En la **Figura 12**, se observan las variaciones en la cantidad de metabolitos mayoritarios identificados (véase la **Tabla 6**), en flores y hojas de *Lantana camara* var. *acculeata*.

El Instituto Alexander Von Humboldt [25], dice que la calidad de un aceite esencial depende de variables como: condiciones edáficas del cultivo, régimen climático, latitud, labores agrícolas, métodos de extracción y procesos industriales. La importancia de realizar estudios de estas variables, está por su puesto en poder medir su efecto y controlarlos de tal forma que se obtenga un resultado óptimo.

Figura 12. Variación de las cantidades relativas (%), de los metabolitos secundarios mayoritarios encontrados en *Lantana camara* var. *acculeata* con respecto a la parte de la planta empleada



En el gráfico de la Figura 12, se observan pequeñas diferencias en la cantidad de metabolitos secundarios, excepto para los dos mayoritarios presentes en las flores y hojas, respectivamente, el *trans*- nerolidol y el α -zingibereno.

3.4.3. Evaluación de la reproducibilidad del método de extracción del AE con base en las áreas cromatográficas.

La cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas es una técnica sensible a cualquier cambio o interferencia que pueda tener una muestra. Por ello, cuando se extraen analitos y se hace su posterior análisis, se debe minimizar cualquier variación o cambio que puedan intervenir en el proceso.

Se evaluó la reproducibilidad del método de obtención de AE, usando hidrodestilación asistida por la radiación de microondas. Se pesó la misma cantidad de material vegetal: 300 g (hojas y flores, respectivamente). Se utilizaron para cada extracción los mismos montajes tipo *Clevenger* y hornos microondas.

La recolección del material vegetal se realizó a las 3:00 p. m., en un día sin lluvias y la muestra se manipuló tal como se describió en la **Sección 2.2.1**.

En las **Tablas 7 y 8**, se observa el CV de las áreas cromatográficas de los compuestos mayoritarios obtenidos tanto de las hojas, como de las flores de *Lantana camara var. acculeata*. Según las Buenas Prácticas de Laboratorio (GLP), los coeficientes de variación para las áreas cromatográficas no deben superar el 10% .

Tabla 7. Estudio de la reproducibilidad de áreas cromatográficas de algunos compuestos del AE, obtenidos de hojas de *Lantana camara var. acculeata*.

| COMPUESTO | ÁREAS | | ÁREAS PROMEDIO | | σ | | CV % | |
|-------------------------------------|-----------|--------------|----------------|--------------|------------|--------------|---------|--------------|
| | CUENTAS | RELATIVA (%) | CUENTAS | RELATIVA (%) | CUENTAS | RELATIVA (%) | CUENTAS | RELATIVA (%) |
| <i>trans</i> -Nerolidol | 908446404 | 15,95 | 869915409 | 15,2 | 38510867,3 | 0,74 | 4,43 | 4,83 |
| | 869875123 | 15,26 | | | | | | |
| | 831424701 | 14,48 | | | | | | |
| γ -Curcumeno | 486185895 | 8,46 | 455138711 | 8,0 | 32367555,2 | 0,55 | 7,11 | 6,84 |
| | 457634912 | 8,17 | | | | | | |
| | 421595327 | 7,40 | | | | | | |
| Biciclogermacreno | 430055707 | 7,55 | 415304822 | 7,4 | 16640162,4 | 0,39 | 4,01 | 5,28 |
| | 418592567 | 7,63 | | | | | | |
| | 397266193 | 6,92 | | | | | | |
| α -Zingibereno | 430186736 | 7,49 | 407685904 | 7,1 | 28519622,1 | 0,48 | 7,00 | 6,75 |
| | 417259831 | 7,34 | | | | | | |
| | 375611145 | 6,59 | | | | | | |
| Germacreno-D | 250416675 | 4,36 | 246031036 | 4,3 | 5634947,53 | 0,04 | 2,29 | 1,01 |
| | 248000820 | 4,35 | | | | | | |
| | 239675614 | 4,28 | | | | | | |
| <i>trans</i> - β -Cariofileno | 210633665 | 3,70 | 202614569 | 3,6 | 8489375,84 | 0,17 | 4,19 | 4,88 |
| | 203487652 | 3,63 | | | | | | |
| | 193722391 | 3,37 | | | | | | |

Los errores aleatorios están presentes en cada experimento realizado, puesto que todos los factores externos que lo afectan no pueden ser controlados. Este estudio

se realizó en días diferentes, tratando de mantener constantes los factores que afectan al sistema, como el equipo utilizado, el operador, la cantidad y la hora de recolección de la muestra, para tratar de minimizar dichos errores. Se obtuvieron unos valores de coeficientes de variación que no sobrepasaron el 10%. Por lo tanto, el proceso puede considerarse reproducible según las GPL.

3.5 ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES DE LAS TÉCNICAS DE EXTRACCIÓN DEL AE Y EXTRACTOS DE HOJAS Y FLORES DE *Lantana camara var. acculeata*.

Tabla 8. Estudio de la reproducibilidad de áreas de algunos compuestos del AE aislado de flores de *Lantana camara var. acculeata*.

| COMPUESTO | ÁREAS | | ÁREAS PROMEDIO | | σ | | CV % | |
|-------------------------------------|-----------|--------------|----------------|--------------|------------|--------------|---------|--------------|
| | CUENTAS | RELATIVA (%) | CUENTAS | RELATIVA (%) | CUENTAS | RELATIVA (%) | CUENTAS | RELATIVA (%) |
| <i>trans</i> -Nerolidol | 234547126 | 6,48 | 233435652 | 6,9 | 1250651,15 | 0,48 | 0,54 | 7,01 |
| | 233678412 | 6,76 | | | | | | |
| | 232081418 | 7,42 | | | | | | |
| γ -Curcumeno | 293103736 | 8,75 | 292037508 | 8,2 | 6222810,43 | 0,62 | 2,13 | 7,59 |
| | 297658314 | 8,36 | | | | | | |
| | 285350473 | 7,53 | | | | | | |
| Biclogermacreno | 231593343 | 6,39 | 223595951 | 6,6 | 10624787,9 | 0,19 | 4,75 | 2,89 |
| | 227654389 | 6,58 | | | | | | |
| | 211540121 | 6,77 | | | | | | |
| α -Zingibereno | 323864049 | 8,94 | 335447782 | 10 | 12273311,1 | 1,10 | 3,66 | 10,98 |
| | 334168792 | 9,98 | | | | | | |
| | 348310505 | 11,14 | | | | | | |
| Germacreno-D | 171622995 | 4,74 | 165318707 | 4,9 | 5886790,55 | 0,19 | 3,56 | 3,96 |
| | 164367987 | 4,86 | | | | | | |
| | 159965139 | 5,12 | | | | | | |
| <i>trans</i> - β -Cariofileno | 268034351 | 7,40 | 260872975 | 7,8 | 6677961,87 | 0,38 | 2,56 | 4,90 |
| | 259768412 | 7,91 | | | | | | |
| | 254816162 | 8,15 | | | | | | |

