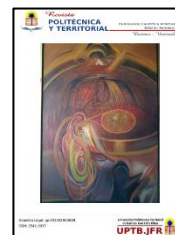




N° 1, V. 11 ENERO-JUNIO 2025/ Revista Científica Multidisciplinaria/
ISSN: 2542-3037 <https://revistapt.edublogs.org/>



DETERMINACIÓN DE COMPUESTOS QUÍMICOS ACTIVOS EN PLANTAS MEDICINALES POR CROMATOGRAFÍA DE GASES CON ESPECTROMETRÍA DE MASAS

Elsy Nohemi Álvarez Carmona 2,3, Belkys Dariana Ortega-Arguello 1,2,4, Ronal Gallegos 1,2,5, Franco Antonucci 1,2,6

1Academia de Ciencias Agrícolas de Venezuela, 2Universidad Nacional Experimental de los Llanos Occidentales Ezequiel Zamora, UNELLEZ, 3 Elsy Nohemi Álvarez Carmona, elsynohemi13@gmail.com, (<http://orcid.org/0009-0009-7612-9429>), 4ortegabelkys@unellez.edu.ve, (<http://orcid.org/0009-0008-6836-3146>), 5 ronal2g2144@gmail.com, (<https://orcid.org/0009-0009-6232-4696>) 6Franco Antonucci, antonuccifra@gmail.com, (<https://orcid.org/0009-0005-9527-8340>)

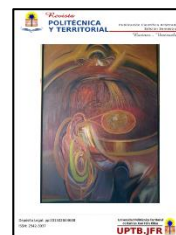
Resumen

Este ensayo científico explora la determinación de compuestos químicos activos en plantas medicinales mediante GC-MS, una técnica crucial para validar los usos tradicionales y asegurar la calidad de los productos fitoterapéuticos. Se detallaron los compuestos activos (alcaloides, flavonoides, terpenoides) y la importancia de su identificación y cuantificación. La GC-MS combina la separación cromatográfica con la espectrometría de masas para analizar la compleja composición de los extractos vegetales, abordando desde la preparación de la muestra hasta la optimización de las condiciones analíticas. La técnica es vital en el perfilado fitoquímico, el control de calidad y el descubrimiento de fármacos, pese a los desafíos con compuestos no volátiles, lo que la convierte en una herramienta indispensable para aprovechar el potencial de las plantas medicinales

Palabras clave

Compuestos activos, plantas medicinales, identificación, cuantificación.

Recibido: 2025-01-12 / Revisado: 2025-03-16/ Aceptado: 2025-04-31/
Publicado: 2025-06-30 / Páginas 628-647



DETERMINATION OF ACTIVE CHEMICAL COMPOUNDS IN MEDICINAL PLANTS BY GAS CHROMATOGRAPHY- MASS SPECTROMETRY

Elsy Nohemi Álvarez Carmona^{2,3}, Belkys Dariana Ortega-Arguello^{1,2,4}, Ronal Gallegos^{1,2,5}, Franco Antonucci^{1,2,6}

¹Academia de Ciencias Agrícolas de Venezuela, ²Universidad Nacional Experimental de los Llanos Occidentales Ezequiel Zamora, UNELLEZ, ³ Elsy Nohemi Álvarez Carmona, elsynohemi13@gmail.com, (<http://orcid.org/0009-0009-7612-9429>), ⁴ortegabelkys@unellez.edu.ve, (<http://orcid.org/0009-0008-6836-3146>), ⁵ronal2g2144@gmail.com, (<https://orcid.org/0009-0009-6232-4696>) ⁶Franco Antonucci,antonuccifra@gmail.com, (<https://orcid.org/0009-0005-9527-8340>)

ABSTRACT

This scientific essay explored the determination of active chemical compounds in medicinal plants using GC-MS, a crucial technique for validating traditional uses and ensuring the quality of herbal products. The active compounds (alkaloids, flavonoids, terpenoids) and the importance of their identification and quantification were detailed. GC-MS combines chromatographic separation with mass spectrometry to analyze the complex composition of plant extracts, addressing everything from sample preparation to the optimization of analytical conditions. The technique is vital in phytochemical profiling, quality control, and drug discovery, despite challenges with non-volatile compounds, making it an indispensable tool for harnessing the potential of medicinal plants.

Keywords

Active compounds, medicinal plants, identification, quantification.

Received: 2025-02-25 / Revised: 2025-03-17 / Accepted: 2025-05-01 /
Published: 2025-06-30 / Pages:628-647



Introducción

Las plantas medicinales han sido un pilar fundamental en la medicina tradicional a lo largo de la historia, y en la actualidad, el interés científico por validar y comprender sus propiedades terapéuticas es cada vez mayor. Este ensayo se centra en la determinación de compuestos químicos activos en plantas medicinales mediante cromatografía de gases con espectrometría de masas (GC-MS), una técnica analítica de vanguardia esencial para identificar y cuantificar los compuestos responsables de los efectos medicinales, garantizando así la calidad, seguridad y eficacia de los productos fitoterapéuticos y abriendo nuevas avenidas en el descubrimiento de fármacos (Contreras *et al*, 2014).

