

## Análisis multivariable y variabilidad química de los metabolitos volátiles presentes en las partes aéreas y la resina de *Bursera graveolens* (Kunth) Triana & Planch. de Soledad (Atlántico, Colombia)

[Multivariate analysis and chemical variability of the volatile metabolites present in the aerial parts and the resin of *Bursera graveolens* (Kunth) Triana & Planch from Soledad (Atlántico, Colombia)]

Amner MUÑOZ-ACEVEDO<sup>1</sup>, Adriana SERRANO-URIBE<sup>2</sup>, Ximena J. PARRA-NAVAS<sup>2</sup>,  
Luz Andrea OLIVARES-ESCOBAR<sup>2</sup> & Mónica E. NIÑO-PORRAS<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Facultad de Química y Farmacia, Universidad del Atlántico  
Barranquilla, Colombia.

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

### Abstract

The aim of this study was to determine the chemical compositions of the volatile fractions from the immature fruits, leaves, branches, stem bark and resin of *Bursera graveolens* (Kunth) Triana & Planch. by SDE-GC/MS and their relationship through the multivariate statistical analysis. The most abundant constituents found in the volatile fractions were: (a). Fruits – 3-hydroxy-mint furanone (6.7%), mint furanone (6.4%), carvone (5.3%), limonene (4.2%), *trans*-carveol (4.1), limonene-1,2-diol (3.8%), limonene dioxide derivative (3.7%), 2-hydroperoxide-2S,4R-*p*-mentha-6,8-diene (3.4%) and caryophyllene oxide (3.0%); (b). Leaves – germacrene D (20.7%),  $\beta$ -caryophyllene (18.0%), viridiflorol (8.0%), limonene (6.6%), linalool (6.5%) and dendrolasin (5.3%); (c). Branches – mint furanone (43.9%), *iso*-mint furanone (6.8%), 3-hydroxy mint furanone (6.2%); (d.) Stem bark – mint furanone (44.6%), 3-hydroxy-mint furanone (16.2%), *iso*-mint furanone (6.4%); and, (e.) Resin – limonene (23.2%), mint furanone (15.9%), mint furanone derivative (14.8%), pulegone (12.1%), 3-hydroxy-mint furanone (8.6%), and menthofuran (6.2%). The principal component analysis (70% of related information) and cluster analysis applied to the data allowed to find 3 groups: I. – fruits; II. – leaves; and, III. – resin, stem bark and branches; the latter group showed a close compositional relationship. Thus, the volatile fractions in the branches and stem bark were represented by benzofuranoids compounds (60-69%); in the leaves by sesquiterpenoids (60%); in the fruits by monoterpenoids (54%); and, in the resin by benzofuranoids (48%) and monoterpenoids (42%).

**Keywords:** *Bursera graveolens*, Caraña, volatil fractions, benzofuranoids, SDE-GC/MS, PCA, CA.

### Resumen

El objetivo de este estudio fue determinar las composiciones químicas de las fracciones volátiles de los frutos inmaduros, hojas, ramas, corteza del tallo y resina de *Bursera graveolens* (Kunth) Triana & Planch. mediante SDE-GC/MS y su relación a través de análisis estadístico multivariable. Los constituyentes más abundantes encontrados en las fracciones volátiles fueron: (a). Frutos – 3-hidroxi-mentofuranona (6.7%), mentofuranona (6.4%), carvona (5.3%), limoneno (4.2%), *trans*-carveol (4.1%), limoneno-1,2-diol (3.8%), derivado de dióxido de limoneno (3.7%), 2-hidroperóxido-2S,4R-*p*-menta-6,8-dieno (3.4%) y óxido de cariofileno (3.0%); (b). Hojas – germacreno D (20.7%), *trans*- $\beta$ -cariofileno (18.0%), viridiflorol (8.0%), limoneno (6.6%), linalol (6.5%) y dendrolasina (5.3%); (c). Ramas – mentofuranona (43.9%), *iso*-mentofuranona (6.8%), 3-hidroxi-mentofuranona (6.2%); (d.) Corteza del tallo – mentofuranona (44.6%), 3-hidroxi-mentofuranona (16.2%), *iso*-mentofuranona (6.4%); y, (e.) Resina – limoneno (23.2%), mentofuranona (15.9%), mentofuranona derivado (14.8%), pulegona (12.1%), 3-hidroxi-mentofuranona (8.6%) y mentofurano (6.2%). El análisis de componentes principales (70% de información relacionada) y de conglomerado, aplicado a los datos permitió encontrar 3 grupos: I. – frutos; II. – hojas; y, III. – resina, corteza del tallo y ramas; este último grupo mostró estrecha relación composicional. Así, las fracciones volátiles estuvieron representadas por compuestos benzofuranoides (60-69%) en las ramas y corteza del tallo; por sesquiterpenoides (60%) en las hojas; por monoterpenoides (54%) en los frutos; y, por benzofuranoides (48%) y monoterpenoides (42%) en la resina.