El análisis estadístico de componentes principales (PCA) se realizó con el programa *STATISTICA Versión 8.0* (Stat Soft Inc., Tulsa, Oklahoma, EE.UU.), para observar el efecto de la técnica de extracción y de la parte de la planta utilizada sobre la composición química de los AE y extractos de *Lantana camara* var. *Acculeata*. La nomenclatura empleada para manejar la información en la matriz de datos del PCA fue: (i) los casos correspondientes a las técnicas

utilizadas se abreviaron como MWHD, SDE y SFE, y la inicial de la parte de la planta utilizada, a saber: F para flores y H para hojas; y (ii) las variables fueron las familias de compuestos asignadas como MT (Monoterpenos), MO (Monoterpenos oxigenados), ST (Sesquiterpenos), SO (Sesquiterpenos oxigenados), OC (otros compuestos oxigenados) y H (Hidrocarburos) .

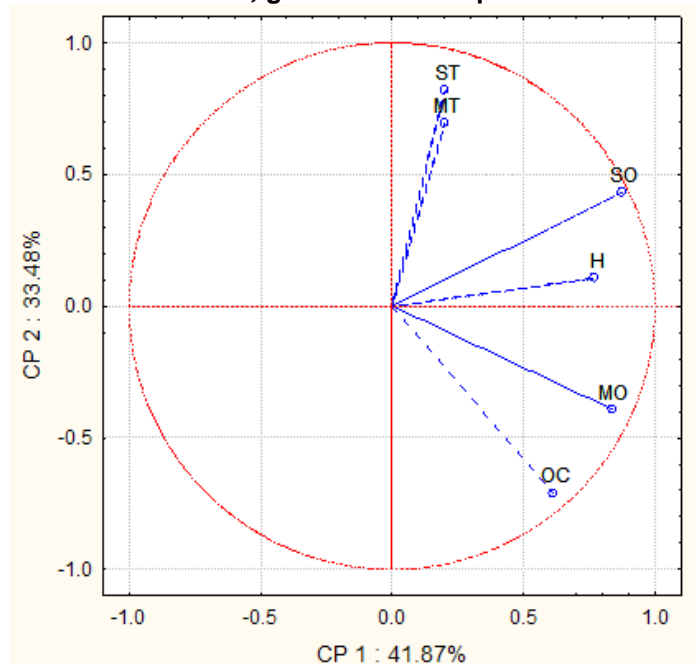
Los componentes principales (CP) representan combinaciones lineales de las concentraciones relativas de los compuestos aislados, agrupados en familias de compuestos presentes en el AE y extractos. En la **Tabla 9** se indica que los dos primeros CP representan el 75% de la información o varianza. La contribución de cada familia de compuestos a los CP 1 y 2 aparece en el **Anexo 3**.

Tabla 9. Valores de varianza obtenida para los factores extraídos del PCA.

| CP | Valor propio | Varianza total (%) | Valor propio acumulado | Varianza acumulada (%) |
|----|--------------|--------------------|------------------------|------------------------|
| 1 | 2.51 | 41.87 | 2.51 | 41.87 |
| 2 | 2.01 | 33.48 | 4.52 | 75.35 |
| 3 | 0.97 | 16.21 | 5.49 | 91.56 |
| 4 | 0.49 | 8.11 | 5.98 | 99.67 |
| 5 | 0.02 | 0.33 | 6.00 | 100.00 |

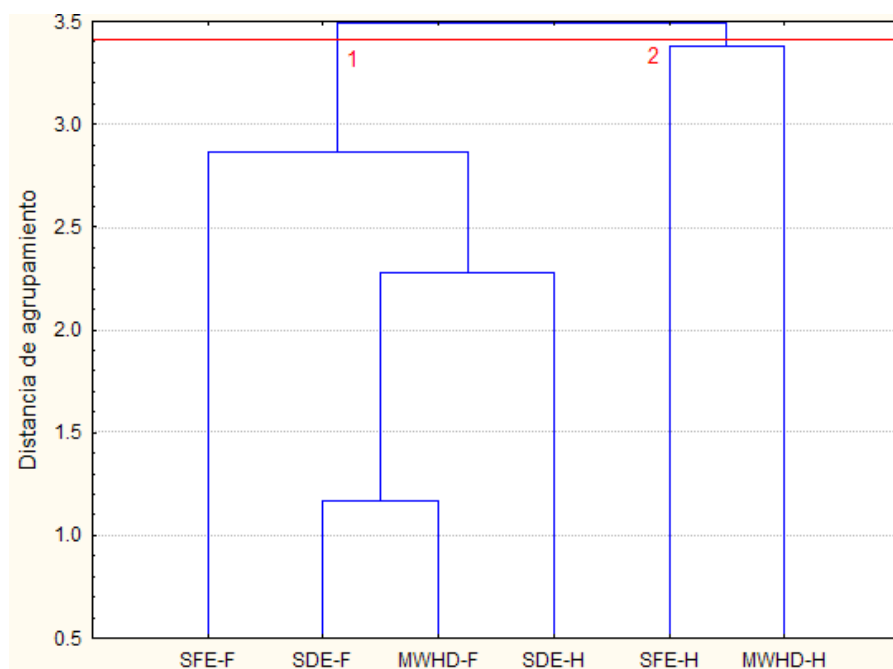
En la **Figura 13** se indica la contribución de cada una de las variables a los CP. Las variables MO, SO y H contribuyen de forma significativa al CP 1, que representa el 41.9 % de la información. Las variables OC, MT y ST aportan significativamente al CP 2, el cual constituye el 33.5 % de la varianza.

Figura 13. Familias de compuestos presentes en el AE y extractos de hojas y flores de *Lantana camara* var. *acculeata*, graficados en el plano conformado por los CP.



La **Figura 14** permite observar dos grupos generales de técnicas de extracción en el espacio de coordenadas conformado por los CP 1 y 2. En el grupo 1, conformado por las técnicas SDE-H, SDE-F, MWHD-F y SFE-F, se logran diferenciar los subgrupos A (SDE-H, SDE-F y MWHD-F) con contenido alto de MT, ST y SO, y bajo de OC, mientras que B (SFE-F) presenta una distribución inversa. El grupo 2 conformado por las técnicas MWHD-H y SFE-H se caracteriza por el contenido mayor de OC y MO. Sin embargo, la detección de H con la técnica MWHD-H y la proporción relativamente baja de ST y SO realizada con la SFE-H, conducen al distanciamiento entre MWHD-H y SFE-H, y al acercamiento entre SFE-H y SFE-F.

