



## Caracterización química de las fracciones volátiles y aceites esenciales de hojas y flores de *Chromolaena barranquillensis* encontrada en Sabanalarga (Atlántico, Colombia)

[Chemical characterization of the volatile fractions and essential oils of leaves and flowers of *Chromolaena barranquillensis* from Sabanalarga (Atlántico, Colombia)]

Amner MUÑOZ ACEVEDO<sup>1\*</sup>, Vanessa C. ÁLVAREZ CARRILLO<sup>2</sup> & Mónica E. NIÑO PORRAS<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad del Norte/División de Ciencias Básicas/Departamento de Química y Biología/Laboratorio de Investigaciones en Química, Barranquilla, Colombia.

<sup>2</sup>Universidad del Atlántico, Barranquilla, Colombia.

Contactos / Contacts: Amner MUÑOZ ACEVEDO - E-mail address: [amnerm@uinorte.edu.co](mailto:amnerm@uinorte.edu.co)

### Abstract

Volatile secondary metabolites obtained from the leaves and flowers (fresh and dried) of *Chromolaena barranquillensis* (native specie of the Departamento del Atlántico), and isolated by simultaneous-distillation extraction (SDE) and conventional hydrodistillation (HD), were characterized chemically by gas chromatography coupled with mass spectrometry (GC-MS). The main compounds identified in the volatile fractions were: (a). fresh flowers –  $\beta$ -elemene (24.4%),  $\alpha$ -pinene (19.6%), and limonene (15.7%); (b). dried flowers –  $\beta$ -caryophyllene (21.4%), germacrene D (16.6%), and caryophyllene oxide (13.6%); (c). fresh leaves – myrcene (39.0%),  $\gamma$ -curcumene (17.8%), and limonene (10.2%); and, (d). dried leaves –  $\beta$ -caryophyllene (13.8%),  $\gamma$ -curcumene (9.8%),  $\beta$ -elemene (7.7%), and caryophyllene oxide (6.4%). In the essential oils (EO) were recognized as major components: (e). fresh flowers –  $\beta$ -caryophyllene (22.9%),  $\beta$ -elemene (14.3%), and germacrene D (14.0%); (f). dried flowers –  $\beta$ -caryophyllene (23.6%),  $\beta$ -elemene (20.6%), and germacrene D (15.8%); (g). fresh leaves –  $\beta$ -caryophyllene (22.0%), limonene (11.8%),  $\delta$ -cadinene (6.8%), and germacrene D (6.1%); and, (h). dried leaves –  $\beta$ -caryophyllene (29.1%), germacrene D (13.1%), and caryophyllene oxide (12.0%). The yields achieved in the isolation of EO were 0.2%/0.4% and 0.06%/0.1% for fresh/dried flowers and fresh/dried leaves, respectively.

**Keywords:** *Chromolaena barranquillensis*, hydrodistillation, SDE, GC-MS, essential oils, volatile fractions.

### Resumen

Los metabolitos secundarios volátiles obtenidos de hojas y flores (frescas y secas) de *Chromolaena barranquillensis* (especie nativa del departamento del Atlántico), aislados por destilación-extracción simultánea con solvente (SDE) e hidrodestilación convencional (HD), se caracterizaron químicamente por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS). Los compuestos mayoritarios que se identificaron en las fracciones volátiles fueron: (a). flores frescas –  $\beta$ -elemeno (24.4%),  $\alpha$ -pineno (19.6%) y limoneno (15.7%); (b). flores secas – *trans*- $\beta$ -cariofileno (21.4%), germacreno D (16.6%) y óxido de cariofileno (13.6%); (c). hojas frescas –  $\beta$ -mirceneno (39.0%),  $\gamma$ -curcumeno (17.8%) y limoneno (10.2%); y, (d). hojas secas – *trans*- $\beta$ -cariofileno (13.8%),  $\gamma$ -curcumeno (9.8%),  $\beta$ -elemeno (7.7%) y óxido de cariofileno (6.4%). En los aceites esenciales (AE) se reconocieron como componentes principales: (e). flores frescas – *trans*- $\beta$ -cariofileno (22.9%),  $\beta$ -elemeno (14.3%) y germacreno D (14.0%); (f). flores secas – *trans*- $\beta$ -cariofileno (23.6%),  $\beta$ -elemeno (20.6%) y germacreno D (15.8%); (g). hojas frescas – *trans*- $\beta$ -cariofileno (22.0%), limoneno (11.8%),  $\delta$ -cadineno (6.8%) y germacreno D (6.1%); y, (h). hojas secas – *trans*- $\beta$ -cariofileno (29.1%), germacreno D (13.1%) y óxido de cariofileno (12.0%). Los rendimientos alcanzados en el aislamiento de los AE fueron 0.2%/0.4% y 0.06%/0.1% para las flores frescas/secas y hojas frescas/secas, respectivamente.

**Palabras Clave:** *Chromolaena barranquillensis*, hidrodestilación, SDE, GC-MS, aceites esenciales, fracciones volátiles.

Recibido | Received: 5 de Septiembre de 2011.

Aceptado en versión corregida | Accepted in revised form: 25 de Octubre de 2011.

Publicado en línea | Published online: 30 de Noviembre de 2011.

