

Análisis de la composición química del aceite esencial extraído de las hojas de *Ocotea Quixos* (Ishpink) por Cromatografía gaseosa acoplada a masas



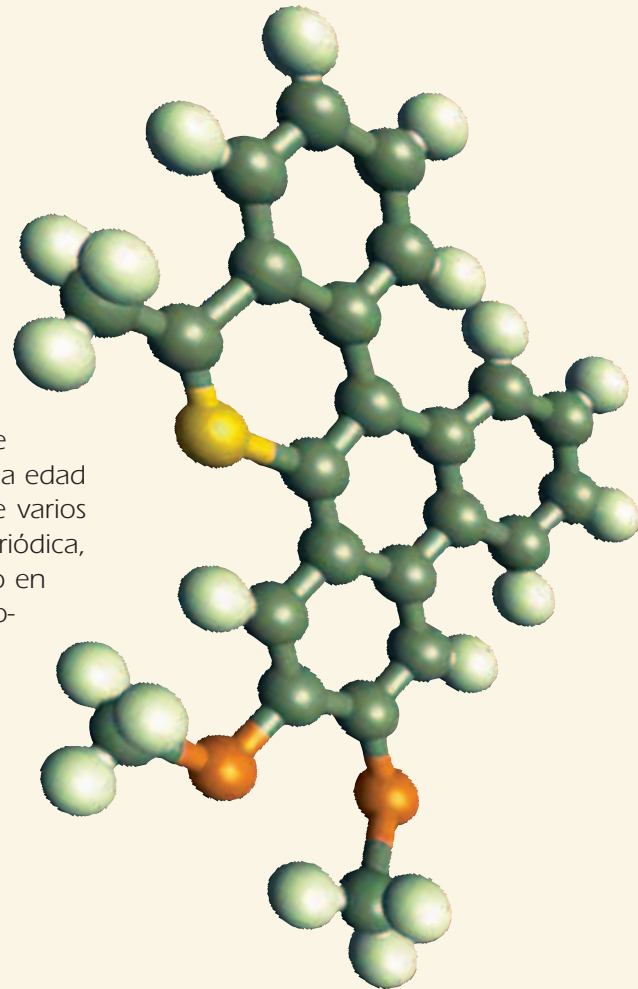
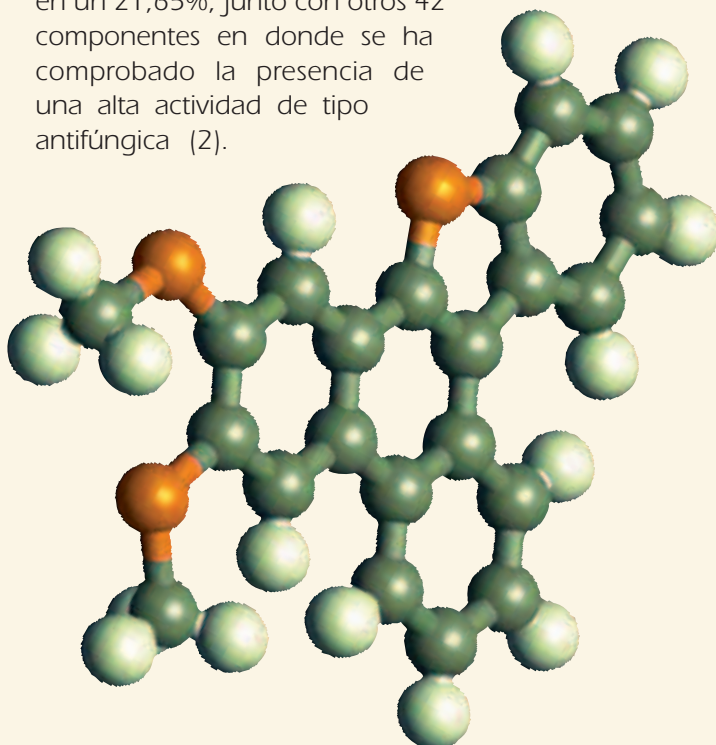
Noriega Paco (a), Samiego Manolo (b)
 a) Centro de Investigación y Valoración de la Biodiversidad, Universidad Politécnica Salesiana (Quito-Ecuador).
 b) Fundación Chankuap. Recursos para el futuro (Macas-Ecuador)

Síntesis

Conocido comúnmente como: canelón, Ishpink, ispingu o Ishpingu; el árbol de *Ocotea quixos*, es una planta perenne, pertenece a la familia de las Lauraceae (1), y constituye una variedad endémica del Ecuador.