Figura.15. Dendograma de conglomerados (*Clusters*) de las técnicas de obtención de los AE y extractos de hojas y flores de *Lantana cámara var acculeata*.



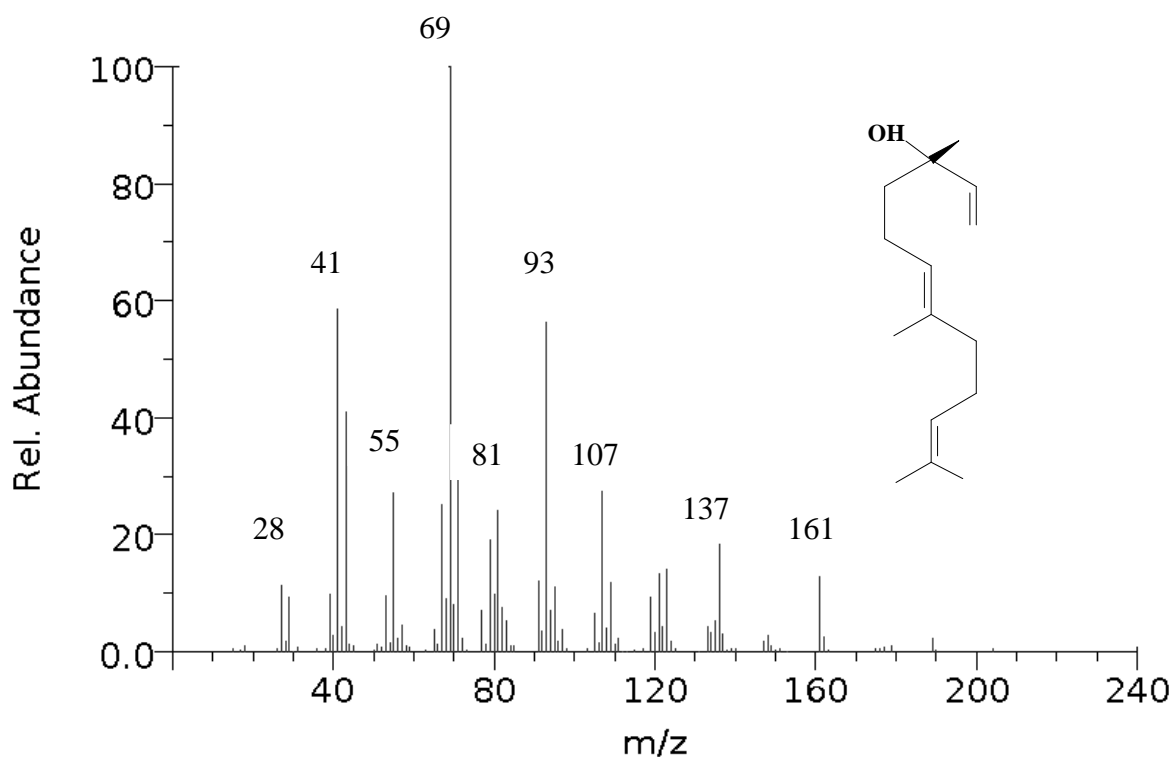
3.6 ANÁLISIS POR GC-MS DE LOS AE Y EXTRACTOS DE *Lantana camara var. acculeata*.

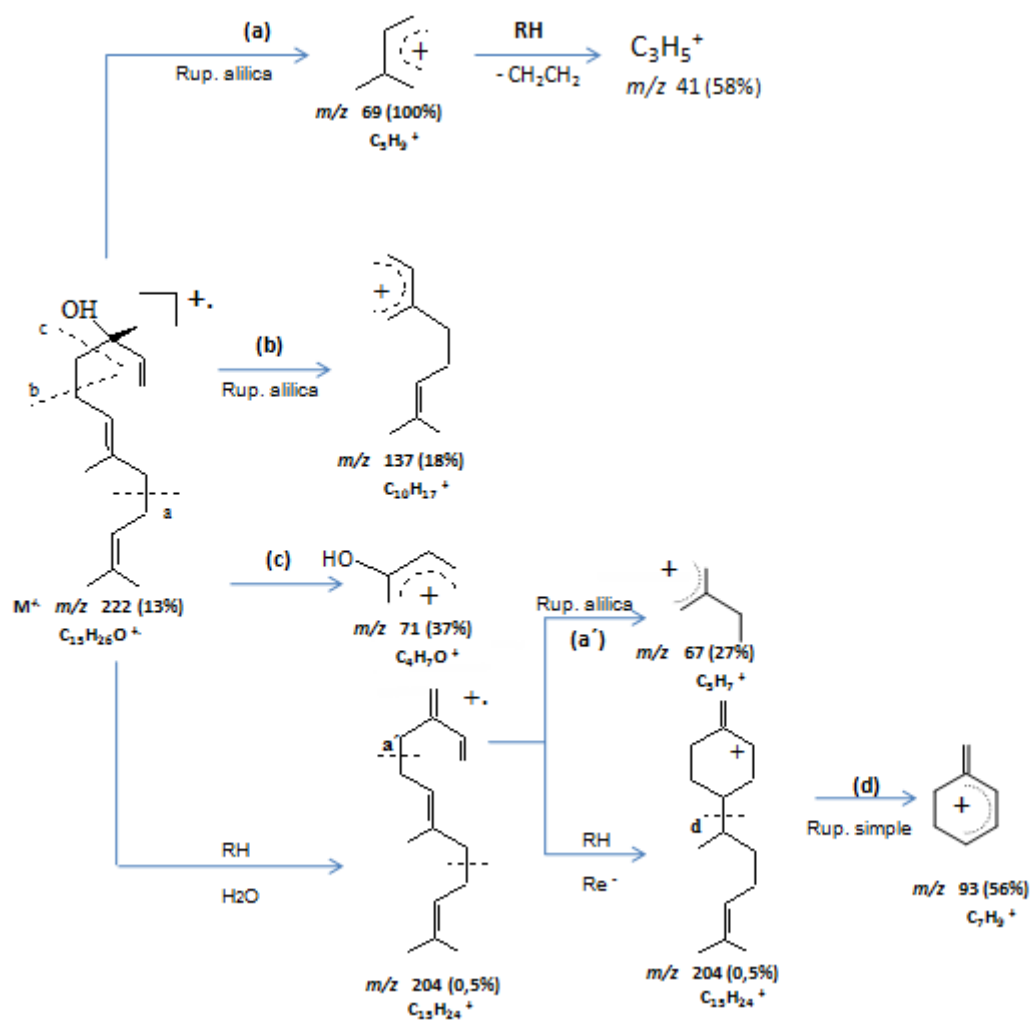
Los compuestos presentados en la **Tabla 6** se identificaron con base en los índices de retención, calculados en columnas polar y apolar; para ello, se utilizaron patrones de hidrocarburos lineales (C₁₀-C₂₅), también se usaron espectros de masas (70 eV), que se compararon con las bases de datos de ADAMS, NIST, y WILEY. Se analizaron los patrones de fragmentación de los compuestos mayoritarios del AE, que se presentan a continuación.