**Declaración de intereses | Declaration of interests:** se agradece el apoyo financiero por parte de la División de Ciencias Básicas de la Universidad del Norte. Amner Muñoz Acevedo agradece a Colciencias por su apoyo económico a través de beca doctoral.

**Este artículo puede ser citado como / This article must be cited as:** Amner Muñoz Acevedo, Vanessa C. Álvarez Carrillo, Mónica E. Nino Porras. 2011. Caracterización química de las fracciones volátiles y aceites esenciales de hojas y flores de *Chromolaena barranquillensis* encontrada en Sabanalarga (Atlántico, Colombia). Bol Latinoam Caribe Plant Med Aromat 10(6): 581 – 589.

**Lista de abreviaciones:** AE (EO)-aceite(s) esencial(es) (essential oils); GC-MS-cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas; HD-hidrodestilación;  $I_R$ -índice de retención con programación lineal de temperatura; SDE-destilación-extracción simultánea con solvente.

## INTRODUCCIÓN

La familia *Asteraceae* está ampliamente distribuida en todo el mundo (Oceanía, Europa, Asia, África y América). La mayoría de especies que la constituyen son hierbas perennes; sin embargo, se encuentran algunos arbustos y árboles. Esta familia se divide en 3 subfamilias, 17 tribus y 1535 géneros, entre los cuales se encuentra *Chromolaena* (sinónimo botánico de *Eupatorium*) (King, 1970).

Las especies pertenecientes al género *Chromolaena*, se consideran malezas (Torrenegra et al., 2007) en la mayoría de los lugares en las que se encuentran; se caracterizan por ser arbustos de 1-3 m de alto, hojas lanceoladas y dentadas de 5-15 cm, flores azules o blancas, que presentan capítulos en corimbos de 5-10 cm de ancho, con dos períodos de floración durante el año (junio-julio, noviembre-diciembre) (Gupta, 1995).

Los extractos y aceites esenciales de estas especies han mostrado diversas actividades biológicas, entre las que se reportan antioxidante, larvicida, antifúngica, acaricida, antimicrobiana, repelente y citotóxica (Mongelly et al., 2002; Bailac et al., 2002; Souza et al., 2007; Albuquerque et al., 2004; Tedonkeng et al. 2004; Lancelle et al., 2009; Ling et al., 2003). Adicionalmente, sólo algunas especies pertenecientes al género tienen reportadas constituyentes volátiles en hojas y flores, e.g., *C. odorata*, *C. capillifolium*, *C. triplinerve*, *C. laevigatum*, *C. polystachyum*, *C. hecatanthum*, *C. cannabinum*, *C. paniculatum*, *C. ballotaefolium*, *C. macrophyllum* (Mirza et al., 2006).

La especie *Chromolaena barranquillensis* es una especie autóctona de la ciudad de Barranquilla; sin embargo, se ha encontrado en diferentes zonas rurales del Atlántico (e.g., Puerto Colombia, Usiacurí, Luruaco, Palmar de Valera, Ponedera y Salgar), de acuerdo con las bases de datos del Herbario Nacional de Colombia (Instituto de Ciencias Naturales, 2010), en donde se ha adaptado satisfactoriamente a las condiciones climáticas.

El propósito de este trabajo fue determinar las características químicas de los constituyentes volátiles

(CV) y aceites esenciales (AE) de las flores y hojas de *Chromolaena barranquillensis*, recolectada en el municipio de Sabanalarga (Atlántico), puesto que no existe ninguna información en la literatura científica sobre los componentes volátiles de esta planta. Para llevar a cabo las determinaciones químicas se aislaron los metabolitos secundarios volátiles de hojas y flores (secas y frescas) por técnicas extractivas (destilación-extracción simultánea con solvente - SDE) y destilativas (hidrodestilación convencional - HD). La separación e identificación de los componentes se realizó empleando cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS) e índices de retención ( $I_R$ ) calculados con programación lineal de temperatura.

## MATERIALES Y MÉTODOS

### Reactivos

Los reactivos utilizados fueron cloroformo (J.T. Baker, grado analítico) y agua destilada.

### Material vegetal

Las hojas y flores de *C. barranquillensis* (*Asteraceae*) se obtuvieron de plantas frescas recolectadas en Sabanalarga (Atlántico), a una altura de 94 msnm, longitud: 74° 56' 3.76" Oeste y latitud: 10° 38' 19.28" Norte. La identificación taxonómica (No. Voucher UTMC12878) fue realizada por E. Carbonó del Herbario UTMC de la Universidad Tecnológica del Magdalena. La confirmación de la taxonomía (No. Voucher HUA174777) fue realizada por F.J. Roldán del Herbario HUA de la Universidad de Antioquia. El permiso de colecta fue solicitado ante la Corporación Autónoma Regional del Atlántico.

### Destilación-extracción simultánea con solvente

Los metabolitos secundarios volátiles se aislaron en un equipo tipo Likens & Nickerson a microescala, modificado por Godefroot (Godefroot et al., 1981), para solventes de alta densidad. Se utilizaron 10-15 g del material vegetal. El solvente de extracción, cloroformo (2 mL), se empleó durante 2 h para obtener la fracción volátil. Finalmente, 2  $\mu$ L del extracto se inyectaron directamente al GC-MS.