Las plantas medicinales son aquellas que contienen compuestos bioactivos utilizados para tratar enfermedades. Su uso se remonta a civilizaciones antiguas, donde se registraban en textos como el Papiro de Ebers, escrito en Egipto hace más de 3.500 años. En muchas comunidades, representan la primera línea de tratamiento para diversas enfermedades y continúan siendo fuentes de medicinas modernas. Hoy en día, se estima que más del 80% de la población mundial utiliza plantas medicinales de alguna forma (Campo *et al*, 2019).

Los compuestos activos son sustancias químicas que ejercen efectos biológicos en el organismo. Estos pueden ser metabolitos secundarios que actúan sobre procesos fisiológicos, proporcionando beneficios medicinales. Los compuestos químicos activos en plantas medicinales son los componentes responsables de sus propiedades terapéuticas, esenciales para la medicina herbal moderna, como se observa en la figura 1. Los compuestos activos se clasifican en diferentes grupos, incluyendo alcaloides, flavonoides, terpenoides y fenoles. Cada clase presenta características únicas y propiedades específicas que contribuyen a su efectividad. Ejemplos de compuestos activos incluyen la morfina, un alcaloide del opio utilizado como analgésico; y los flavonoides en el té

verde, que poseen propiedades antioxidantes y antiinflamatorias. Estos compuestos demuestran la eficacia de las plantas medicinales (Paech y Tracey ,2012).

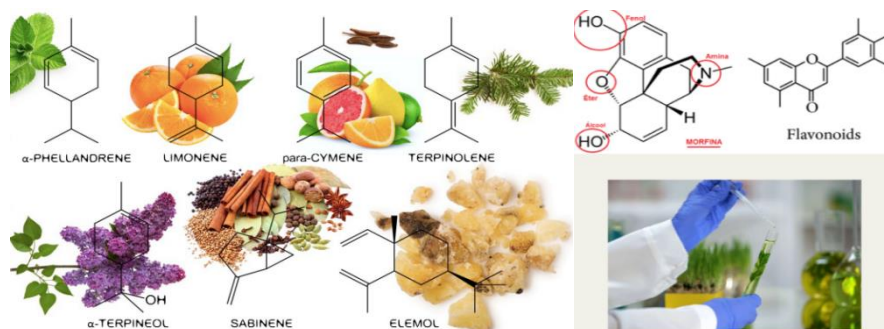


Figura 1. Representación de algunos compuestos activos de plantas medicinales

Resulta crucial identificar y cuantificar los compuestos químicos activos presentes en las plantas medicinales debido a que éstos son los responsables directos de sus efectos terapéuticos. Conocer la composición química exacta permite comprender mejor los mecanismos de acción a nivel biológico y farmacológico, lo que a su vez facilita la validación científica de los usos tradicionales. Además, la variabilidad natural en la concentración de estos compuestos, influenciada por factores como la especie, la ubicación geográfica, la época de cosecha y el método de procesamiento, subraya la necesidad de una caracterización precisa para asegurar la consistencia y predecibilidad de sus efectos (Gutiérrez *et al*, 2012).

Garantizar la calidad, seguridad y eficacia de los productos a base de plantas medicinales depende directamente de la identificación y cuantificación de sus componentes activos. La estandarización de los extractos y preparaciones a través de la determinación precisa de estos compuestos permite asegurar una dosificación adecuada y consistente, evitando así la variabilidad en los resultados terapéuticos y minimizando el riesgo de efectos adversos debido a concentraciones inadecuadas o a la presencia de contaminantes. Este riguroso control de calidad es



fundamental para generar confianza en el uso de productos fitoterapéuticos tanto por parte de los profesionales de la salud como de los consumidores (Gutiérrez *et al*, 2011).

La cromatografía de gases acoplada a la espectrometría de masas (*GC-MS*) se erige como una técnica analítica de vanguardia, ampliamente adoptada en diversos campos científicos debido a su notable capacidad para abordar el análisis de mezclas complejas de compuestos orgánicos volátiles y semivolátiles. En esencia, la GC separa los componentes de una muestra vaporizada en función de sus diferentes afinidades por una fase estacionaria dentro de una columna cromatográfica. Posteriormente, estos componentes separados son introducidos en un espectrómetro de masas, donde son ionizados y fragmentados, generando un patrón único de iones que permite su identificación inequívoca basada en su relación masa/carga (Ricaldi, 2014).

La potencia de la *GC-MS* radica en su capacidad para combinar la alta resolución de la cromatografía de gases con la especificidad de la espectrometría de masas. Mientras que la cromatografía proporciona una separación física de los componentes de la muestra, el espectrómetro de masas actúa como un detector altamente selectivo, capaz de identificar cada compuesto individualmente incluso cuando coeluyen parcialmente de la columna cromatográfica. Esta sinergia permite no solo la identificación cualitativa de los compuestos presentes, sino también su cuantificación precisa mediante la medición de la abundancia de los iones característicos (Ricaldi, 2014).

En el contexto del análisis de extractos de plantas medicinales, la *GC-MS* se convierte en una herramienta indispensable. Estos extractos suelen ser matrices complejas que contienen una vasta diversidad de compuestos orgánicos, incluyendo los principios activos responsables de sus propiedades terapéuticas, así como otros componentes que pueden influir en su calidad y seguridad. La *GC-MS* permite desentrañar esta complejidad, separando, identificando y cuantificando los compuestos



volátiles y semivolátiles presentes, proporcionando información crucial para la estandarización, el control de calidad y la investigación de los mecanismos de acción de las plantas medicinales (Ricaldi, 2014).