➤ ***trans*-Nerolidol**. El espectro de masas del *trans*-nerolidol, componente mayoritario identificado en el AE y extractos, de hojas de *Lantana cámara var. acculeata* se presenta en la **Figura 16**. Las rutas de ionización disociativa de este alcohol sesquiterpénico según su espectro de masas (EI 70eV) se muestran en el

Esquema 1. La ruptura alílica a partir del ion molecular en m/z 222, conduce a la formación del fragmento, pico de base en m/z 69 (100%), el cual tras la pérdida de una molécula de eteno, da origen al catión alilo en m/z 41 (58%). Los fragmentos en m/z 137 (18%) y m/z 71 (37%) se generan por rupturas alílicas en otra sección de la molécula (b) y (c). La pérdida de agua a partir del ion molecular, origina el ion en m/z 204 (0.5%), el cual produce los fragmentos en m/z 67 (27%) y m/z 93 (56%), por rupturas alílicas y simple, respectivamente (a') y (d).

Figura 16. Espectro de masas del *trans*-nerolidol.





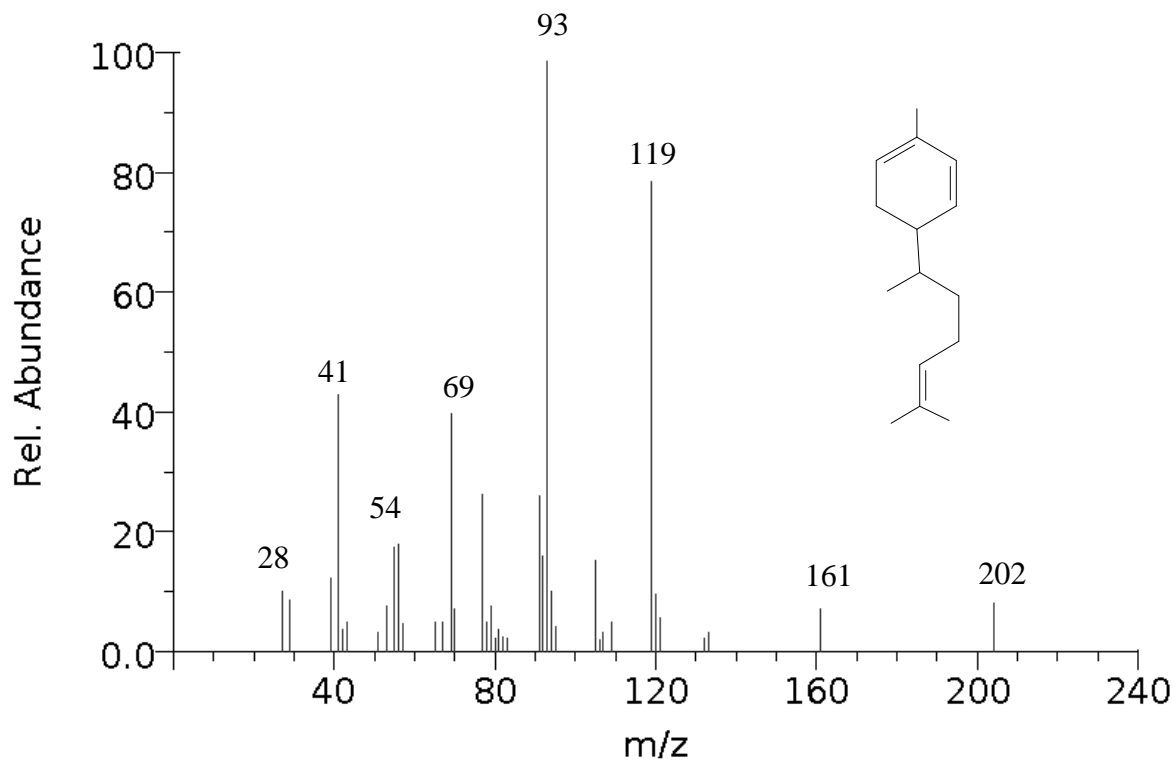
Esquema 1. Rutas de fragmentación del trans-nerolidol

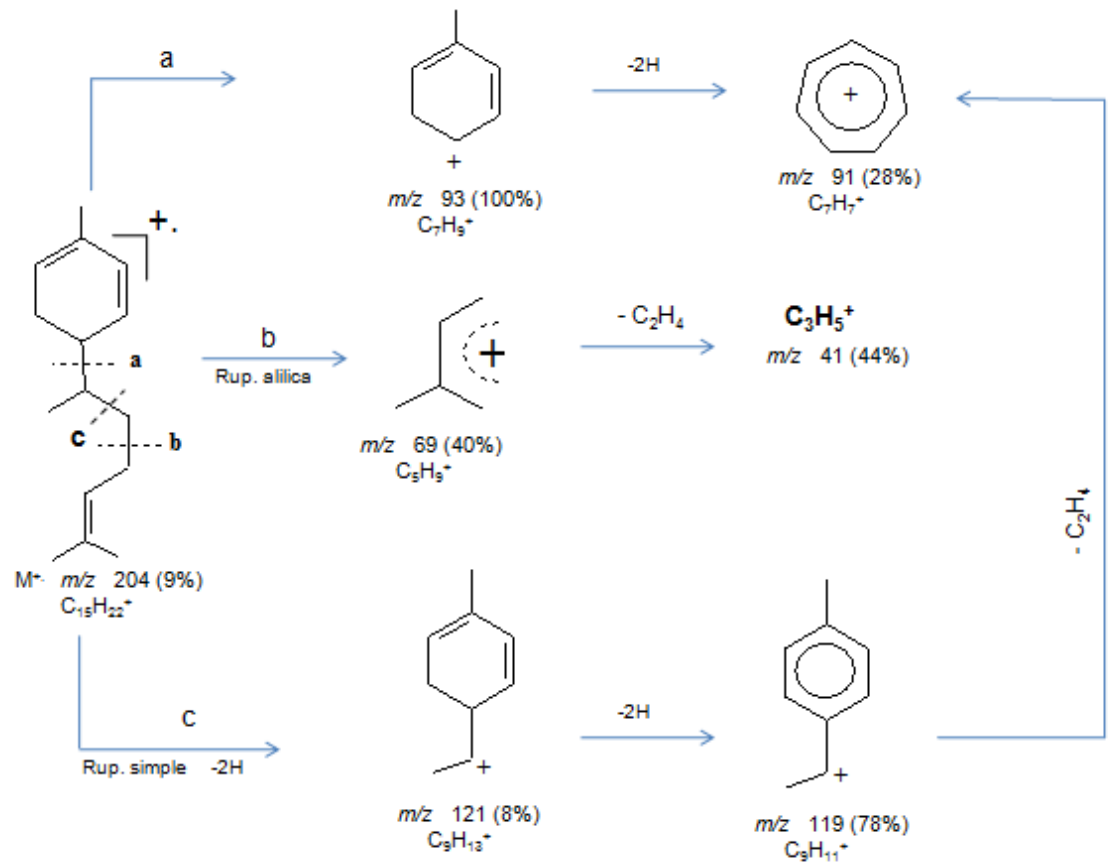
α -Zingibereno. El espectro de masas del α -zingibereno, componente mayoritario identificado en el AE, de flores de *Lantana cámara var. acculeata*, se presenta en la **Figura 17**. Las rutas de ionización disociativa de este sesquiterpeno según su espectro de masas (EI 70eV), se muestran en el **Esquema 2**. La ruptura alílica a partir del ion molecular en m/z 204, conduce a la formación del fragmento en m/z 69 (40%), el cual tras la pérdida de una molécula de eteno, da origen al catión alilo en m/z 41 (44%). Una ruptura simple se genera en c y se produce la salida sucesiva de 2 hidrógenos; se forma, entonces, el fragmento en m/z 119 (78%). El ion pico