### Hidrodestilación

Se utilizó un equipo tipo Clevenger con reservorio de destilación *Dean-Stark*. El material vegetal (100-200 g) se colocó con agua (300 mL) en un balón de 1 L y durante 3 h se realizó la extracción. El AE se separó

del agua por decantación y una alícuota del aceite (50  $\mu$ L) se diluyó con cloroformo (1 mL) para su análisis cromatográfico.

#### Cromatografía de gases-espectrometría de masas

Los extractos y AE se analizaron en un equipo Shimadzu GC-MS QP2010 *Plus*, con inyector *split/splitless* (relación *split* 1:10) y columna Shimadzu SHRX1-5MS (30 m x 0.25 mm D.I. x 0.25  $\mu$ m df) con fase estacionaria 5%-fenil-poli(dimetilsiloxano). La rampa de calentamiento utilizada en el horno cromatográfico fue: 50°C (5 min) @ 5°C/min hasta 200°C (5min) y @ 10°C/min hasta 260°C (20 min). Los espectros de masas se obtuvieron por ionización electrónica (EI, 70 eV) en un analizador másico cuadrupolar con rango de masas  $m/z$  40-350, en el modo de barrido completo de radiofrecuencia (*full scan*). Las temperaturas de la cámara de ionización y de la línea de transferencia se mantuvieron en 250 y 285°C, respectivamente. Los datos cromatográficos y espectroscópicos se procesaron con el *software LabSolutions GCMS solution* (Versión 2.50 SU3).

Los índices de retención fueron obtenidos usando los datos de una serie homóloga de hidrocarburos alifáticos saturados entre C<sub>7</sub>-C<sub>35</sub>, todos los extractos y AE fueron analizados en la misma

columna y condiciones. La identificación de los metabolitos secundarios fue realizada por comparación de los espectros de masas con las bases de datos NIST02, Wiley8 y Adams 2004 y por comparación de los índices de retención reportados en la literatura (Adams, 2004; Joulían and König, 1998; NIST Chemistry WebBook, 2010).

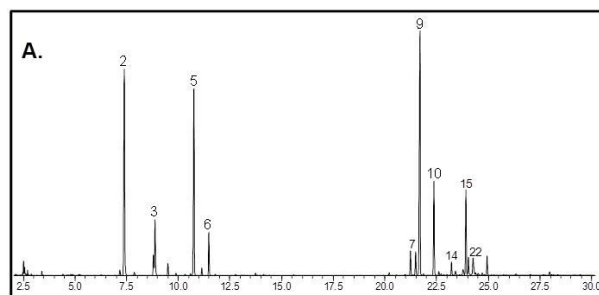
## RESULTADOS

### Características químicas de las fracciones volátiles y aceites esenciales de las partes aéreas de *Chromolaena barranquillensis*.

En los extractos SDE y AE de las flores y hojas frescas y secas de *C. barranquillensis*, se identificaron positivamente por GC-MS, 10-22 compuestos en cantidades relativas > 1%, que correspondieron ca. 84-95% del total de los extractos y AE. Los rendimientos de los AE, las composiciones completas de los extractos SDE y AE de las partes aéreas estudiadas, junto con las cantidades relativas y los I<sub>R</sub> apolares calculados y los reportados en la literatura (Adams, 2004; Joulían and König, 1998; NIST Chemistry WebBook, 2010), se registran en las **Tablas 1** y **2**. La corriente iónica total reconstruida típica de la fracción volátil obtenida mediante SDE de las flores frescas de *C. barranquillensis* se exhibe en la **Figura 1**.

**Figura 1**

Corriente iónica total reconstruida de la fracción volátil aislada de las flores (A.) frescas de *C. barranquillensis*.



La numeración asignada a los picos de la TIC está relacionada con la elución de los componentes identificados de acuerdo con la **Tabla 1**.

Tabla 1

Componentes mayoritarios identificados por GC-MS en las fracciones volátiles y aceites esenciales encontrados en las flores frescas y secas de *C. barranquillensis*

Orden elución	Compuesto	I <sub>R-5</sub>		Cantidad relativa, %			
		Calc. ‡	Lit. *	SDEFF	SDEFS	AEFF	AEFS
1	Metilpirrol	734	737	tr	2.0	----	----
2	α-Pineno	930	939	19.6	tr	2.6	1.1
3	β-Pineno	973	979	4.6	----	5.9	1.0
4	β-Mirceno	991	991	tr	----	7.5	2.7
5	Limoneno	1028	1029	15.7	tr	5.0	2.3
6	<i>trans</i> -β-Ocimeno	1050	1050	3.1	----	1.0	tr
7	α-Copaeno	1380	1377	1.8	2.6	2.6	2.8
8	β-Elemeno	1406	1391	24.4	5.6	14.3	20.6
9	<i>trans</i> -β-Cariofileno	1424	1419	7.7	21.4	22.9	23.6
10	α-Humuleno	1454	1455	1.0	2.4	2.3	2.4
11	γ-Curcumeno	1484	1483	----	1.8	----	----
12	Germacreno D	1486	1485	7.0	16.6	14.0	15.8
13	γ-Amorfeno **	1495	1496	----	tr	tr	tr
14	Viridifloreno **	1496	1497	----	tr	1.1	1.9
15	Biciclogermacreno	1499	1500	tr	1.4	2.6	2.0
16	Sesquiterpeno oxigenado	1513	----	----	1.9	----	----
17	δ-Cadineno	1528	1523	1.5	3.7	4.1	5.2
18	Sesquiterpeno oxigenado	1560	----	tr	1.4	----	----
19	Espatuleno	1590	1578	----	1.4	----	----
20	Óxido de cariofileno	1592	1583	tr	13.6	tr	1.0
21	Epóxido de humuleno II	1618	1608	----	1.8	----	----
22	α-Cadinol	1662	1654	----	4.6	1.5	2.6
23	Sesquiterpeno oxigenado	1679	----	----	2.6	----	----
	Total			88.1	85.3	87.9	85.3
	Rendimiento AE					0.2%	0.4%