En torno a lo antes planteado surge el siguiente objetivo; Describir la determinación de compuestos químicos activos en plantas medicinales por Cromatografía de Gases con Espectrometría de Masas

Desarrollo

La esencia de la cromatografía de gases (GC) radica en su capacidad para separar los componentes volátiles de una mezcla compleja, basándose en las diferencias en sus propiedades fisicoquímicas y su afinidad por una fase estacionaria dentro de una columna. En este proceso, la muestra se vaporiza e introduce en la columna, donde un gas portador inerte la transporta a través de la fase estacionaria, que puede ser un líquido o un sólido. Los diferentes componentes de la mezcla interactúan de manera distinta con esta fase estacionaria, lo que provoca que se muevan a diferentes velocidades y, por lo tanto, se eluyan de la columna en tiempos distintos (García *et al*, 2010).

Esta separación temporal permite la identificación y cuantificación de cada componente individual a medida que emerge de la columna y es detectado por un dispositivo sensible. El tiempo que tarda cada componente en atravesar la columna, conocido como tiempo de retención, es característico para cada sustancia bajo condiciones específicas y se utiliza para su identificación. La cantidad de cada componente se determina a partir de la señal generada por el detector, lo que convierte a la cromatografía de gases en una técnica analítica poderosa y versátil para una amplia gama de aplicaciones, desde el control de calidad en la industria hasta el análisis ambiental y la investigación científica (García *et al*, 2010).

La esencia de la espectrometría de masas (MS) *reside* en su capacidad para identificar y cuantificar los componentes de una muestra mediante la medición precisa de la masa de sus iones. El proceso fundamental implica



la ionización de las moléculas presentes en la muestra, seguida de la separación de estos iones en función de su relación masa-carga (m/z). Estos iones separados son luego detectados, generando un espectro de masas que representa la abundancia de cada ion en función de su m/z (Ricaldi, 2014).

Ahora bien, este espectro proporciona información valiosa sobre la composición molecular de la muestra, incluyendo la masa molecular de los analitos y sus patrones de fragmentación característicos. Al analizar estos patrones, es posible deducir la estructura química de las moléculas presentes y determinar la cantidad de cada componente. Gracias a su alta sensibilidad y especificidad, la espectrometría de masas se ha convertido en una herramienta indispensable en diversos campos como la química, la biología, la medicina, la ciencia de los materiales y el análisis ambiental, permitiendo la identificación de compuestos, la elucidación de estructuras y la cuantificación de analitos en matrices complejas (Contreras *et al*, 2014).

En un sistema GC-MS, la muestra se introduce primero en el cromatógrafo de gases, donde sus componentes volátiles se separan en el tiempo a medida que eluyen de la columna. Estos componentes separados fluyen directamente hacia la fuente de iones del espectrómetro de masas, donde son ionizados y fragmentados (Contreras *et al*, 2014).

El espectrómetro de masas analiza entonces los iones generados en función de su relación masa-carga (m/z), produciendo un espectro de masas para cada componente que eluye de la columna de GC. Este espectro único actúa como una huella dactilar molecular, permitiendo la identificación inequívoca de cada compuesto separado. Además, la intensidad de los picos en el espectro de masas proporciona información cuantitativa sobre la abundancia de cada analito en la muestra original. Como se observa en la figura 2, la sinergia entre la eficiencia de separación de la GC y la capacidad de identificación y cuantificación de la MS convierte al GC-MS en una herramienta fundamental para el análisis de mezclas

complejas en una amplia gama de aplicaciones, desde la detección de contaminantes ambientales hasta la identificación de metabolitos en muestras biológicas y el análisis de fragancias y aromas (García *et al*, 2010).

Existen otras técnicas como la cromatografía líquida de alta eficacia (HPLC) y la resonancia magnética nuclear (RMN) que también se utilizan para el análisis de compuestos. Estas técnicas complementan a GC y MS, brindando información adicional sobre la estructura y composición de los compuestos activos (Sarria *et al*, 2021). La recolección y el secado son etapas fundacionales que impactan directamente la calidad del análisis posterior. Una identificación botánica precisa es esencial para asegurar que la especie recolectada sea la correcta y evitar confusiones. Se debe prestar atención a la parte específica de la planta que contiene los compuestos de interés (hojas, flores, raíces, tallos, frutos, etc.), ya que la concentración de metabolitos puede variar significativamente entre ellas (García *et al*, 2010).