**Palabras Clave:** *Bursera graveolens*, Caraña, fracciones volátiles, benzofuranoides, SDE-GC/MS, PCA, CA.

Recibido | Received: 30 de Mayo de 2012.

Aceptado en versión corregida | Accepted in revised form: 16 de Marzo de 2013.

Publicado en línea | Published online: 30 de Mayo de 2013.

Declaración de intereses | Declaration of interests: Los autores agradecen a la División de Ciencias Básicas de la Universidad del Norte por su apoyo financiero. A.M.-A. agradece a Colciencias por su apoyo económico a través de beca doctoral.

Este artículo puede ser citado como / This article must be cited as: A MuñozAcevedo, A Serrano-Uribe, XJ Parra-Navas, LA Olivares-Escobar, ME Niño-Porras. 2013. Análisis multivariable y variabilidad química de los metabolitos volátiles presentes en las partes aéreas y la resina de *Bursera graveolens* (Kunth) Triana & Planch. de Soledad (Atlántico, Colombia). *Bol Latinoam Caribe Plant Med Aromat* 12(3): 322 – 337.

**Lista de abreviaciones:** SDE – destilación-extracción simultánea con solvente; GC-MS – cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas; TIC – *total ion current* (corrientes iónicas totales reconstruidas); *ca.* – aproximadamente; @ – gradiente de temperatura;  $I_R$  – índice de retención con programación lineal de temperatura; IPB – ion pico de base; PCA – análisis de componentes principales; CA – análisis de *cluster* o conglomerados; NMR – resonancia magnética nuclear; IR – infrarrojo; HPLC – cromatografía líquida de alta eficiencia.

## INTRODUCCIÓN

Las plantas pertenecientes a la familia *Burseraceae* son arbustos o árboles deciduos que poseen en la mayoría de sus órganos sustancias resinosas. En América se encuentran distribuidos 8 géneros, 6 de los cuales son endémicos e incluye a *Bursera* con 4 especies; una de ellas es *Bursera graveolens* (Cuatrecasas, 1957). En Colombia esta especie se conoce como Caraño, Caraña, Bijá, Oloroso, Sasafrás, Palo Santo o Tatamaco (García, 1975). En otros países latinoamericanos se le denomina Caragana (Bolivia), Caraño (Nicaragua), Copalillo (Honduras), Sasafrás (Cuba), Crispín y Huacor (Perú) (Duke et al., 2009; Grandtner, 2005).

La especie *Bursera graveolens* (Kunth) Triana & Planch. (*Burseraceae*) es un árbol (3-15 m) con ramos y corteza de color marrón-rojiza, con hojas alternas agrupadas en las puntas de sus ramas y con flores unisexuales; sus frutos son subglobosos u ovoide bivalvo. Abunda en los bosques secos desde México hasta Perú (García, 1975; McMullen, 1999). La planta se caracteriza por poseer una resina fragante con un olor fuerte agradable y es considerada uno de los árboles promisorios de los Países del Convenio Andrés Bello (Correa y Bernal, 1990; Gupta, 1995). Sin embargo, esta especie está incluida en el libro rojo de plantas de Colombia, de especies maderables amenazadas. Aunque, la especie no está en peligro crítico, se categorizó como especie casi amenazada, por su condición de maderable y a la presión antrópica a la que podría estar sometida (Cárdenas y Salinas, 2007).