de base, en m/z 93 (100%) se forma en a través de la ruptura a partir del ion molecular en m/z 204.

Los espectros de masas de estos compuestos se caracterizan, en muchos casos, por la presencia de una señal intensa en m/z 161. La naturaleza cíclica de los sesquiterpenos imparte cierta estabilidad a sus iones moleculares, y casi para todos los miembros de esta familia se puede observar el ion molecular en el espectro.

Figura 17. Espectro de masas del α -zingibereno. (EI 70 eV).





Esquema 2. Rutas de fragmentación del α -zingibereno

4. CONCLUSIONES

1. En el primer estudio en Colombia de *Lantana camara var. acculeata*, se investigó el efecto de la técnica extractiva y la parte de la planta utilizada sobre el tipo y cantidad de compuestos aislados, obteniéndose 5 familias de componentes: sesquiterpenos, sesquiterpenos oxigenados, monoterpenos, monoterpenos oxigenados, otros compuestos oxigenados e hidrocarburos, y observándose diferencias cualitativas y cuantitativas al analizar las variables mencionadas.
2. Se aislaron 106 compuestos en total, procedentes de los AE y extractos obtenidos de *Lantana camara var. acculeata*, el 90% de los componentes para el AE de hojas y el 81% para el AE de flores fueron positivamente identificados. Los compuestos mayoritarios fueron *trans*-nerolidol y α -zingibereno, respectivamente. El AE tanto hojas como de flores corresponde al tipo sesquiterpenoide, ya que más del 50% de los compuestos identificados pertenecen a esta familia. La tendencia en la cuantificación de los AE se conservó en los extractos a pesar de la gran diferencia en su magnitud, sobre todo con los extractos de SFE.
3. El rendimiento bajo del AE de *Lantana camara var. acculeata*, es el resultado de la combinación de diferentes factores. Por una parte están los cambios ambientales, que no pueden dejarse de lado pues las extracciones se hicieron en días diferentes. La variedad de *Lantana* utilizada, la cual es una especie adaptada para jardines por lo que su sistema de defensa contra predadores tiende a producir menos agentes de protección. Por último, está el tratamiento postcosecha, pues se trabajó con material fresco y cuando se realiza secado previo del material vegetal, las extracciones se hacen más eficientes y aumenta el rendimiento.

5. RECOMENDACIONES

Los objetivos propuestos para este trabajo cubrieron un aspecto fundamental que fue averiguar si la especie *Lantana camara var. acculeata* cultivada en Colombia, era funcional y comercializable. Por medio de extracciones de MWHD, se verificó que el rendimiento de su aceite esencial es demasiado bajo, sin embargo, como lo muestra su composición química, la planta presenta potencialidad en el campo farmacológico principalmente por sus componentes mayoritarios; entonces, sería recomendable que se hicieran estudios enfocados hacia la comprobación de sus propiedades bioquímicas como: capacidad antimicrobial, antiparasitaria, antimicótica, para tener una más completa información sobre la especie y decidir acerca del tratamiento que debe usarse para hacer que la producción de aceite esencial en la planta mejore.

6. BIBLIOGRAFÍA

1. ADAMS, R.P., Identification of essential oil componentes by gas chromatography quadropole mass spectroscopy, Allured Publishing, Carol Stream, IL, **2007**, 804p.
2. Análisis de la tendencia del mercado internacional de aceites esenciales; Informe mensual de la Fundación Exportar. [citada en **2007**]: disponible en internet, <http://www.exportar.org.ar/modules/Publicaciones/aceitesesencial>.
3. ARRUDA, D.C.; D´ALEXANDRI, F.L.; KATZIN, A.M.; and ULIANA, S.; Antileishmanial activity of the terpene nerolidol. *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, **2005**, 49 (5), pp.1679-1687.
4. AVALOS, A., & PÉREZ-URRIA, E., Fisiología Vegetal. Madrid: Reduca, **2009**, p.119-145.
5. BANDONI, A. Los recursos vegetales aromáticos en Latinoamérica, su aprovechamiento industrial para la producción de aromas y sabores. Argentina: Red de editores universitarias, **2000**, p.p. 29-43, 149-171, 197-232.
6. BEGUM, S.; RAZA S.; SIDDIQUI, B.; and SIDDIQUI S.; Triterpenoids from the aerial parts of *Lantana camara*. *Journal of Natural Products*, **1995**, 58, (10), pp. 1570-1574.
7. BEGUM, S.; WAHAB, A.; SIDDIQUI B.; and QAMAR F. Nematicidal constituents of the aerial parts of *Lantana camara*. *Journal of Natural Products*, **2000**, 63, pp. 765-767.