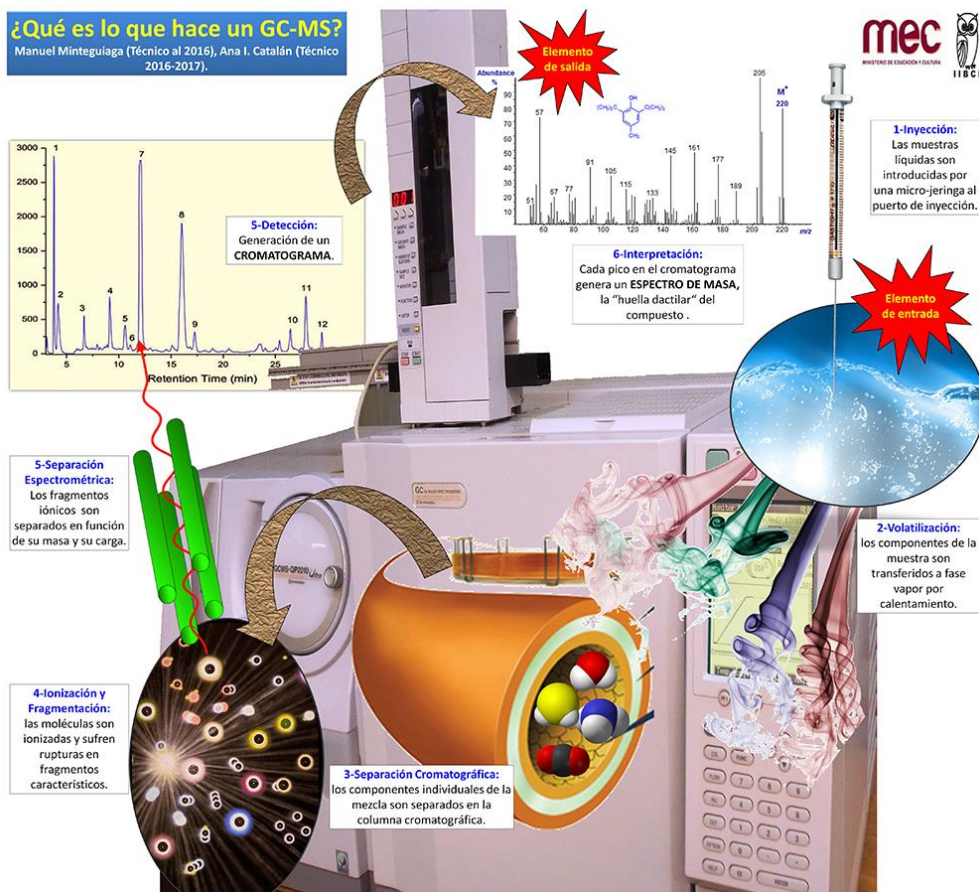


Figura 2. Sistema Cromatografía de Gases acoplado a un Espectrómetro de Masas

La época de recolección también es un factor crítico, ya que los niveles de compuestos activos pueden fluctuar a lo largo del ciclo de vida de la planta, influenciados por factores ambientales y el estado de desarrollo. En cuanto al secado, el objetivo principal es reducir la actividad enzimática y el contenido de agua para prevenir la degradación de los compuestos y facilitar su conservación. Métodos comunes incluyen el secado al aire a temperatura ambiente en un lugar oscuro y ventilado, el secado en estufa a temperaturas controladas (generalmente entre 40-60 °C) o la liofilización, siendo esta última la que mejor preserva la integridad de los compuestos sensibles al calor (García et al, 2010).

La molienda y la homogeneización son pasos necesarios para aumentar la superficie de contacto entre la muestra vegetal y el solvente de extracción. Al reducir el tamaño de partícula mediante molinos o morteros, se facilita la liberación de los compuestos activos del interior de las células vegetales. Una homogeneización adecuada asegura que la muestra sea representativa y que se obtenga una extracción uniforme de los analitos de interés en toda la masa. Esto es crucial para obtener resultados precisos y reproducibles en los análisis posteriores (García et al, 2010).

La extracción de los compuestos activos es una etapa clave donde se separan los analitos de interés de la matriz vegetal. Se utilizan diversas técnicas de extracción, siendo la extracción con solventes una de las más comunes. Dentro de esta, encontramos métodos como la Soxhlet, que permite una extracción continua con solvente fresco; la maceración, que implica la inmersión de la muestra en el solvente durante un tiempo determinado; y la agitación, que mejora la eficiencia de la extracción mediante el movimiento constante de la mezcla. Técnicas más modernas como la extracción asistida por ultrasonido (UAE) y la extracción asistida por microondas (MAE) utilizan energía para romper las paredes celulares y



aumentar la solubilidad de los compuestos. La elección del solvente es fundamental y depende de la polaridad de los compuestos que se desean extraer. Solventes comunes incluyen el metanol (polar), el etanol (polar), el acetato de etilo (moderadamente polar) y el hexano (no polar). La selectividad del solvente es crucial para minimizar la extracción de compuestos no deseados que podrían interferir en el análisis (Gutiérrez et al, 2011).

En algunos casos, es necesario realizar una derivatización de ciertos compuestos para mejorar sus propiedades para el análisis, especialmente en cromatografía de gases (GC). Compuestos como los ácidos orgánicos, azúcares y aminoácidos pueden ser poco volátiles o térmicamente inestables, lo que dificulta su análisis por GC. La derivatización consiste en la reacción química de estos compuestos con un agente derivatizante para formar derivados más volátiles y estables, facilitando su separación y detección. Un agente de derivatización común es el TMS (trimetilsilil), que reemplaza los hidrógenos activos de grupos funcionales como -OH y -COOH por grupos trimetilsililo, aumentando la volatilidad y estabilidad térmica de los analitos (García et al, 2010).

Finalmente, la limpieza y concentración del extracto son pasos esenciales para obtener un analito purificado y en una concentración adecuada para el análisis instrumental. La limpieza busca eliminar interferencias que puedan enmascarar o dificultar la detección de los compuestos de interés. Esto puede incluir la eliminación de lípidos mediante la partición líquido-líquido con solventes no polares o la eliminación de pigmentos mediante el uso de adsorbentes. La concentración del extracto se realiza para aumentar la sensibilidad del método analítico, generalmente mediante la evaporación del solvente utilizando un flujo de nitrógeno o un rotoevaporador, permitiendo obtener una solución más concentrada de los analitos de interés (García et al, 2010).