Las diferentes partes de la especie, *e.g.*, hojas, tallos y resina, se han empleado en medicina tradicional (Perú, Costa Rica, Nicaragua, Guatemala, Cuba, Colombia), en diferentes formas (humos, infusiones, cataplasmas, compresas), como cicatrizante, abortivo, antiinflamatorio, antitumoral,

analgésico, antidiarreico, depurativo, diaforético, expectorante, insecticida, repelente de mosquitos, para el tratamiento de anemia, reumatismo, dermatitis, asma y cólicos (Soukup, 1970; García, 1975; Correa y Bernal, 1990; Álvarez, 1991; Gupta, 1995; Robles et al., 2005; Nakanishi et al., 2005; Sánchez et al., 2006; Tene et al., 2007; Duke et al., 2009; Alonso-Castro et al., 2011).

Por su parte, la aplicación de técnicas multivariadas, que incluyen los análisis de componentes principales (PCA) y *cluster* o conglomerados (CA), son herramientas útiles para clasificar y relacionar variables. El PCA reduce la dimensionalidad de variables aleatorias usando combinaciones lineales, así los componentes principales identificados se organizan en orden decreciente de importancia (Gardiner, 1997). El CA clasifica “individuos” de acuerdo con la matriz de datos multivariable de un gran número de individuos (u objetos), construyendo subgrupos o conglomerados de “individuos” según su “similitud”, con base en algunos criterios apropiados (Härdler, 2003).

El propósito de este trabajo fue determinar los constituyentes responsables de las fracciones volátiles de los frutos inmaduros, hojas, ramas, corteza del tallo y resina, en estado fresco, de *Bursera graveolens* recolectada en el municipio de Soledad (Atlántico), puesto que en la literatura científica no existen reportes sobre la química de las fracciones volátiles de los frutos inmaduros, hojas y resina. Además, diferenciar detalladamente la composición entre las partes maderables (ramas y corteza) puesto que los reportes científicos encontrados no lo hacen. Finalmente, mediante técnicas estadísticas multivariadas encontrar similitudes o diferencias composicionales entre las partes estudiadas.

Para llevar a cabo el análisis composicional se obtuvieron los metabolitos secundarios volátiles de las partes aéreas y resina, de *B. graveolens*, mediante destilación-extracción simultánea con solvente (SDE). La separación y el reconocimiento estructural de los componentes se efectuaron por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS) junto con los índices de retención ( $I_R$ ) con programación lineal de temperatura calculados. Posteriormente, el conjunto de datos, conformado por 5 extractos SDE (casos) y 103 componentes (variables), se sometieron a PCA y análisis de conglomerados como herramientas de análisis estadístico multivariable.

## MATERIALES Y MÉTODOS

### Reactivos

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

### Material vegetal

Las muestras (en estado fresco) de frutos inmaduros, hojas, ramas, corteza del tallo y resina de *Bursera graveolens* (Kunth) Triana & Planch. se recolectaron en agosto de 2011 (época de lluvia) en el municipio de Soledad (Atlántico), a una altura de 5 msnm, longitud: 74° 47' Oeste y latitud: 10° 56' Norte. La identificación taxonómica (N°. COL560956) fue realizada en el Herbario Nacional Colombiano del Instituto de Ciencias Naturales de la Universidad Nacional de Colombia por C.A. Vargas.