El fruto es rico en aceites esenciales, entre sus componentes principales tiene al cinemaldehído en un 27,91% y el cinamato de etilo en un 21,65%, junto con otros 42 componentes en donde se ha comprobado la presencia de una alta actividad de tipo antifúngica (2).

Lamentablemente, el fruto florece solamente cuando el árbol llega a una edad madura; es decir luego de varios años y lo hace de forma periódica, no constante. Sin embargo en sus hojas también se ha logrado determinar la presencia de aceite esencial, ha sido el objeto de nuestro estudio.



1. Introducción

La descripción botánica de la planta es la siguiente: árbol de 2-5 m de altura, anchamente ramificado. Pecíolo 0,9-1,5 cm de longitud; láminas de 14,5-23,5 cm de longitud por 3,5-6,0 cm de ancho, base cuneada, ápice apiculado, margen entero, haz glabra, verde oscuro y envés glabro, verde claro. Flor blanco verdosa, escamas del disco pardonegras, anteras amarillo-claras. Cáliz de 6 sépalos, persistente hasta la maduración del fruto, conrescente fruto de 4 cm de longitud, oval con una semilla

grande. Crece en el bosque húmedo tropical. Es cultivado entre los 310 y 1.250 msnm (1).

La gas cromatografía acoplada a masas, por sus características, es una técnica analítica que permite por un lado separar los componentes de una mezcla compleja y por el otro analizar individualmente cada uno de los componentes asignándole un espectro de masas, que constituye la identidad del mismo, lográndose de esta manera identificarlo (3).

Un espectro de masas es el resultado del rompimiento de una molécula sea en iones positivos o en moléculas neutras (4), luego que a la misma se le ha sometido a una ionización. La formación de un espectro está íntimamente ligada con la estructura química de la molécula (5).

2. Parte experimental

2.1 Obtención del aceite

Para la obtención del aceite se empleó la técnica de destilación

con agua y vapor de agua (6). se utilizó un destilador de 250 litros de capacidad perteneciente a la Fundación Chankuap (Recursos para el futuro). El rendimiento fue de 30 ml por cada 10 kg de material vegetal fresco.

2.2 Condiciones del análisis cromatográfico

En la parte cromatográfica las condiciones fueron las siguientes:

Temperatura del inyector: 250° C
 Columna. Factor four VF-5 ms (30 m x 0,25 mm)
 Gas Transportador: Helio 1 ml/min
 Split: 200

Condiciones de la Columna:

Temp.(°C)	Rate(°C/min)	Hold (min)	Total (min)
50	0	2	2
100	20	0	4,50
220	5	1,50	30

Energía de ionización: 70 eV
 Corriente de Emisión: 40 mA
 Rango de masas: 40 – 650 m/z

Ion source temperatura: 220 °C
 Condiciones de la muestra: se inyectaron 2 _L de una solución 1:50 de aceite esencial en n-hexano.