‡ Calculados en columna SHRX1-5MS; \* Índices de retención reportados en la literatura; \*\* Identificación tentativa; tr. Cantidad relativa > 1%; SDEFF – Extracto SDE de flores frescas; SDEFS – Extracto SDE de flores secas; AEFF – Aceite esencial de flores frescas; AEFS – Aceite esencial de flores secas.

Los metabolitos secundarios volátiles estuvieron representados, en el extracto SDE de flores frescas, por el β-elemeno (24.4%), α-pineno (19.6%) y limoneno (15.7%) y en el de las flores secas por el *trans*-β-cariofileno (21.4%), germacreno D (16.6%) y óxido de cariofileno (13.6%). En el extracto con la fracción volátil de las hojas frescas se encontraron el β-mirceno (39.0%), γ-curcumeno (17.8%) y limoneno (10.2%) y en las hojas secas, el *trans*-β-cariofileno (13.7%), γ-curcumeno (9.8%) y β-elemeno (7.7%).

Los rendimientos de los AE de las flores y hojas frescas/secas de *C. barranquillensis* estuvieron entre 0.06-0.4%, los cuales se reportan por primera vez para esta especie.

Los constituyentes con mayor abundancia, identificados en el AE de flores frescas, fueron el *trans*-β-cariofileno (22.9%), β-elemeno (14.3%), germacreno D (14.0%) y β-mirceno (7.5%) y en el de flores secas lo fueron el *trans*-β-cariofileno (23.6%), β-elemeno (20.6%) y germacreno D (15.8%). En el AE de hojas frescas estuvieron el *trans*-β-cariofileno (22.0%), limoneno (11.8%), δ-cadineno (6.8%) y germacreno D (6.1%) y en el de las hojas secas, el *trans*-β-cariofileno (29.1%), germacreno D (13.1%), óxido de cariofileno (12.0%) y β-elemeno (9.3%).

Tabla 2

Componentes mayoritarios identificados por GC-MS en las fracciones volátiles y aceites esenciales encontrados en las hojas frescas y secas de *C. barranquillensis*

Orden elución	Compuesto	I <sub>R-5</sub>		Cantidad relativa, %			
		Calc. <sup>‡</sup>	Lit. <sup>*</sup>	SDEHF	SDEHS	AEHF	AEHS
1	Metilpirrol	734	737	----	tr	----	----
2	$\alpha$ -Pino	933	939	5.4	tr	5.0	tr
3	$\beta$ -Pino	975	979	1.2	tr	1.8	tr
4	$\beta$ -Mirreno	991	991	39.0	2.2	3.1	2.1
5	Limoneno	1028	1029	10.2	tr	11.8	tr
6	<i>trans</i> - $\beta$ -Ocimeno	1050	1050	3.0	tr	2.7	tr
7	Bicicloelemeno	1353	1345	----	1.8	tr	1.0
8	$\alpha$ -Copaeno	1380	1377	tr	5.0	1.6	2.4
9	$\beta$ -Elemeno	1406	1391	2.5	7.7	3.0	9.3
10	<i>trans</i> - $\beta$ -Cariofileno	1424	1419	6.1	13.8	22.0	29.1
11	$\beta$ -Copaeno	1440	1432	----	1.4	tr	tr
	Aromadendreno	1440	1441	----	tr	1.7	----
12	<i>cis</i> - $\beta$ -Farneseno	1446	1443	1.9	3.3	----	----
13	$\alpha$ -Humuleno	1454	1455	tr	3.4	2.5	2.7
14	$\gamma$ -Muuroleno	1474	1480	----	tr	3.9	tr
15	Germacreno D	1485	1485	3.0	1.7	6.1	13.1
16	$\gamma$ -Curcumeno	1490	1483	17.8	9.8	----	----
17	<i>ar</i> -Curcumeno	1492	1481	tr	3.7	----	tr
18	$\beta$ -Selineno	1494	1490	----	1.7	5.3	tr
19	$\gamma$ -Amorfen <sup>**</sup>	1495	1496	----	tr	1.2	tr
20	Viridifloren <sup>**</sup>	1496	1497	----	1.2	5.0	1.0
21	Biciclogermacreno	1504	1500	tr	4.0	tr	3.0
22	$\gamma$ -Cadineno	1519	1514	----	1.3	2.5	tr
23	$\delta$ -Cadineno	1528	1523	tr	4.7	6.8	3.6
24	Sesquiterpeno oxigenado	1560	----	1.1	1.3	tr	tr
25	<i>trans</i> -Nerolidol	1569	1563	----	1.1	1.2	1.1
26	Espatuleno	1590	1578	----	2.9	tr	2.8
27	Óxido de cariofileno	1592	1583	----	6.4	2.7	12.0
28	Epóxido de humuleno II	1618	1608	----	1.2	----	tr
29	Sesquiterpeno oxigenado	1649	----	----	tr	----	1.9
30	$\alpha$ -Cadinol	1662	1654	----	1.8	1.6	----
	Total			93.7	84.1	94.9	90.2
	Rendimiento AE					0.06%	0.1%

<sup>‡</sup>Calculados en columna SHRX1-5MS; <sup>\*</sup>Índices de retención reportados en la literatura; <sup>\*\*</sup>Identificación tentativa; tr. Cantidad relativa > 1%; SDEHF – Extracto SDE de hojas frescas; SDEHS – Extracto SDE de hojas secas; AEHF – Aceite esencial de hojas frescas; AEHS – Aceite esencial de hojas secas.