### 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 µL del extracto se inyectaron directamente al GC-MS.

### Cromatografía de gases-espectrometría de masas.

Los extractos se analizaron en un cromatógrafo de gases *Agilent Technologies* 7890A acoplado a un detector selectivo de masas *Agilent Technologies* 5975C, con inyector *split/splitless* (relación *split* 1:10) y columna HP-1MS (30 m x 0.25 mm D.I. x 0.25 µm df) con fase estacionaria 100%-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 (70 eV) en un analizador cuadrupolar con rango de masas *m/z* 40-400, en el modo *full scan*. Las temperaturas de la cámara de ionización y de la línea de transferencia se mantuvieron en 230 y 285 °C, respectivamente. Los datos cromatográficos y espectroscópicos se procesaron con el *software* de *Agilent Technologies* MSD *ChemStation* G1701 (Versión EA E.02.02.1431).

Los índices de retención fueron obtenidos a partir de los datos de una serie homóloga de

hidrocarburos alifáticos saturados entre C<sub>7</sub>-C<sub>35</sub>; todos los extractos fueron analizados en las mismas condiciones. La identificación de los componentes fue realizada por comparación de los espectros de masas con las bases de datos NIST02 y Wiley8 y por comparación de los índices de retención reportados en la literatura (Joulian and König, 1998; Adams, 2004; NIST, 2011/2012).

### Análisis estadístico multivariable

Los análisis de componentes principales (PCA) y de *Cluster* o conglomerados (CA) se realizaron con el *software* Statistica Ver. 6.0 (StatSoft, Inc., 2001, Tulsa, OK, EE.UU.). A partir de los datos, se construyeron las gráficas de componentes principales y de árbol jerárquico vertical (dendograma), basados en la diagonalización simétrica de la matriz (correlaciones) y el porcentaje de discrepancia junto con el método de Ward (Izenman, 2008), respectivamente.

## RESULTADOS

### Análisis composicional de las fracciones volátiles de los frutos inmaduros, hojas, ramas, corteza del tallo y resina de *Bursera graveolens* (Kunth) Triana & Planch

En los extractos SDE de los frutillos, hojas, ramas, corteza del tallo y resina de *Bursera graveolens* se identificaron positivamente por GC-MS, 19-38 compuestos (cantidades relativas > 0.4%). Éstos correspondieron ca. 74-98% del total de los extractos.

Las composiciones completas de los extractos SDE de las partes estudiadas, sus cantidades relativas, los I<sub>R</sub> apolares calculados y los reportados en la literatura están contenidas en la Tabla N° 1. Las corrientes iónicas totales reconstruidas (TIC) de las fracciones volátiles obtenidas por SDE/GC-MS de las partes aéreas y resina de *B. graveolens* se ilustran en la Figura N° 1.

La fracción volátil de los frutos inmaduros estuvo compuesta por 3-hidroxi-mentofuranona (6.7%), mentofuranona (6.4%), carvona (5.3%), limoneno (4.2%), *trans*-carveol (4.1%), limonen-1,2-diol (3.8%), derivado de dióxido de limoneno (3.7%), 2-hidroperóxido-2S,4R-*p*-menta-6,8-dieno (3.4%), óxido de cariofileno (3.0%), 2-hidroperóxido-2R,4R-*p*-menta-6,8-dieno (2.9%), 1-hidroperóxido-1S,4R-*p*-menta-2,8-dieno (2.4%) y *trans*-óxido de limoneno (2.2%).

Tabla N° 1

Metabolitos secundarios obtenidos por SDE y analizados por GC-MS de las fracciones volátiles presentes en los frutos inmaduros, hojas, ramas, corteza del tallo y resina de *Bursera graveolens*.