8. BYRON, F.; STECHER, B.; and JOHNSON, E.A. Sensitization of *Staphylococcus aureus* and *Escherichia coli* to antibiotics by the sesquiterpenoids nerolidol, farnesol, bisabolol, and apritone. *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, **2003**, 47 (10), pp. 3357-3360.
9. CHOWDHURY, J.U.; NANDI, N.C.; BHUIYAN, M.N.I. Chemical composition of leaf essential oil of *Lantana camara* L. from Bangladesh. *Bangladesh Journal of Botany*, **2007**, 36, (2), pp.193-194.
10. DAVID, O.; SIMELANE & MATLALA, S.; PHENYE; Suppression of growth and reproductive capacity of the weed *Lantana camara* (Verbenaceae) by *Ophiomyia camarae* (Diptera: Agromyzidae) and *Teleonemia scrupulosa* (Heteroptera: Tingidae). *Biocontrol Science and Technology*, **2005**, 15 (2), pp.153-163.
11. DA SILVA, M.; ANDRADE, E.; ZOGHBI, M.; The essential oils of *Lantana camara* occurring on north Brazil. *Flavour and Fragrance Journal*, **1999**, 14, p.p. 208-210.
12. DIATLOFF, G.; Control biologico de la malahierba *Lantana camara* por *Octotoma Championi* y *uroplata* sp (cerc. bilineata). *Agronomía Costaricense*, **1977**, 1 (2), pp. 165-167.
13. DURAN, D.C.; Estudio del aceite esencial de *Lippia alba* (Verbenaceae) y de los aspectos fisiológicos en diferentes etapas de su crecimiento bajo tres niveles de luz. Trabajo de grado (Química). Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ciencias. Escuela de Química. Bucaramanga; 2005; 122 p.

14. ECKERT, C.; VAN ALSTEN, J.; STOICOS, T.; Supercritical fluid processing. *American Chemical Society*, **1986**, 20, pp. 319-324.
15. ETTRE, L.; HINSHAW, J.; Basic relationships of gas chromatography. Cleveland Ohio: Advanstar, **1993**, p.p. 1-5, 9-17.
16. FATHY, M.; Comparative study of essential oils of the leaves and flowers of certain *Lantana* species growing in Egypt. *Bulletin Faculty of Farmacology*, **2000**, 38 (2), pp. 105-117.
17. FRIEDRICH, J.P.; PRYDE, E.H.; Supercritical CO₂ extraction of lipid-bearing materials and characterization of the products. *Journal American of Chemical Society*, **1984**, 61 (2), pp.223.
18. GARCIA, H. Flora medicinal de Colombia: Botánica médica. 2 Ed. Bogotá: Tercer Mundo, **1992**. 554 p.
19. GHISALBERTI, E.L., *Lantana camara* L., *Fitoterapia*, **2000**, 71 , pp.467-486.
20. GODEFROOT, M., SANDRA, P., and VERZELE, M.; New method for quantitative essential oil analysis. *Journal of Chromatography*, **1981**, 203, p.325-335.
21. GÜENTHER, E. The Essential Oils. 2 Ed. New York: Van Nostrand Company, **1952**. 777p.
22. GUPTA, M.P.; 270 plantas medicinales iberoamericanas. Bogotá: CITED-SECAB. **1995**.p. 555.

23. HAWTORNE, S.B.; Analysis of flavor and fragrance compounds using supercritical fluid extraction coupled with gas chromatography. *Analytical Chemistry*, **1988**, 60, pp. 472-477.
24. HERNÁNDEZ T.; CANALES M.; ÁVILA J.G.; Composition and antibacterial activity of essential oil of *Lantana achyranthifolia* Desf. (Verbenaceae); *Journal of Ethnopharmacology*, **2005**, 96, pp. 551-554.
25. INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN DE RECURSOS BIOLÓGICOS "ALEXANDER VON HUMBOLDT. Informe final, estudios del mercado nacional de aceites esenciales. Bogotá: **2002**. p.p. 23, 43-54.
26. JARAMILLO, B.E.; Estudio de la actividad antioxidante in vitro de aceites esenciales de plantas tropicales y compuestos nitrogenados sintéticos. Tesis Doctoral. Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ciencias. Escuela de Química. Bucaramanga; **2004**; 289 p.
27. JIROVETZ and BUSHBAVER G., Processing analysis and application of essential oils, Ed. Har Krishan Bhala & Sons, Dehradun, **2005**, pp.21-28.
28. KHAN, M.; SRIVASTAVA, S.K.; SYAMASUNDAR K.V.; and SINGH, M.; NAQUI, A.A.; Chemical composition of leaf and flower essential oil of *Lantana camara* from India. *Flavour and Fragrance Journal*, **2002**, 17, p.p. 75-77.
29. LEE, S.J.; HAN, J.I.; and LEE, G.S.; Antifungal effect eugenol and nerolidol against *Microsporum gypseum* in a Guinea pig model. *Biological Pharmacology Bulletin*, **2007**, 30 (1), pp. 184-188.

30. LIVINGSTONE, D.; Data analysis for chemists. New-York: Oxford University Press, **1995**, p.p. 67-74.
31. MARÍN, N.A & ORDOÑEZ, S.A. Determinación de metabolitos volátiles y semivolátiles y ácidos aristoloquicos en *Aristolochia rigens vahl*. Trabajo de grado (Química). Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ciencias. Escuela de Química. Bucaramanga, **2008**, 100 p.p.
32. MÁRQUEZ, M.; Plantas aromáticas: Tratado de aromaterapia científica. Buenos Aires: Kier, **2004**, 232 p.
33. MATLALA , S.; PHENYE & DAVID, O.; SIMELANE; Arid-adapted Mexican leafhopper, *Barela parviscata* (Hemiptera: Cicadellidae), unsuitable for biocontrol of *Lantana camara* (Verbenaceae) in South Africa. *Biocontrol Science and Technology* , **2005**, 15 (6), pp.615-621.
34. MENDIVELSO, D.L. & OLIVARES, M.C. Estudio de los metabolitos secundarios volátiles en hojas frescas y secas de *Pelargonium graveolens* (geranio), en función del método de extracción y su desarrollo vegetativo. Trabajo de grado (Química). Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ciencias. Escuela de Química. Bucaramanga, **2007**, 202 p.p.
35. MESSAGE, G.M. Practical aspects of gas chromatography mass spectrometry. New York: John Wiley & Sons, **1984**, 351p.
36. MOLINA, J.L. Estudio de la variación composicional de la fragancia de las flores de *Brugmansia suaveolens* durante el día y la noche. Trabajo de grado. Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ciencias. Escuela de Química. Bucaramanga, **2005**, p. 21-25.