3. Resultados

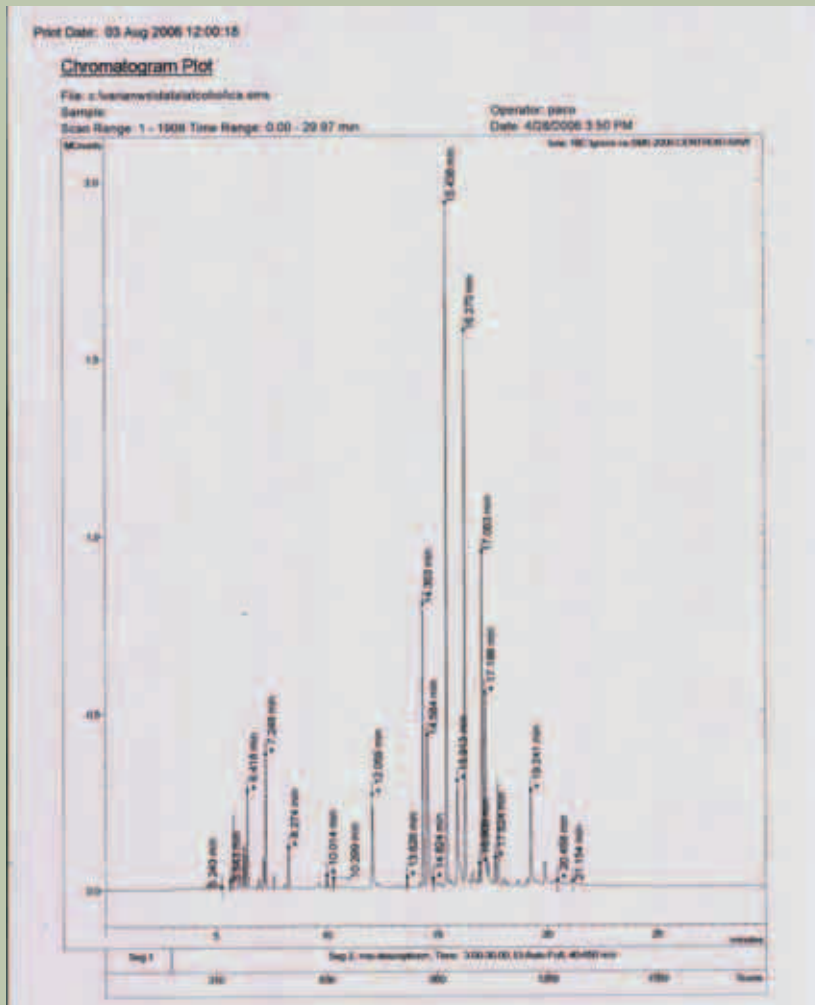
Se llegaron a detectar un total de

62 componentes de los cuales 30 fueron identificados comparando-

se con la base de datos de la NIST/02 (7)

Compuesto	Método de identificación	Tiempo de retención (min)	Identificado RA %	No Identificado RA %
1. NI	CG-MS	5,243		0,038
2. NI	CG-MS	5,543		0,128
3. NI	CG-MS	5,775		1,590
4. Canfeno	CG-MS	6,030	0,250	
5. Benzaldehido	CG-MS	6,211	0,886	
6. 1. 1R _- pineno	CG-MS	6,303	0,748	
7. 1R _-pineno	CG-MS	6,418	2,194	
8. NI	CG-MS	6,798		0,057
9. Terpinolen	CG-MS	6,955	0,197	
10. Cimeno	CG-MS	7,079	0,062	