Orden elución	Compuesto	I <sub>RS</sub>		Cantidad relativa, %				
		Calc. <sup>‡</sup>	Lit. <sup>*</sup>	Ft	Hj	Rm	CT	Rsn
1	3-Metil-ciclopentanona	816	848	tr	---	0.9	1.4	tr
2	3-Metil-ciclohexanona	919	928	---	---	tr	tr	---
3	1-(3-Etilciclobutil)-etanona**	962	---	tr	---	tr	---	0.8
4	Acetilciclohexano**	963	963	tr	---	tr	---	0.9
5	β-Mirceno	983	991	---	---	---	tr	0.7
6	Eucaliptol	1019	1031	1.2	tr	0.8	0.8	tr
<b>7</b>	<b>Limoneno</b>	<b>1021</b>	<b>1029</b>	<b>4.2</b>	<b>6.6</b>	<b>1.8</b>	<b>3.4</b>	<b>23.2</b>
8	<i>trans</i> -β-Ocimeno	1039	1050	---	0.5	---	---	---
<b>9</b>	<b>Linalol</b>	<b>1084</b>	<b>1097</b>	<b>0.9</b>	<b>6.5</b>	<b>tr</b>	<b>1.2</b>	<b>tr</b>
10	α-Cianotolueno	1088	1089	tr	0.6	---	---	---
11	Ácido 5-metil-1-ciclopenten-1-carboxílico	1090	---	tr	---	tr	1.2	---
12	<i>trans</i> -p-Menta-2,8-dien-1-ol	1103	1123	1.4	---	---	tr	tr
13	<i>cis</i> -p-Menta-2,8-dien-1-ol	1115	1138	1.2	---	---	tr	tr
14	<i>cis</i> -Óxido de limoneno	1116	1137	1.2	---	---	---	0.6
15	<i>trans</i> -Óxido de limoneno	1121	1142	2.2	---	---	---	0.5
16	NI (M <sup>+</sup> 152, m/z 79 (IPB), 136, 80, 93)	1136	---	0.7	---	---	---	---
<b>17</b>	<b>Mentofurano</b>	<b>1149</b>	<b>1164</b>	---	<b>0.8</b>	---	<b>tr</b>	<b>6.2</b>
18	<i>iso</i> -Pulegona	1150	1157	0.7	---	---	---	---
19	<i>p</i> -Acetiltolueno	1152	1165	0.8	---	tr	tr	---
20	Criptona	1155	1186	0.6	---	---	---	---
21	Terpinen-4-ol	1162	1177	0.6	---	0.6	---	---
22	<i>trans</i> -p-Menta-1(7),8-dien-2-ol	1169	1189	0.6	---	0.6	tr	tr
23	<i>cis</i> -Dihidrocarvona	1172	1193	0.6	---	0.5	tr	1
<b>24</b>	<b>α-Terpineol</b>	<b>1173</b>	<b>1189</b>	<b>1.4</b>	<b>3.1</b>	<b>1.9</b>	---	<b>0.6</b>
25	<i>trans</i> -Dihidrocarvona	1178	1201	---	---	---	---	0.8
26	Derivado de <i>p</i> -mentadienol (C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O M <sup>+</sup> 152, m/z 79 (IPB), 94, 121, 93)	1180	---	1.7	---	---	---	tr