Las condiciones cromatográficas en GC son cruciales para lograr una separación eficiente de los compuestos presentes en la muestra. La selección de la columna es un factor determinante, donde la longitud influye en la resolución (columnas más largas tienden a ofrecer mejor separación), el diámetro interno afecta la capacidad de la columna y la eficiencia, la fase estacionaria (polar o no polar) interactúa diferencialmente con los analitos según sus propiedades químicas, y el espesor de la película de la fase estacionaria influye en la retención y la resolución. La programación de la temperatura del horno es un gradiente de temperatura aplicado a lo largo del tiempo de análisis, diseñado para eluir los compuestos en orden de su punto de ebullición e interacción con la fase estacionaria. La temperatura del inyector debe ser lo suficientemente alta para vaporizar la muestra rápidamente sin causar degradación térmica. Finalmente, la velocidad del flujo del gas portador (generalmente helio o hidrógeno) afecta la velocidad con la que los analitos atraviesan la columna y, por lo tanto, la eficiencia de la separación. Ajustar cuidadosamente estos parámetros permite optimizar la resolución y obtener picos cromatográficos bien definidos para cada compuesto (Paech y Tracey, 2012).

Las condiciones del espectrómetro de masas (MS), acoplado al GC, determinan cómo se ionizan y detectan los analitos eluidos de la columna. La fuente de ionización, comúnmente la ionización por impacto electrónico (EI) con una energía de ionización estándar de 70 eV, fragmenta las moléculas generando iones característicos que permiten su identificación. El modo de adquisición puede ser de barrido completo (full scan), donde se registra el espectro de masas completo en un rango de masas definido, proporcionando información cualitativa exhaustiva para identificar compuestos desconocidos. La desventaja de este modo es una menor sensibilidad al distribuir la detección en un amplio rango de masas. Alternativamente, la monitorización de iones selectivos (SIM) se enfoca en la detección de iones específicos característicos de los analitos de interés, lo que aumenta significativamente la sensibilidad y es ideal para el análisis



cuantitativo de compuestos conocidos. Sin embargo, el modo SIM requiere conocer los iones característicos de los analitos previamente. El rango de masas escaneado y la velocidad de escaneo deben optimizarse para asegurar la detección adecuada de los analitos dentro del tiempo de elución de cada pico cromatográfico (Paech y Tracey, 2012).

La identificación de compuestos en GC-MS se basa principalmente en la comparación del espectro de masas obtenido experimentalmente para cada pico cromatográfico con las bibliotecas espectrales disponibles, siendo NIST y Wiley las más reconocidas. Estas bibliotecas contienen los espectros de masas característicos de miles de compuestos, generados bajo condiciones estandarizadas. La búsqueda en la biblioteca arroja coincidencias basadas en la similitud de los patrones de fragmentación iónica. Sin embargo, para una identificación más confiable, es crucial considerar el tiempo de retención del compuesto en la columna cromatográfica. Dos compuestos diferentes pueden tener espectros de masas similares, pero es muy improbable que eluyan exactamente al mismo tiempo bajo las mismas condiciones cromatográficas. Por lo tanto, la concordancia tanto del espectro de masas como del tiempo de retención con los datos de referencia aumenta significativamente la certeza de la identificación (Paech y Tracey, 2012).

La cuantificación de los compuestos activos se realiza mediante la construcción de curvas de calibración. Estas curvas se obtienen analizando una serie de soluciones de concentraciones conocidas de estándares de referencia puros del analito de interés y graficando la respuesta del detector (generalmente el área bajo el pico del ion seleccionado en el modo SIM) frente a la concentración. Una vez establecida la curva de calibración, se puede determinar la concentración del analito en la muestra desconocida interpolando su respuesta en la curva. Para corregir las posibles variaciones en el volumen de inyección y las fluctuaciones en la respuesta del detector a lo largo del tiempo, se emplean estándares internos o externos. Un estándar interno es un compuesto diferente al analito de



interés que se añade a cada muestra y a los estándares de calibración en una concentración constante. La relación entre la respuesta del analito y la del estándar interno se utiliza para la cuantificación, corrigiendo las variaciones. Un estándar externo se analiza por separado y su curva de calibración se utiliza para cuantificar el analito en las muestras, asumiendo una respuesta del detector constante (figura 3). La elección entre estándares internos y externos depende de la complejidad de la matriz de la muestra y los requisitos de precisión del análisis (Gutiérrez et al, 2011).

La cromatografía de gases acoplada a la espectrometría de masas (GC-MS) resulta una técnica analítica de gran potencia en el campo de la fitoquímica. Su capacidad para llevar a cabo el perfilado fitoquímico permite obtener una visión exhaustiva de los componentes volátiles y semivolátiles presentes en los extractos de plantas, lo cual resulta esencial para desentrañar su compleja composición química. Esta técnica no solo facilita la identificación de compuestos bioactivos específicos, responsables de las propiedades medicinales de las plantas (como alcaloides, terpenoides y flavonoides volátiles presentes en aceites esenciales), sino que también desempeña un papel crucial en el control de calidad de materias primas y productos herbolarios (Campo et al, 2019). Mediante la GC-MS, es posible verificar la autenticidad de las especies vegetales, detectar posibles adulteraciones y asegurar la consistencia en la composición de los productos a base de hierbas, garantizando así su seguridad y eficacia (Marchese et al., 2018).