Compuesto	Método de identificación	Tiempo de retención (min)	Identificado RA %	No Identificado RA %
11. 3,3 dimetil-2 metileno canfeno	CG-MS	7,154	0,708	
12. p Cíneol	CG-MS	7,246	2,951	
13. Mosleno	CG-MS	7,613	0,291	
14. NI	CG-MS	8,101		0,087
15. linalol	CG-MS	8,274	0,952	
16. hidroxicinemaldehido	CG-MS	8,629	0,113	
17. Bornil alcohol	CG-MS	9,893	0,053	
18. 4 terpineol	CG-MS	10,014	0,332	
19. _ terpineol	CG-MS	10,299	0,265	
20. cinemaldehido	CG-MS	12,059	3,425	
21. Anetol	CG-MS	12,270	0,055	
22. NI	CG-MS	13,294		0,056
23. _ cubebano	CG-MS	13,626	0,304	
24. NI	CG-MS	14,207		0,099
25. Ciclosativeno	CG-MS	14,250	0,088	
26. _ Copaeno	CG-MS	14,353	7,000	
27. Cinamato de metil	CG-MS	14,564	7,214	
28. NI	CG-MS	14,824		0,131
29. NI	CG-MS	15,066		0,126
30. NI	CG-MS	15,144		0,069
31. NI	CG-MS	15,241		0,067
32. _ cariofileno	CG-MS	15,438	19,029	
33. NI	CG-MS	15,599		0,078
34. NI	CG-MS	15,704		0,054
35. Cinamato de etilo	CG-MS	15,913	4,733	
36. NI	CG-MS	16,069		0,533
37. Humuleno	CG-MS	16,270	14,323	
38. NI	CG-MS	16,374		0,024
39. NI	CG-MS	16,590		0,286
40. NI	CG-MS	16,616		0,310
41. _ cumemeno	CG-MS	16,699	0,172	
42. NI	CG-MS	16,832		0,148
43. NI	CG-MS	16,909		0,610
44. Eremofileno	CG-MS	17,053	11,407	
45. NI	CG-MS	17,188		6,016
46. NI	CG-MS	17,315		1,092
47. NI	CG-MS	17,472		0,137
48. NI	CG-MS	17,546		0,054
49. _ cadineno	CG-MS	17,624	0,763	
50. NI	CG-MS	17,766		3,243
51. NI	CG-MS	17,986		0,133
52. NI	CG-MS	18,047		0,196
53. _ Calcoreno	CG-MS	18,215	0,099	
54. NI	CG-MS	18,673		0,196
55. NI	CG-MS	19,017		0,124
56. Espatuleno	CG-MS	19,091	0,280	
57. óxido de cariofileno	CG-MS	19,241	3,831	
58. NI	CG-MS	19,486		0,081
59. 1,5,5,8- tetrametil- 1,2 oxabicyclo 1,9,1,01 dodeca- 3,7-dieno	CG-MS	19,871	1,165	
60. NI	CG-MS	20,365		0,102
61. NI	CG-MS	20,458		0,063
62. NI	CG-MS	21,154		0,183
Total		83,89	16,111	



Nombre: Copaene
 Fórmula: C₁₅H₂₄
 MW: 204 CAS#: 3856-25-5 NIST#: 9240 ID#: 93545 DB: mainlib
 Other DBs: None
 10 largest peaks:

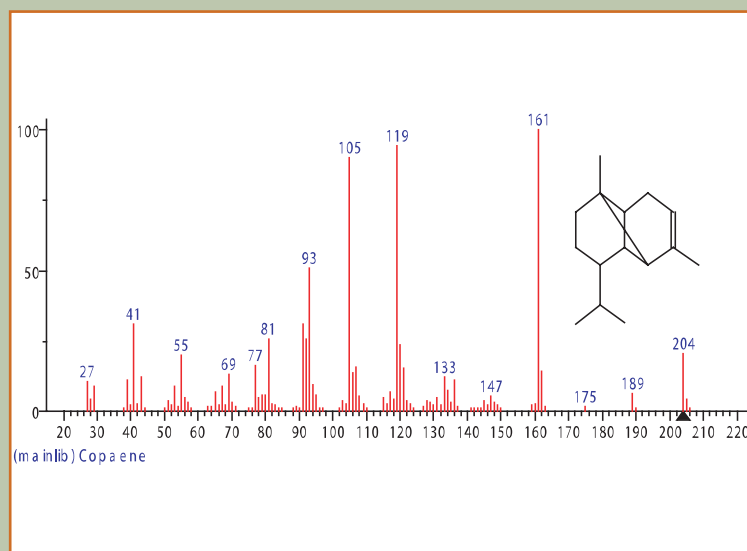
161 999	119 938
105 900	93 507
41 308	91 308
92 256	81 254
120 232	204 199

Sinonimos:

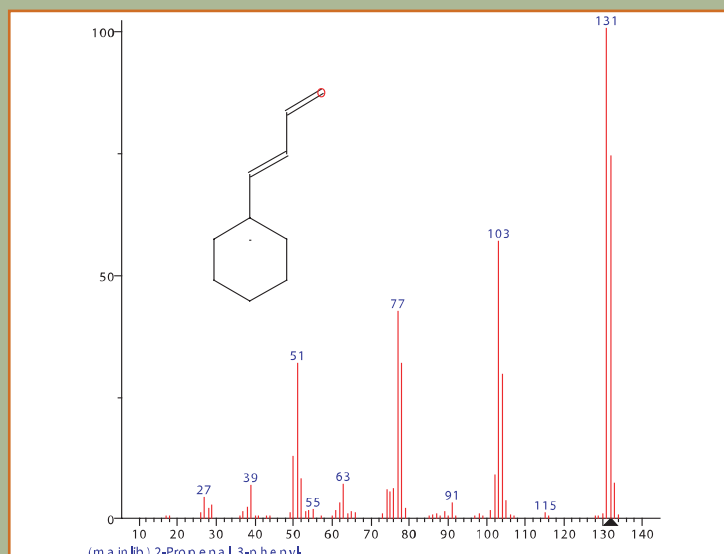
1. Tricyclo[4.4.0.0^{2,7}]dec-3-ene, 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, stereoisomer
2. Tricyclo[4.4.0.0^{2,7}]dec-3-ene, 8-isopropyl-1,3-dimethyl-, (1R,2S,6S,7S,8S)-(-)

3. à-Copaene
4. (-)-à-Copaene
5. Copaen
6. Tricyclo[4.4.0.0^{2,7}]dec-3-ene,

- 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, st
7. Aglaiene
8. Tricyclo[4.4.0.0^{2,7}]dec-3-ene, 8-isopropyl-1,3-dimethyl-



Nombre: 2-Propenal, 3-phenyl-
 Fórmula: C₉H₈O
 MW: 132 CAS#: 104-55-2 NIST#: 228898 ID#: 76024 DB: mainlib
 Other DBs: None
 Contributor: Japan AIST/NIMC
 Database- Spectrum MS-NW- 875



10 largest peaks:

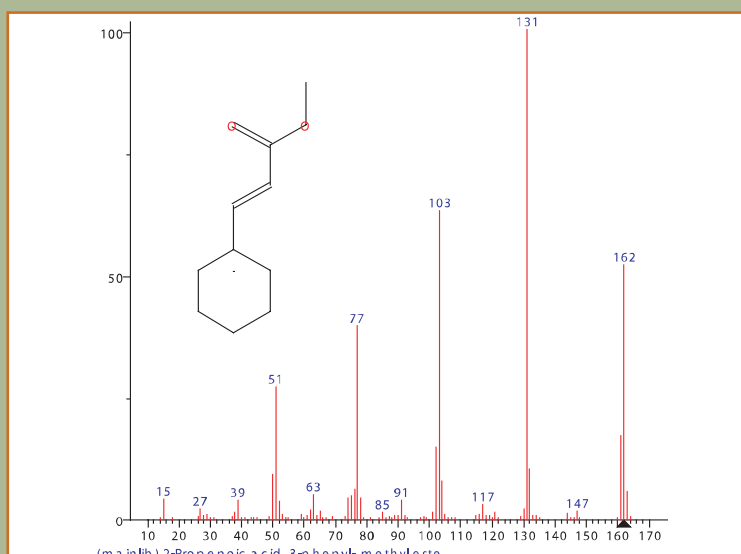
131	999	132	738
103	565	77	423
51	316		
78	316	104	292
50	126	102	
88		52	
80			

- | | |
|-------------------------------|--------------------------------|
| 3. Benzylideneacetaldehyde | 13. trans-Cinnamaldehyde |
| 4. Cassia aldehyde | 14. (E)-Cinnamaldehyde |
| 5. Cinnamal | 15. NCI-C56111 |
| 6. Cinnamic aldehyde | 16. Zimtaldehyde |
| 7. Cinnamylaldehyde | 17. Aldehyd skoricovy |
| 8. Phenylacrolein | 18. 3-Fenylpropenal |
| 9. 3-Phenyl-2-propenal | 19. 3-Phenylacrylaldehyde |
| 10. 3-Phenyl-2-propenaldehyde | 20. Abion CA |
| 11. 3-Phenylacrolein | 21. trans-3-Phenyl-2-propenal |
| 12. 3-Phenylpropenal | 22. (2E)-3-Phenyl-2-propenal # |