27	Derivado de <i>p</i> -mentadienol (C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O M <sup>+</sup> 152, m/z 121 (IPB), 79, 93, 94)	1183	---	1.9	---	---	---	tr
28	Ácido 1-hidroxíciclohexanocarboxílico	1188	---	---	---	1.0	tr	---
29	4,7-Dimetilbenzofurano	1196	---	tr	---	tr	---	---
<b>30</b>	<b><i>trans</i>-Carveol</b>	<b>1196</b>	<b>1217</b>	<b>4.1</b>	<b>tr</b>	<b>0.6</b>	<b>1.8</b>	<b>0.7</b>
31	Compuesto oxigenado (C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> O, M <sup>+</sup> 148 (IPB), m/z 105)	1200	---	---	---	---	---	0.7
32	Monoterpeno oxigenado (M <sup>+</sup> NR, m/z 93 (IPB), 43, 109, 95)	1203	---	0.5	---	0.9	---	---
33	<i>neo-iso</i> -Dihidrocarveol	1208	1229	---	---	tr	0.5	---
34	Nerol	1209	1230	---	0.5	---	---	---
35	Monoterpeno oxigenado (M <sup>+</sup> NR, m/z 93 (IPB), 121, 91, 67)	1210	---	---	---	0.5	---	---
36	<i>cis</i> -Carveol	1211	1229	1.2	---	tr	---	tr
<b>37</b>	<b>Pulegona</b>	<b>1213</b>	<b>1237</b>	<b>1.7</b>	<b>tr</b>	<b>2.3</b>	---	<b>12.1</b>
<b>38</b>	<b>Carvona</b>	<b>1214</b>	<b>1243</b>	<b>5.3</b>	<b>tr</b>	<b>1.8</b>	<b>1.7</b>	---
39	Metil-timil-éter	1215	1235	---	tr	1.4	---	---
40	NI (M <sup>+</sup> NR, m/z 112 (IPB), 43, 69, 70)	1223	---	---	---	0.5	---	---
41	Geraniol	1234	1253	---	2.2	---	---	---
42	4,4-Dimetil-2-ciclopenten-1-ona**	1234	---	0.5	---	---	---	---
43	<i>iso</i> -Piperitenona**	1240	1266	0.6	---	---	---	tr
44	Perilaldehído	1244	1272	0.5	---	---	---	---
45	4-Hidroxi-3-metilacetofenona**	1246	---	tr	---	tr	0.6	---
46	Compuesto oxigenado (C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O, M <sup>+</sup> 154, m/z 43 (IPB), 136, 93, 91)	1249	---	0.6	---	---	---	---
<b>47</b>	<b>Indol</b>	<b>1251</b>	<b>1291</b>	---	<b>3.4</b>	---	---	---
<b>48</b>	<b>Derivado de dióxido de limoneno (C<sub>10</sub>H<sub>16</sub>O<sub>2</sub> M<sup>+</sup> 168, m/z 107 (IPB), 67, 55)</b>	<b>1254</b>	---	<b>3.7</b>	---	<b>0.9</b>	<b>1.0</b>	<b>1.3</b>
49	Cuminol	1262	1291	0.8	---	---	tr	---
50	Timol	1269	1290	---	---	---	0.6	---