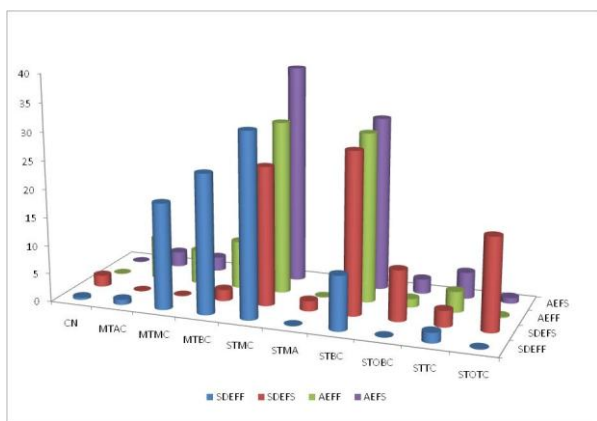
Los componentes mayoritarios reconocidos en los extractos SDE y AE de las flores y hojas estuvieron constituidos, en forma general, por sesquiterpenos (29-74%), monoterpenos (3-59%) y sesquiterpenos oxigenados (0-25%). No obstante, se realizó una clasificación más detallada, de acuerdo con las características terpénicas específicas, cuyas distribuciones se muestran en las **Figuras 2 y 3**. En estas **Figuras** se observa claramente que las composiciones químicas de los extractos y AE bajo estudio tienen diferencias marcadas entre las estructuras terpénicas más abundantes.

Así, el extracto de flores frescas tuvo mayor contenido de sesquiterpenos monocíclicos (32.4%) seguidos de monoterpenos bicíclicos (24.6%) y monocíclicos (18.8%); mientras que, el extracto de flores secas se caracterizó por tener alto contenido de sesquiterpenos bicíclicos (28.6%), monocíclicos (24.6%) y tricíclicos oxigenados (16.4%). El extracto SDE de las hojas frescas estuvo constituido por monoterpenos acíclicos (39.0%) y monocíclicos (13.2%) junto con sesquiterpenos aromáticos (17.8%) y el de las hojas secas, por sesquiterpenos bicíclicos (29.3%), aromáticos (13.5%), monocíclicos (11.1%) y tricíclicos oxigenados (10.6%).

En cuanto al AE de las flores frescas, éste contuvo en mayor proporción a los sesquiterpenos monocíclicos (30.6%) y bicíclicos (29.9%) junto con monoterpenos bicíclicos (8.5%) y acíclicos (7.5%); el AE de las flores secas mostró abundancia en sesquiterpenos monocíclicos (38.8%) y bicíclicos (30.9%). El AE de las hojas frescas fue más abundante en sesquiterpenos bicíclicos (43.6%) y tricíclicos (8.9%) junto monoterpenos monocíclicos (14.5%); finalmente, el de las hojas secas, por sesquiterpenos bicíclicos (38.9%), monocíclicos (12.0%) y tricíclicos oxigenados (15.7%).

**Figura 2**

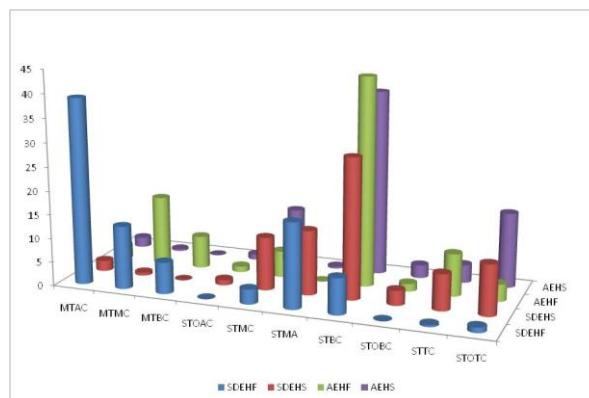
Distribución por características estructurales específicas de los constituyentes de los extractos SDE y AE de flores frescas y secas de *C. barranquillensis*.



- AEFS Aceite esencial de flores secas
- AEFF Aceite esencial de flores frescas
- SDEFS Extracto SDE de flores secas
- SDEFF Extracto SDE de flores frescas
- CN Compuestos nitrogenados
- MTAC Monoterpenos acíclicos
- MTMC Monoterpenos monocíclicos
- MTBC Monoterpenos bicíclicos
- STMC Sesquiterpenos monocíclicos
- STMA Sesquiterpenos monoaromáticos
- STBC Sesquiterpenos bicíclicos
- STOBC Sesquiterpenos oxigenados bicíclicos
- STTC Sesquiterpenos tricíclicos
- STOTC Sesquiterpenos oxigenados tricíclicos

**Figura 3**

Distribución por características terpénicas específicas de los componentes de los extractos SDE y AE de hojas frescas y secas de *C. barranquillensis*.