- 37.** MORA, A., Composición química del aceite de *Cymbopogon citratus* en función del método de extracción, época de cosecha y tiempo de secado de la planta. Trabajo de Investigación (Maestría en Química). Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ciencias. Escuela de Química. Bucaramanga, **1997**, p.p. 30-35.
- 38.** MUÑOZ, F. Plantas medicinales y aromáticas: estudio, cultivo y procesado. Madrid: Mundi- Prensa, **1987**, 365 p.
- 39.** NEWMAN, A.A. Chemistry of terpenes and terpenoids. New York: Academic Press, **1972**, p. 23-27.
- 40.** NGASSOUM, M.B.; YONKEU, S.; JIROVETZ, L.; and BUCHBAUER, G.; SCHMAUS, G.; HUMMERSCHMIDT, F.J.; Chemical composition of the essential oils of *Lantana camara* leaves and flowers from Cameroon and Madagascar. *Flavour and Fragrance Journal*, **1999**, 14, pp. 245-250.
- 41.** Observatorio nacional de biocomercio. Sistema de información de mercados para bienes y servicios de la biodiversidad .Proexport-Colombia [citada en 2007]: disponible en internet, <http://www.humboldt.org.co/4>.
- 42.** O'NEIL M.; LEWIS J.; NOBLE, M.; Isolation of Translactone-containing triterpenes with thrombin inhibitory activities from the leaves of *Lantana camara*. *Journal of Natural Products*. **1998**, 61, pp. 1328-1331.
- 43.** OSORIO, Y., Estudio de la composición química de los aceites esenciales de Eucalipto, limonaria y cipres y su aplicación en la creación de un extracto perfumado. Trabajo de grado (Química). Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ciencias. Escuela de Química. Bucaramanga, **1993**, p.p. 16-18.

44. OYEDEJI, O.A.; EKUNDAYO, O.; KÖNIG, W.A.; Volatile leaf oil constituents of *Lantana camara* L. From Nigeria. *Flavour and Fragrance Journal*, **2003**, 18, p.p. 384-386.
45. PINO, J.A.; MARBOT, R.; ROSADO, A.; ROMEU, C.; MARTI, M.P. Chemical composition of essential oil of *Lantana camara* L. from Cuba. *Journal of Essential Oil Research*, **2004**, 16, pp. 216-218.
46. QUIRÓZ, N., Obtención y análisis de los metabolitos secundarios volátiles de ylang-ylang (*Cananga odorata*, Hook fill Thomson, forma genuina). Trabajo de grado (Química). Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ciencias. Escuela de Química. Bucaramanga **1995**, p.p. 6-8.
47. RANA, V.S.; and PRASAD, D.; BLAZQUEZ, M.A.; Chemical composition of the leaf oil of *Lantana camara*. *Journal of Essential Oil Research*, **2005**, 17, pp. 198-200.
48. RANDRIANALIJAONA, J.A.; RAMANOCLINA, P.; RASOARAHONA, J.; and GAYDON, E.; Seasonal and chemotype influences on the chemical composition of *Lantana camara* L. Essential oils from Madagascar. *Analitica Chimica Acta*. **2005**, 545, p.p. 46-51.
49. RUÍZ C.A.. Estudio de los metabolitos secundarios volátiles de *Lippia organoides* H.B.K. en tres estados fenológicos. Trabajo de grado. Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ciencias. Escuela de Química. Bucaramanga, **2008**, 159 p.p.
50. RWANGABO, P.C.; Umuhengerin, a new antimicrobially active flavonoid from *Lantana trifolia*. *Journal of Natural Products*, **1988**, 51, (5), pp. 966-968.

51. SEFIDKON, F.; Essential oil of *Lantana camara* L. occurring in Iran. *Flavour and Fragrance Journal*, **2002**, 17, pp 78-80.
52. SHARMA O.; VAID J.; SHARMA P.; Comparison of lantadenes content and toxicity of different taxa of the lantana plant . *Journal of Chemical Ecology*, **1991**, 17, p.p. 2283-2291.
53. SHARMA, O.P. and SHARMA S.; PATTABHI, V.; MAHATO, S. ; SHARMA, P. A Review of the hepatotoxic plant *Lantana camara*. *Informa Healthcare*, **2007**, 37, pp.313-352.
54. SHARMA, O.P.; MAKKAR, H.P.; DAWRA, R.K.; A review of the noxious plant *Lantana camara*. *Toxicon*, **1988**, 26 (11), p.p. 975-987.
55. STASHENKO, E.; JARAMILLO, B.; MARTÍNEZ, J.; Comparación de la composición química y de la actividad antioxidante *in vitro* de los metabolitos secundarios volátiles de plantas de la familia Verbenaceae, *Revista de la Academia Colombiana de Ciencias Exactas Físicas y Naturales*, **2003**, 27, pp. 579-595.
56. STASHENKO, E., COMBARIZA, M., PUERTAS, M. Aceites esenciales: Técnicas de extracción y análisis. Bucaramanga: Facultad de Ciencias, Escuela de Química, Laboratorio de Fitoquímica y Cromatografía. **1998**.
57. SUNDUFU A.J.; SHOUSHAN, H. Chemical composition of the essential oils of *Lantana camara* L. occurring in south China. *Flavour and Fragrance Journal*, **2004**, 19, pp.229-232.

58. TAIZ L., ZEIGER E. Plant Physiology. 3 Ed., Sinauer Associates, Inc., Sunderland, **2002**, pp.317-343.
59. VERNIN, G., & PARKANYI, C., Chemistry of ginger. CRC Press LLC, **2005**.
60. WEYERSTAHL, P.; MARSCHALL, H.; ECKHARDT, A.,; and CHRISTIANSEN, C.; Constituents of commercial Brazilian *Lantana* oil. *Flavour and Fragrance Journal*, **1999**, 14, p.p. 15-28.
61. ZALUCKI, M.P.; DAY, M.D.; PLAYFORD, J.; Will biological control of *Lantana camara* ever succeed? Patterns, processes & prospects. *Biological Control*, **2007**, 42, p.p. 251-261.

ANEXOS

Anexo 1. Cienciometría.

CIENCIOMETRÍA

Los enfoques informétricos, bibliométricos y cienciométricos mediante los cuales la ciencia puede ser representada por los resultados obtenidos, se basan en la noción de que la esencia de las investigaciones científicas es la producción de conocimiento y que la literatura científica es un componente de ese conocimiento. La idea de examinar la literatura se remonta a los inicios del siglo XX. Sin embargo, no fue hasta 1963 con la creación del *Science Citation Index* (SCI), que se abrió el camino para todos los que buscaban medir la producción científica mediante métodos cuantitativos y objetivos.