Sinonimos:

1. Cinnamaldehyde
2. Acrolein, 3-phenyl-

Nombre: 2-Propenoic acid, 3-phenyl-, methyl ester
 Fórmula: C₁₀H₁₀O₂
 MW: 162 CAS#: 103-26-4 NIST#: 229225 ID#: 75926 DB: mainlib
 Other DBs: None
 Contributor: Japan AIST/NIMC
 Database- Spectrum MS-NW-1518



10 largest peaks:

131	999	103	631
162	519	77	394
51	270		
161	170	102	148
132	102	50	
92		104	
78			

- | | |
|---------------------------------|--|
| 2. Methyl cinnamate | 7. Methyl 3-phenylacrylate |
| 3. Methyl cinnamylate | 8. Methyl ester of Cinnamic acid |
| 4. Methyl 3-phenylpropenoate | 9. Methyl (2E)-3-phenyl-2-propenoate # |
| 5. trans-Methyl cinnamate | |
| 6. Methyl 3-phenyl-2-propenoate | |

Sinonimos:

1. Cinnamic acid, methyl ester

Nombre: Caryophyllene

Fórmula: C₁₅H₂₄

MW: 204 CAS#: 87-44-5 NIST#:

291486 ID#: 49151 DB: mainlib

Other DBs: None

Contributor: NIST Mass Spectrometry Data Center, 1998.

10 largest peaks:

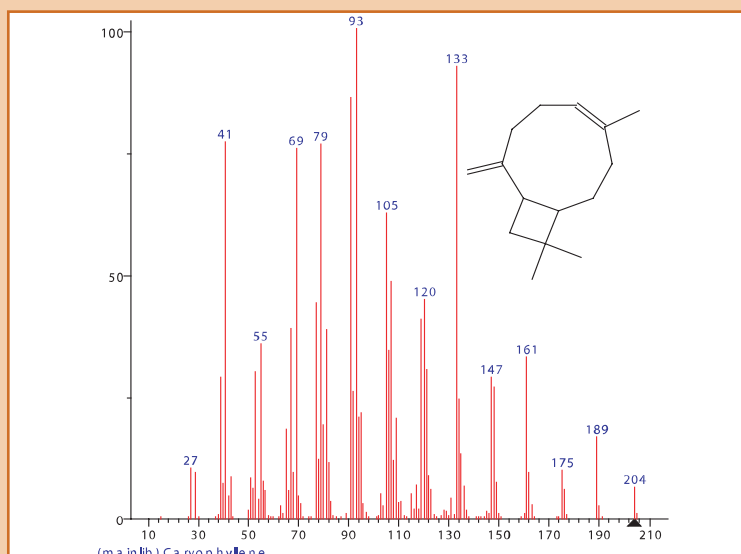
93 999 I	133 921 I
91 858 I	41 769 I
79 763 I	
69 754 I	105 623 I
107 483 I	120 447 I
77 439 I	

Sinonimos:

1. Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]-
2. Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, (E)-(1R,9S)-(-)
3. α -Caryophyllen
4. $\dot{\alpha}$ -Caryophyllene
5. trans-Caryophyllene

6. L-Caryophyllene

7. Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 8-methylene-4,11,11-trimethyl-, (E)-(1R,9S)-(-)
8. Caryophyllene, $\dot{\alpha}$ + $\dot{\alpha}$ mixt.
9. 8-Methylene-4,11,11-(trimethyl-)bicyclo[7.2.0]undec-4-ene
10. 4,11,11-Trimethyl-8-methylenebicyclo[7.2.0]undec-4-ene



Nombre: $\dot{\alpha}$ -Caryophyllene

Fórmula: C₁₅H₂₄

MW: 204 CAS#: 6753-98-6 NIST#:

152042 ID#: 48834 DB: mainlib

Other DBs: None

Contributor: Chemical Concepts

10 largest peaks:

93 999 I	80 292 I
41 279 I	121 277 I
92 162 I	
43 120 I	55 116 I
67 115 I	91 114 I
147 112 I	

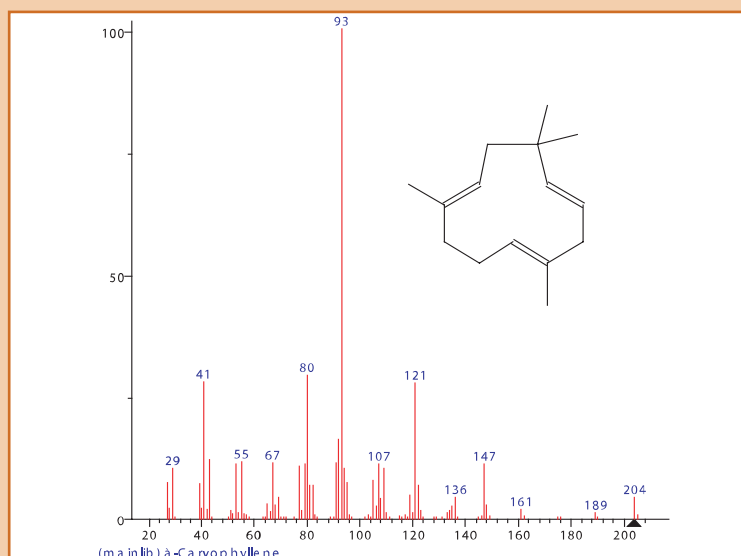
Sinonimos:

1. 1,4,8-Cycloundecatriene,

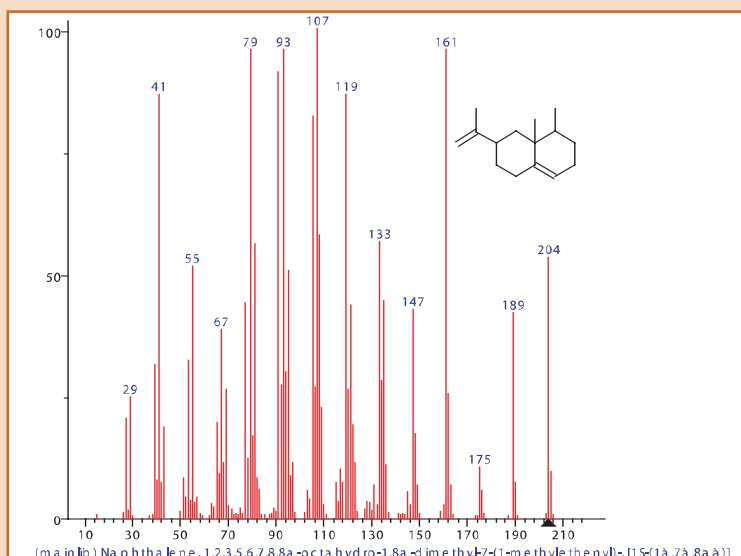
2. 6,6,9-tetramethyl-, (E,E,E)-
2. $\dot{\alpha}$ -Humulene
3. Humulene
4. Cycloundeca-1,4,8-trie-