- AEHS Aceite esencial de hojas secas
- AEHF Aceite esencial de hojas frescas
- SDEHS Extracto SDE de hojas secas
- SDEHF Extracto SDE de hojas frescas
- MTAC Monoterpenos acíclicos
- MTMC Monoterpenos monocíclicos
- MTBC Monoterpenos bicíclicos
- STOAC Sesquiterpenos oxigenados acíclicos
- STMC Sesquiterpenos monocíclicos
- STMA Sesquiterpenos monoaromáticos
- STBC Sesquiterpenos bicíclicos
- STOBC Sesquiterpenos oxigenados bicíclicos
- STTC Sesquiterpenos tricíclicos
- STOTC Sesquiterpenos oxigenados tricíclicos

**DISCUSIÓN**

Puesto que no existen reportes de literatura acerca de la composición química de las fracciones volátiles y AE de *C. barranquillensis*, la discusión se basó en lo reportado por algunos autores sobre estudios realizados sobre AE de otras especies pertenecientes al género *Chromolaena*.

Los valores encontrados de los rendimientos de los AE de las flores y hojas de *C. barranquillensis* con los reportados de algunas especies de *Chromolaena* presentan diferencias. Así, la *C. cannabinum*, *C. polystachyum* y *C. odorata* mostraron rendimientos entre el 0.05-0.06% para sus hojas y 0.2-0.9% para sus flores (Tedonkeng et al. 2004; Flamini et al., 2003; Souza et al., 2007). Sin embargo, el

rendimiento (1.6%) de las hojas de *C. polystachyum*, ha sido el más alto reportado de las tres especies anteriormente mencionadas y al presentado por la *C. barranquillensis*. La diferencia entre los rendimientos puede atribuirse a las condiciones geobotánicas del medio (clima, suelo, altitud, precipitaciones), época de recolección, modo de manejo y almacenamiento del material vegetal (fresco, seco) (Panda, 2000).

Los AE aislados de *C. barranquillensis* presentaron diferencias considerables en sus rendimientos: eficiencia de flores secas > eficiencia de flores frescas > eficiencia de hojas secas > eficiencia de hojas frescas. Con base en estas diferencias se afirma que la mejor condición para aislar los AE de *C. barranquillensis* es que sus partes aéreas (flores/hojas) se encuentren deshidratadas/secas.

La composición de los AE se centró en *trans*- $\beta$ -cariofileno (22.9-23.6%),  $\beta$ -elemeno (14.3-20.6%), germacreno D (14.3-15.8%) y  $\beta$ -mirceno (2.7-7.5%), que fueron los componentes más abundantes de las flores de *C. barranquillensis* y en *trans*- $\beta$ -cariofileno (22.0-29.1%), limoneno (tr-11.8%), germacreno D (6.1-13.1%), óxido de cariofileno (2.7-12.0%) y  $\beta$ -elemeno (3.0-9.3%), los cuales estuvieron como compuestos principales de las hojas.

Al comparar estas composiciones con las de los AE de otras especies de *Chromolaena* se encontraron diferencias tanto en los compuestos identificados como en sus cantidades relativas y las partes aéreas estudiadas. Es así, como las hojas de *C. odorata*, la especie más abundante perteneciente al género, estudiada por Sohounhloue et al. (1996) tuvo un alto contenido de *trans*- $\beta$ -cariofileno (21.0%) y germacreno D (15.3%). Otro estudio más reciente (Kossouh et al., 2011) realizado en el mismo país y en la misma parte de la especie reportó como componentes principales al pregeijereno (29.9%), germacreno D (21.6%), *trans*- $\beta$ -cariofileno (14.3%) y geijereno (10.1%). Otras plantas de *C. odorata* de otros países, e.g., China (Ling et al., 2003), Camerún (Tedonkeng et al., 2004), Tailandia (Pisutthanan et al., 2006) y Costa de Marfil (Tonzibo et al., 2007), además, de *trans*- $\beta$ -cariofileno (7.3-21.3%) fueron ricos en  $\delta$ -cadineno (15.9%), bicilogermacreno (12.5%), germacreno D (14.0-34.5%), geijereno (8.0-11.8%) y pregeijereno (8.1-20.8%). Sólo tres de estos reportes de literatura, Kossouh et al. (2011), Sohounhloue et al. (1996) y Tonzibo et al. (2007), mencionan la parte de la planta (hojas) de donde se aislaron los AE.

Por otra parte, los AE de las hojas de *C. paniculatum* Poepp et Endl y la raíz de *C. betonicaeforme* Baker también contuvieron a *trans*- $\beta$ -cariofileno (46.8% y 41.7%, respectivamente) como compuesto mayoritario (Maia et al., 1999; Albuquerque et al., 2004).