Más allá del control de calidad, la GC-MS contribuye significativamente a diversas áreas de la investigación. En el campo de la quimiotaxonomía, los perfiles de compuestos generados por esta técnica ofrecen valiosa información para estudiar las relaciones evolutivas y taxonómicas entre diferentes especies de plantas. En la investigación farmacológica, la identificación y cuantificación precisas de los compuestos activos mediante GC-MS constituyen pasos fundamentales en el descubrimiento y desarrollo de nuevos fármacos a partir de fuentes naturales. Adicionalmente, la GC-

MS reviste una importancia particular en el análisis detallado de la composición de los aceites esenciales, ampliamente utilizados en aromaterapia y otras aplicaciones, proporcionando un conocimiento profundo de sus componentes y, por ende, de sus propiedades y posibles usos (Gutiérrez et al, 2011).

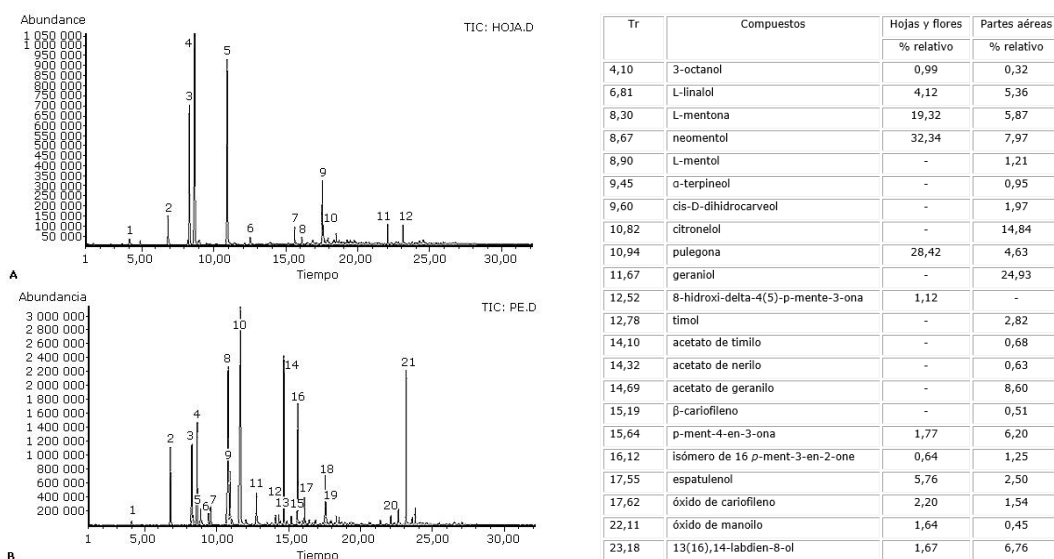


Figura 3. Cromatograma gaseoso de los aceites esenciales de *Minthostachys mollis* Griseb. A) Aceite esencial de hojas y flores. B) Aceite esencial de las partes aéreas. Composición química según el análisis por GC-MS

En la figura 4 se observa otro ejemplo de esta aplicación de Cromatografía de gases acoplado a un Espectrómetro de masas. Se trata del estudio de compuestos fitoquímicos en hojas de *Syzygium polyanthum* extraídas mediante el método asistido por ultrasonidos. Planta que folklóricamente es usada para dolores estomacales, diarreas, entre otros. En él se obtuvieron cromatogramas indicando la presencia de 21 compuestos para el medio con n-hexano, 27 compuestos para el medio etilacetato y 31 compuestos en metanol. Dentro de estos compuestos, 20 son compuestos bioactivos conocidos (García et al, 2010).

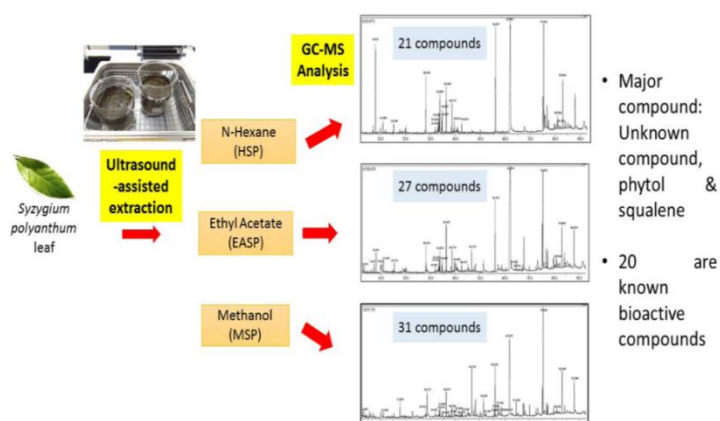


Figura 4. Compuestos fitoquímicos en hojas de *Syzygium polyanthum* extraídas mediante el método asistido por ultrasonido.

El ejemplo observado en la figura 5 muestra la composición fitoquímica, actividad antioxidante, análisis FT-IR y GC-MS de extractos de hojas de *Simarouba glauca*. Conocida como aceituno, se utiliza en casos de anemia, cólicos, diarrea, disentería, dispepsia, fiebre, malaria, mialgia y reumatismo. El análisis GC-MS confirmó la presencia de diez compuestos en el extracto de acetona y veintidós compuestos en el extracto de metanol. Algunos de estos compuestos exhiben actividades antioxidantes (Shettar y Hiremath, 2024).