El análisis de los datos informétricos y cienciométricos brinda información sobre la orientación y el dinamismo científico de un país y sobre su participación en la ciencia y la tecnología a nivel mundial. El análisis en colaboración posibilita identificar y representar las redes científicas y destacar los nexos entre países, instituciones e investigadores además de que permite conocer el impacto de los principales programas de investigación de las organizaciones. Entonces se puede afirmar que la cienciometría pone en relieve la estructura de las disciplinas científicas y las relaciones entre ellas .

La publicación de los resultados de las investigaciones es un compromiso que los científicos están obligados a cumplir. Los nuevos conocimientos producidos por los investigadores se han de transformar en información accesible a la comunidad científica, de ahí que la investigación se realice en un contexto de intercambio. Publicar los resultados de una investigación tiene 3 objetivos: divulgar los descubrimientos científicos, proteger la propiedad intelectual y lograr un reconocimiento. Un trabajo científico representa un concepto, un dato o una hipótesis; así, si el trabajo es la expresión de una persona o de un grupo que trabaja en un frente de investigación, se puede tener una idea acerca de la forma en que se organizan los investigadores a partir de los propios trabajos.



La cienciometría como término surgió en Europa Oriental, y alcanzó su máxima popularidad en 1977, con el surgimiento de la revista titulada *Scientometrics*. Inicialmente se publicó en Budapest, Hungría, por la editorial *Akadémiai Kiadó*, y después en

Amsterdam, Holanda, por la Editorial *Kluwer Academic Publishers*. Actualmente es una producción conjunta de ambas editoriales.

En el Compendio Enciclopédico de Bibliometría, Cienciometría e Informetría, el autor define a la Cienciometría, como una “disciplina perteneciente a la Cienciología que se ocupa del estudio y aplicación de métodos y modelos matemáticos dirigidos hacia una medición reproductiva de la ciencia como fenómeno social”; por cuanto revela las regularidades cuantitativas de la producción científica y su efecto en la sociedad. No obstante la anterior definición, es indudable la existencia de un alto nivel de solapamiento entre Bibliometría, cienciometría e informetría, principalmente en el flujo del conocimiento/información y en los métodos y modelos matemáticos afines, sin embargo, cada una tiene su propio objeto y tema de estudio específico: la bibliometría es la disciplina instrumental de la bibliotecología en tanto la Cienciometría lo es de la Cienciología, y la Informetría, de las Ciencias de la Información.

En conclusión, la Cienciometría mide el nivel de desarrollo y aporte de la ciencia, y esta no debe reducirse a los aspectos informacionales, puesto que no mide las regularidades de la información social ni las de los procesos de comunicación social, sino aquellas regularidades cuantitativas objetivas del nivel alcanzado y de su papel en la sociedad. Es decir, que la cienciometría estudia los aspectos cuantitativos de la ciencia como disciplina o actividad económica, forma parte de la sociología de la ciencia y encuentra aplicación en el establecimiento de las políticas científicas, donde incluye entre otras las de publicación. Ella emplea, al igual que las otras dos disciplinas estudiadas, técnicas métricas para la evaluación de la ciencia (el término ciencia se refiere, tanto a las ciencias naturales como a las sociales), y examina el desarrollo de las políticas científicas de países y organizaciones.

Anexo 2. Resultados del análisis de suelos.

| | | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------|
|  <p>LABORATORIO QUÍMICO DE SUELOS PROGRAMA DE SUELOS DIRECCIÓN: Carrera 27 Calle 9 Ciudad Universitaria Teléfono: 6344000 Ext. 2499</p> | <p>CONVENIO GOBERNACIÓN DE SANTANDER – UJE</p> <p>ESCUELA DE QUÍMICA – UNIVERSIDAD INDIUS RIAL DE SANTANDER Correo Electrónico: laboratorioquimicosuelos_uje@yahoo.com</p> | <p>ANÁLISIS DE SUELOS: UN BENEFICIO MAYOR Y PRIORITY PARA EL CAMPO</p> |
| <p>3</p> | <p>JULIO</p> | <p>2008</p> |
| <p>CLIENTE: Genivar</p> | <p>MUNICIPIO: Bucaramanga</p> | <p>Finc: Genivar</p> |
| <p>DIRECCIÓN:</p> | <p>VEREDA:</p> | <p>Cultivo: Lantana Camara</p> |
| <p>TOPOGRAFÍA: Plano</p> | <p>TELÉFONOS:</p> | <p>DEPARTAMENTO: Santander</p> |
| <p>EXTENSIÓN:</p> | | |
| <p>No. Laboratorio:</p> | | |
| <p>Lote: Muestra # 2 Lote # 2 Lantana Camara</p> | | |
| <p>Educ: 1 Año</p> | | |
| <p>Análisis de Resultados: La reacción del suelo es Medianamente Ácida (pH= 5.7). El contenido de Materia Orgánica es Bajo. El contenido de Nitrogeno total es Bajo. El nivel de Fósforo, Calcio, Magnesio, Potasio, Boro, Hierro, Manganeso, Cobalto, Zinc es Bajo. El nivel de Sodio es Normal. La Textura es Adecuada</p> | | |
| <p>Recomendaciones: APLICAR POR HECTÁREA - AÑO; LOS SIGUIENTES NUTRIENTES: *NITROGENO: 125 kilos. *FÓSFORO: 100 kilos. *CALCIO: 40 kilos. *MAGNESIO: 28 kilos. *POTASIO: 125 kilos. *BORO 2.3 kilos. *HIERRO: 3 kilos. *MANGANESO: 3 kilos. *COBRE: 3 kilos. *ZINC: 3 kilos. Los abonos se aplican sobre el suelo húmedo. NCTA: Las dosis recomendadas de los diferentes nutrientes se incorporan al suelo divididas en varias aplicaciones. Dentro de 10-13 meses se recomienda efectuar un Nuevo Análisis de Suelo Completo</p> | | |
|  | | <p>Hernar Castellanos P. Ingeniero Agrónomo U. Nal. T.P. 11090</p> |

Anexo 3. Contribuciones a los factores en análisis PCA.

Tabla1. Contribuciones de los componentes principales de las familias de compuestos presentes en el AE y extractos aislados por MWHD, SDE y SFE de *Lantana camara var. acculeata*.

| Familia de compuestos | Factor 1 | Factor 2 |
|------------------------------|-----------------|-----------------|
| OC | 0.149509 | 0.250529 |
| MT | 0.015696 | 0.240036 |
| MO | 0.277567 | 0.078109 |
| ST | 0.016453 | 0.332162 |
| SO | 0.304044 | 0.093392 |
| H | 0.236731 | 0.005771 |

OC: Otros compuestos oxigenados, MT: Monoterpenos.
MO: Monoterpenos oxigenados, ST: Sesquiterpenos.
SO: Sesquiterpenos oxigenados, H: Hidrocarburos.