Resulta interesante la diversidad composicional encontrada en los AE de otras especies de *Chromolaena*: metil-timil-éter (36.3%) en *C. capillifolium* (Tabanca et al., 2010);  $\alpha$ -pineno (51.0%) en *C. boniifolium* y espatulenol (25.1%) y 6-metil-5-hepten-2-ona (18.2%) en *C. viscidum* (Lancelle et al., 2009); 2-*ter*-butil-1,4-metoxibenceno (74.3%) y selina-4(15)-7(11)-dien-8-ona (36.6%) en *C. triplinerve* (Begun et al., 2010; Gupta et al., 2004); *p*-cimeno (23.7%) en otra especie de *C. capillifolium* (Pino et al., 1998); 2,5-dimetoxi-*p*-cimeno (69.7%) en *C. triplinerve*, aristolona + laevigatin (23.6%) y globulol (16,2%) en *C. laevigatum*, óxido de cariofileno (17.4%) y germacreno D (15.5%) en *C. amygdalinum*, germacreno D (16.8%) en *C. conyzoides*,  $\alpha$ -zingibereno (57.5%) en *C. marginatum* quimiotipo I,  $\alpha$ -gurgujeno (19.5%) y germacreno D (14.8%) en *C. marginatum* quimiotipo II, sabineno (46.7%) y limoneno (23.3%) en *C. macrophyllum*, globulol (25.1%) y germacreno D (21.6%) en *C. squalidum* quimiotipo I y óxido de cariofileno (30.1%) en *C. squalidum* quimiotipo II, 2-senecioil-4-vinilfenol (8.5-41.0%), 2,2-dimetil-6-vinilcroman-4-ona (10.3-25-5%),  $\gamma$ -muuroleno (10.4-19.0%) y  $\alpha$ -humuleno (11.7-14.6%) en *C. betonicaeforme*, limoneno (20.5-22.8%) y bicilogermacreno (12.0-19.2%) en *C. polystachyum* (Maia et al., 1999; Maia et al., 2002; Albuquerque et al., 2004; Souza et al., 2007); timol (7.8-12.2%), germacreno B (11.7-12.4%) y germacreno D (9.0-37.1%) en *C. cannabinum* de diferentes países (Flamini et al., 2003; Mirza et al., 2006; Judzentiene, 2007); y, amorf-4-en-7-ol (5.8-17.7%), acetato de bornilo (7.6-15.5%), *p*-cimeno (0.1-16.6%) y 3-acetoxiamorfa-4,7(11)-dien-8-ona (0.3-16.3%) en *C. adenophorum* (Padalia et al., 2009). Estas composiciones fueron determinadas en los AE de todas las partes de las plantas (flores, hojas, frutos, tallos y raíces), aunque algunos reportes no especifican las partes bajo estudio.

## CONCLUSIONES

Se reporta por primera vez la composición química de las fracciones volátiles y aceites esenciales de flores y hojas en estado fresco y seco de *C. barranquillensis*, una especie propia de la región norte de Colombia.



Estas composiciones difieren de los reportes encontrados en la literatura para otras especies pertenecientes al género *Chromolaena*. Se evidenció que las fracciones volátiles y AE de las flores de la especie bajo estudio fueron diferentes a las de sus hojas, lo que indicaría posiblemente que cada una de estas partes aéreas tiene un rol ecológico diferente. Se determinó para *C. barranquillensis* que la mejor condición para obtener mayor cantidad de AE es en el estado seco del material vegetal.

#### AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a los profesores Rubén Torrenegra y Rubén Jiménez por proponer investigar esta especie vegetal y proporcionar el material vegetal. Adicionalmente, se agradece el apoyo financiero por parte de la División de Ciencias Básicas de la Universidad del Norte. A.M.-A. agradece a Colciencias por su apoyo económico a través de beca doctoral.