Con respecto a las ventajas que presenta la GC-MS en el Análisis de Plantas Medicinales Yang et al (2019), mencionan: Alta resolución y eficiencia en la separación de compuestos volátiles y semivolátiles, Capacidad para identificar y cuantificar múltiples componentes en una sola corrida, Disponibilidad de extensas bibliotecas espectrales para la identificación de compuestos, Alta sensibilidad, especialmente en el modo SIM, Técnica relativamente robusta y bien establecida.

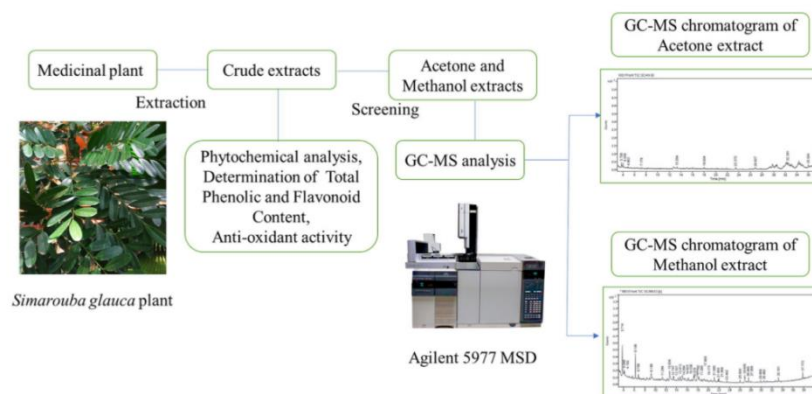


Figura 5. Composición fitoquímica, actividad antioxidante, análisis FT-IR y GC-MS de extractos de hojas de *Simarouba glauca*.

La tabla 1 exhibe información de algunas plantas medicinales de gran relevancia.

Tabla 1. Plantas medicinales más relevantes.

Nombre de la Planta	Tipo de Planta	Parte(s) Útil(es)	Usos Comunes
Aloe Vera (Sábila)	Suculenta	Hojas (gel y látex)	Quemaduras, irritaciones cutáneas, estreñimiento (látex), cicatrización, hidratación.
Manzanilla (<i>Matricaria chamomilla</i>)	Herbácea	Flores	Ansiedad, insomnio, problemas digestivos (cólicos, indigestión), inflamación.
Jengibre (<i>Zingiber officinale</i>)	Herbácea	Rizoma (raíz)	Náuseas (mareos, embarazo), indigestión, antiinflamatorio, resfriados y gripes.
Menta (<i>Mentha piperita</i>)	Herbácea	Hojas	Indigestión, síndrome del intestino irritable, náuseas, dolores de cabeza (tensión).
Lavanda (<i>Lavandula angustifolia</i>)	Arbusto	Flores y aceite esencial	Estrés, ansiedad, insomnio, relajante muscular, antiséptico.
Caléndula (<i>Calendula officinalis</i>)	Herbácea	Flores	Cicatrización de heridas, irritaciones cutáneas, inflamación, propiedades antisépticas.
Valeriana (<i>Valeriana officinalis</i>)	Herbácea	Raíz	Insomnio, ansiedad, nerviosismo.
Equinácea (<i>Echinacea purpurea</i>)	Herbácea	Raíz y partes aéreas	Fortalecimiento del sistema inmune, prevención y tratamiento de resfriados y gripes.
Hinojo (<i>Foeniculum vulgare</i>)	Herbácea	Semillas y bulbo	Problemas digestivos (gases, hinchazón), cólicos en bebés, estimulación de la lactancia.
Ginseng (<i>Panax ginseng</i>)	Herbácea perenne	Raíz	Aumento de energía, mejora de la concentración, reducción del estrés, apoyo inmunitario.

Desafíos de la GC-MS en el Análisis de Plantas Medicinales:

- ◆ Limitación a compuestos volátiles y semivolátiles, requiere derivatización para compuestos no volátiles (Yang *et al*, 2018).
- ◆ La complejidad de las matrices de extractos de plantas puede llevar a la presencia de interferencias (García *et al.*, 2019).



- ◆ La identificación de compuestos desconocidos puede ser un desafío y requiere experiencia en la interpretación de espectros de masas (Kind y Fiehn, 2017).
- ◆ La cuantificación precisa requiere el uso de estándares de referencia puros, que no siempre están disponibles para todos los compuestos de interés (Herrera *et al*, 2019).
- ◆ La preparación de la muestra puede ser laboriosa y crítica para la calidad de los resultados (Ríos *et al*, 2020).

Tendencias futuras

- ◆ Desarrollo de columnas cromatográficas más eficientes y selectivas (Fontana *et al*, 2020).
- ◆ Integración con técnicas de preparación de muestras más rápidas y automatizadas, como la microextracción en fase sólida - SPME (Vas y Vuckovic, 2015).
- ◆ Avances en la sensibilidad y resolución de los espectrómetros de masas, por ejemplo, GC-HRMS de alta resolución (Pico *et al*, 2020).
- ◆ Desarrollo de software más avanzado para el procesamiento y análisis de datos, incluyendo herramientas de quimiometría y aprendizaje automático para la identificación de patrones y la clasificación de muestras (Smith y Johnson, 2022).
- ◆ Mayor enfoque en el análisis metabolómico de plantas medicinales para comprender las complejas interacciones entre diferentes compuestos (Sarria. *et al*, 2021).