ne,2,6,6,9-tetramethyl-

5. 2,6,6,9-Tetramethyl-1,4,8-cycloundecatriene

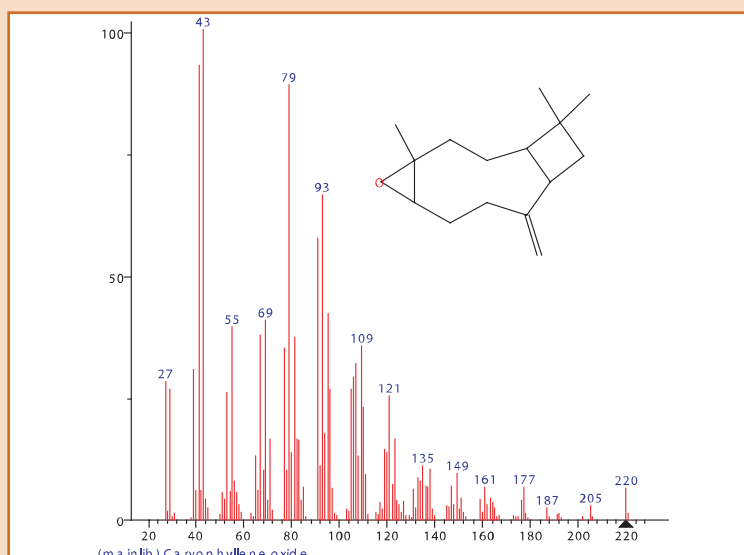


Nombre: Naphthalene,
1,2,3,5,6,7,8,8a-octahydro-1,8a-
dimethyl-7-(1-methylethenyl)-, [1S-
(1à,7à,8aà)]-
Fórmula: C15H24
MW: 204 CAS#: 10219-75-7
NIST#: 9235 ID#: 59986 DB:
mainlib
Other DBs: None
10 largest peaks:



107 999	93 955	Sinonimos:
161 955	79 955	1.Eremophila-1(10),11-diene
91 910		2.Eremophilene
41 865	119 865	3.3-Isopropenyl-4a,5-dimethyl-
105 820	108 578	1,2,3,4,4a,5,6,7-octahydronapht-
133 565		halene

Nombre: Caryophyllene oxide
Fórmula: C15H24O
MW: 220 CAS#: 1139-30-6 NIST#: 156329 ID#: 5414 DB: mainlib
Other DBs: None
Contributor: Chemical Concepts
10 largest peaks:



43 999	41 927
79 885	93 661
91 573	
95 420	69 407
55 393	67 377
81 373	

Sinonimos:
1.5-Oxatricyclo[8.2.0.0(4,6)]dodecane, 4,12,12-trimethyl-9-methylene-, [1R-(1R*,4R*,6R*,10S*)]-
2.5-Oxatricyclo[8.2.0.0(sup 4,6)]dodecane, 4,12,12-trimethyl-9-methylene-, (1R,4R,6R,10S)-

3.Caryophyllene oxide
4.Caryophyllene epoxide
5.(-)-á-Caryophyllene epoxide
6.á-Caryophyllene oxide
7.Epoxycaryophyllene
8.(-)-Epoxydihydrocaryophyllene
9.4,11,11-Trimethyl-8-methylene-5-oxatricyclo[8.2.0.0(4,6)]dodecane

10.(-)-5-Oxatricyclo[8.2.0.0(4,6)]dodecane,4,12,12-trimethyl-9-methylene-, [1R-(1R*,4R*,6R*,10S*)]-11.5-xatricyclo[8.2.0.0(4,6)]dodecane, 6,11,11-trimethyl-2-methylene-, [1R-(1R*,4R*,6R*,10S*)]-

4. Conclusiones

Se pudo apreciar dentro de este estudio que la composición química del aceite esencial de hojas de *Ocotea quixos*, difería de aquella encontrada en el aceite esencial del cáliz. Si bien es cier-

to, algunos componentes químicos se repiten como es el caso del cinemaldehído, su porcentaje es diferente. Además el número de componentes en el aceite de hoja es mayor. Por lo tanto, es

de vital importancia para este aceite iniciar las pruebas de actividad biológica, debido a que su composición es la de un aceite esencial no estudiado. ■

Bibliografía

- (1) Gupta Mahabir; 270 Plantas Medicinales Iberoamericanas; Cytel
- (2) Bruni Renato. Medici Alessandro; Chemical Composition and Biological Activities of Ishpingo essential oil, a traditional Ecuadorian spice from *Ocotea quixos* (Lam) Kosterm (Lauraceae) flower calices.
- (3) Mellerio Georgio; Apuntes de espectrofotometría de masa;
- (4) [Electron Impact Ionization](#) (Iowa State University) - Short Text
- (5) [GC/MS Introduction](#) (Sam Houston State University) - Text and Animations.
- (6) Sharapin Nikolai; Industrialización de Plantas Aromáticas; Cytel
- (7) NIST/02 Mass Spectral Library United States Government.