#### REFERENCIAS

- Adams RP. 2004. **Identification of essential oil components by gas chromatography / quadrupole mass spectroscopy**. Ed. Allured Publishing Corporation, Carol Stream, Illinois, USA.
- Albuquerque MR, Silveira ER, De A Uchôa DE, Lemos TL, Souza EB, Santiago, GM, Pessoa OD. 2004. Chemical composition and larvicidal activity of the essential oils from *Eupatorium betonicaeforme* (D.C). Baker (Asteraceae). **J Agric Food Chem** 52: 6708 - 6711.
- Bailac PN, Dallacasa AD, Bernasconi HO, Firpo NH, Ponzi MI. 2002. Composición del aceite esencial y actividad antimicrobiana de *Eupatorium patens*. **Bol Soc Chil Quim** 45: 207 - 11.
- Begun J, Bhuiyan MNJ, Taznin T. 2010. Chemical composition and antimicrobial activity of essential oil from *Eupatorium triplinerve* Vahl. aerial parts. **Asian J Microbiol Environ Sci** 12: 543 - 547.
- Flamini G, Cioni PL, Morelli I. 2003. Analysis of the essential oil of the leaves and flowers/fruits of *Eupatorium cannabinum* L. from south Tuscany (central Italy). **J Essent Oil Res** 15: 127 - 129.
- Godefroot M, Sandra P, Verzele M. 1981. New method for quantitative essential oil analysis. **J Chromatogr** 203: 325 - 335.
- Gupta MP. 1995. **200 Plantas medicinales iberoamericanas**. Ed. CYTED-SECAB, Santa Fe de Bogotá, Colombia.
- Gupta D, Charles R, Garg SN. 2004. Chemical composition the essential oil from the leaves of *Eupatorium triplinerve* Vahl. **J Essent Oil Res** 16: 473 - 475.
- Instituto de Ciencias Naturales. 2010. Herbario Nacional de Colombia. [En línea] <http://www.biovirtual.unal.edu.co/INC/?controlador=QuickSearch&accion=searchByScientific&keyword=Chromolaena%20barranquillensis> [Citado el 29 de Noviembre de 2010].
- Joulian D, König WA. 1998. **The atlas of spectral data of sesquiterpenes hydrocarbons**. Ed. EB-Verlag, Hamburg, Germany.
- Judzentiene A. 2007. Chemical composition of leaf and inflorescence essential oils of *Eupatorium cannabinum* L. from Eastern Lithuania. **J Essent Oil Res** 19: 403 - 06.
- King RM, Robinson H. 1970. Studies in the *Eupatorieae* (Compositae). XXIX. The genus *Chromolaena*. **Phytologia** 20: 196 - 209.
- Kossouoh C, Moudachirou M, Adjakidje V, Chalchat JC, Figuéredo G, Chalard P. 2011. Volatile constituents of *Chromolaena odorata* (L.) R.M. King & H. Rob. leaves from Benin. **J Essent Oil Res** 14: 224 - 228.
- Lancelle HG, Giordano OS, Sosa ME, Tonn CE. 2009. Chemical composition of four essential oils from *Eupatorium spp.* biological activities toward *Tribolium castaneum* (Coleoptera: Tenebrionidae). **Rev Soc Entomol Argent** 68: 329 - 338.
- Ling B, Zang M, Kong C, Pang X, Liang G. 2003. Chemical composition of volatile oil from *Chromolaena odorata* and its effect on plant, fungi and insect growth. **Ying Yong Sheng Tai Xue Bao** 14: 744 - 746.
- Maia JGS, Zoghbi MGB, Da Silva MHL, Andrade EHA. 1999. Essential oils of *Eupatorium triplinerve* and *Eupatorium paniculatum*. **J Essent Oil Res** 11: 541 - 544.
- Maia JGS, Zoghbi MGB, Andrade EHA, Da Silva MH, Luz AI, Da Silva JD. 2002. Essential oils composition of *Eupatorium* species growing wild in the Amazon. **Biochem Syst Ecol** 30: 1071 - 1077.
- Mirza M, Najafpour NM, Dini M. 2006. Volatile constituents of essential oils isolated from



- flowers and leaves of *Eupatorium cannabinum* L. from Iran. **Iran J Pharm Res** 2: 149 - 152.
- Mongelly E, Pampurro S, Coussio J, Salomon H, Cicca G. 2002. Cytotoxic and DNA interaction activities of extracts from medicinal plants used in Argentina. **J Ethnopharmacol** 71: 145 - 151.
- NIST Chemistry WebBook. 2010. National Institute of Standards and Technology. [En línea] <http://webbook.nist.gov/chemistry/> [Consultado Julio – diciembre 2010].
- Padalia R, Bisht D, Joshi S, Mathela C. 2009. Chemical composition of the *Eupatorium adenophorum*. **J Essent Oil Res** 21: 522-524.
- Panda H. 2000. **Medicinal plants cultivation and their uses**. Asia Pacific Business Press Inc., Delhi, India.
- Pino JA, Rosado A, Fuentes V. 1998. Essential oil of *Eupatorium capillifolium* (Lam.) small from Cuba. **J Essent Oil Res** 10: 79 - 80.
- Pisutthanan N, Liawruangrath B, Baramee A, Apisariyakul A, Korth J, Bremner JB. 2006. Constituents of the essential oil from aerial parts of *Chromolaena odorata* from Thailand. **Nat Prod Res** 20: 636 - 640.
- Sohounhloue KD, Dangou J, Djossou L, Gnonhossou B, Sagbo AU. 1996. Chemical composition of the essential oil of *Chromolaena odorata* L. King Robinson collected in Houin (Benin). **J Soc Ouest-Afr Chim** 2: 75 - 82.
- Souza JT, Apel MA, Bordignon SA, Matzenbacher JA, Zuanazzi S, Henriques AT. 2007. Chemical composition and antioxidant activity of the volatile oil from *Eupatorium polystachyum* DC. **Braz J Pharmacogn** 17: 368 - 372.
- Tabanca N, Bernier UR, Tsikolia M, Becnel JJ, Sampson B, Werle C, Demirci B, Hüsnü Can Başer K, Blythe EK, Pounders C, Wedge DE. 2010. *Eupatorium capillifolium* essential oil: chemical composition, antifungal activity, and insecticidal activity. **Nat Prod Commun** 5: 1409 - 1415.
- Tedonkeng PE, Amvam PH, Tendonkeng, F, Kana JR, Fongang MD, Taponjdjou LA. 2004. Chemical composition and acaricide effect of the essential oil from the leaves of *Chromolaena odorata* (L.) King and Robins and *Eucalyptus saligna* Smith, on ticks (*Rhipicephalus lunulatus* Neumann) of the West African Dwarf goat in West Cameroon. **B Anim Health Prod** 52: 221 - 218.
- Tonzibo ZF, Wognin E, Chalchat JC, Guessan YT. 2007. Chemical investigation of *Chromolaena odorata* L. King Robinson from Ivory Coast. **J Essent Oil Bear** 10: 94 - 100.
- Torrenegra RD, Guzmán AJ, Rodríguez OE. 2007. Análisis fitoquímico de la especie colombiana *Chromolaena subscandens* (Hieron) R. M King & H. Rob. y determinación de su actividad antimicrobiana. **Sci et Techn** 23: 271 - 273.