Conclusiones

GC-MS resulta una herramienta indispensable en la investigación de plantas medicinales, facilitando la identificación y cuantificación precisa de sus compuestos bioactivos, cruciales para comprender su actividad terapéutica. Su aplicación en el control de calidad garantiza la autenticidad y consistencia de los extractos y productos a base de plantas, promoviendo la seguridad y eficacia. De cara al futuro, la GC-MS continúa siendo



fundamental en la fitoquímica, impulsando el descubrimiento de nuevos fármacos a través del análisis detallado de metabolitos secundarios y abriendo caminos para investigaciones más profundas en la comprensión del potencial medicinal del reino vegetal.

Referencias

- Campo M., Ambuludi D., Cepeda N., Márquez I., Martín D. y Cuesta O., (2019). *Composición química y actividad antibacteriana del aceite esencial de *Minthostechys mollis* Griseb contra el *Staphylococcus aureus**. Universidad Técnica de Machala. Ecuador.
- Contreras B., Rojas J., Celis M., Rojas L., Mendez L. y Landrum L., (2014). Componentes volátiles de las hojas de pimienta racemosa var. racemosa (Mill) J. W. Moore (Myrtaceae) de Táchira - Venezuela. *Boletín Latinoamericano y del Caribe de Plantas Medicinales y Aromáticas*, 13(3):305-310.
- Fontana F., Periat A. y Fabbri, D., (2020). New trends in GC column technology. *Journal of Separation Science*, 43(1), 1-13.
- García C., Martínez A., Ortega J. y Castro F., (2010). Componentes químicos y su relación con las actividades biológicas de algunos extractos vegetales. *Revista Química Viva*, 2 (9), 86-96.
- García I. y Barbas C., (2019). *Metabolomics for the analysis of medicinal plants: Methodological aspects and applications*. *Molecules*, 24(21), 3848.
- Gutiérrez Y., Miranda M., Bello A., Verona S. y Montes R., (2011). Caracterización química por Cromatografía de Gases/Espectrometría de Masas de dos extractos obtenidos de *Phyllanthus orbicularis* HBK. *Revista cubana de farmacia*, 45(3):405-413.
- Herrera L., Machuca J. y Vera B., (2019). Quality control of medicinal plants and herbal products: Current challenges and future perspectives. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 172, 403-413.
- Kind T. y Fiehn O., (2017). *Metabolite Identification: An Introduction to the Art and Science of Metabolomics*. Wiley.
- Marchese A., Argenziano R. y Daglia M., (2018). Role of analytical chemistry in the authentication and quality control of medicinal plants. *Analytical Methods*, 10(19), 2187-2200.



- Paech K., y Tracey M., (2012). *Modern Methods of Plant Analysis/Moderne Methoden der Pfl anzenanalyse*. Springer Berlin Heidelberg.
- Pico Y., Alfarhan A. y Barceló D., (2020). How recent innovations in gas chromatography-mass spectrometry have improved pesticide residue determination: An alternative technique to be in your radar. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 122, 115720.
- Ricaldi J., (2014). Cromatografía de Gases/Espectrometría de Masas de compuestos fitobioactivos del aceite esencial de Satureja incana. *Apunt. Cienc. Soc.* 4(2). <http://dx.doi.org/10.18259/acs.20144033>.
- Ríos A., Zúñiga C. y González M., (2020). Recent advances in sample preparation for the analysis of bioactive compounds in medicinal plants. *Current Opinion in Food Science*, 32, 1-7.
- Sarria R., Gallo J. & Urbano F., (2021). Caracterización de los aceites esenciales del Pinus oocarpa por Cromatografía de Gases-Espectrometría de Masas (Gc-Ms). *Rev.EIA.Esc.Ing.Antioq* 18 (35).
- Sarria-Villa, R.A.; Gallo-Corredor, J.A.; Urbano, F. (2021). Caracterización de los Aceites Esenciales del Pinus oocarpa por Cromatografía de GasesEspectrometría De Masas (Gc-Ms) Aceites Esenciales by Gc-Ms. *Revista EIA*, 18(35), Reia35016. 1-11. <https://doi.org/10.24050/reia.v18i35.1341>
- Shettar, PS, y Hiremath, MB (2024). Análisis de cromatografía de gases-espectrometría de masas (GC-MS) y actividad antioxidante de compuestos bioactivos de extractos de hojas de Simarouba glauca . *Natural Product Research* , 1–10. <https://doi.org/10.1080/14786419.2024.2344737>.
- Smith, J., & Johnson, L. (2022). *Chemometrics and Machine Learning in Analytical Chemistry*. Academic Press.
- Vas G. & Vuckovic D., (2015). Recent developments and applications of solid phase microextraction (SPME) in food and environmental analysis A review. *Molecules*, 20(3), 293-314.
- Yang R., Yang J., Ding J., Yang J., Tang J. & Li R., (2018). Derivatization strategies for GC-MS analysis of non-volatile and semi-volatile compounds. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 102, 198-212.



Yang W., Li C., Li S. & Li H., (2019). Analytical techniques for quality control of herbal medicines: An overview. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 169, 322-337.