51	Alcohol perílico**	1277	1295	0.8	---	tr	tr	---
52	NI (M <sup>+</sup> 164, <i>m/z</i> 43 (IPB), 58, 71, 84)	1281	---	0.7	---	---	---	---
53	1-Hidroperóxido-1S-4R- <i>p</i> -menta-2,8-dieno	1287	---	2.4	---	---	---	---
54	1-Hidroperóxido-1R-4R- <i>p</i> -menta-2,8-dieno	1300	---	1.7	---	---	---	---
55	<b>NI (M<sup>+</sup> 188, <i>m/z</i> 71 (IPB), 108, 43, 93)</b>	<b>1306</b>	---	<b>3.4</b>	---	<b>5.3</b>	<b>3.2</b>	---
56	Evodona	1307	1340	---	---	---	---	0.7
57	<b>Limonen-1,2-diol</b>	<b>1310</b>	<b>1321</b>	<b>3.8</b>	---	<b>2.0</b>	<b>3.2</b>	<b>1.0</b>
58	Derivado de dimetil-nonadien-2-ol	1311	---	1.8	---	---	---	---
59	<b>Derivado de mentofuranona (C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>O<sub>2</sub> M<sup>+</sup> 166, <i>m/z</i> 81 (IPB), 95, 123, 110)</b>	<b>1322</b>	---	---	---	<b>2.6</b>	<b>1.4</b>	<b>14.8</b>
60	Compuesto oxigenado (C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O, M <sup>+</sup> 170, <i>m/z</i> 81 (IPB), 67, 55)	1330	---	---	---	---	---	0.5
61	<b>Compuesto oxigenado (M<sup>+</sup> 188, <i>m/z</i> 135 (IPB), 93, 67, 68)</b>	<b>1331</b>	---	<b>4.2</b>	---	<b>6.2</b>	<b>5.1</b>	---
62	NI (M <sup>+</sup> NR, <i>m/z</i> 81 (IPB), 43)	1333	---	1.4	---	---	---	---
63	Acetato de <i>neo-iso</i> -dihidrocarvilo	1340	1359	---	---	2.4	0.7	---
64	<b>2-Hidroperóxido-2S,4R-<i>p</i>-menta-6,8-dieno**</b>	<b>1341</b>	---	<b>3.4</b>	---	---	---	---
65	NI (M <sup>+</sup> NR, <i>m/z</i> 43 (IPB), 111, 126, 81)	1351	---	---	---	tr	0.6	---
66	NI (M <sup>+</sup> 178, <i>m/z</i> 43 (IPB), 108, 126, 95)	---	---	0.7	---	---	---	---
67	2-Hidroperóxido-2R,4R- <i>p</i> -menta-6,8-dieno**	1356	---	2.9	---	---	---	---
68	Compuesto oxigenado (C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O, M <sup>+</sup> NR, <i>m/z</i> 111 (IPB), 126, 69, 71)	1362	---	---	---	---	---	0.6
69	Derivado alquílico de tetrahydro-2H-piran-2-ona	1363	---	---	---	0.5	tr	---
70	<i>trans</i> -Jasmona	1366	1391	---	1.3	---	---	---
71	NI (M <sup>+</sup> NR, <i>m/z</i> 121 (IPB), 93, 43, 95)	1373	---	---	---	1.1	---	---
72	NI (M <sup>+</sup> NR, <i>m/z</i> 121 (IPB), 93, 43, 95)	1376	---	---	---	0.8	---	---
73	NI (M <sup>+</sup> 180, <i>m/z</i> 95 (IPB), 43, 59, 110)	1380	---	0.5	---	---	---	---
74	β-Bourboneno	1384	1388	tr	1.5	---	---	---
75	β-Elemento	1388	1391	---	0.8	---	---	---
76	Compuesto oxigenado (M <sup>+</sup> NR, <i>m/z</i> 109 (IPB), 43, 71, 137)	1411	---	0.6	---	---	---	---
77	Benzoato de 2-metilbutilo	1412	1441	---	0.8	---	---	---
78	<b><i>trans</i>-β-Cariofileno</b>	<b>1419</b>	<b>1419</b>	---	<b>18.0</b>	---	---	---
79	β-Copaeno	1428	1432	---	1.0	---	---	---
80	α-Humuleno	1452	1455	---	0.9	---	---	---
81	<b>Mentofuranona</b>	<b>1461</b>	<b>1472<sup>‡</sup></b>	<b>6.4</b>	<b>1.4</b>	<b>43.9</b>	<b>44.6</b>	<b>15.9</b>
82	NI (M <sup>+</sup> NR, <i>m/z</i> 126 (IPB), 69, 98, 41)	1466	---	---	---	tr	1.6	---
83	γ-Muuroleno	1471	1480	0.6	tr	---	---	---
84	<b>Germacreno D</b>	<b>1477</b>	<b>1485</b>	---	<b>20.7</b>	---	---	---
85	<b><i>iso</i>-Mentofuranona</b>	<b>1489</b>	---	<b>0.9</b>	<b>tr</b>	<b>6.8</b>	<b>6.4</b>	<b>2.3</b>
86	Biciclogermacreno	1492	1500	---	0.8	---	---	---
87	α-Muuroleno	1494	1500	---	0.5	---	---	---
88	<i>trans</i> -, <i>trans</i> -α-Farneseno	1496	1506	---	---	---	---	0.5
89	<b>3-Hidroxi-mentofuranona</b>	<b>1506</b>	---	<b>6.7</b>	---	<b>6.2</b>	<b>16.2</b>	<b>8.6</b>
90	δ-Cadineno	1515	1523	---	1.0	---	---	---
91	<b>Benzoato de <i>cis</i>-3-hexenilo</b>	<b>1543</b>	<b>1567</b>	---	<b>3.1</b>	---	---	---
92	<i>trans</i> -Nerolidol	1548	1563	---	1.1	---	---	---
93	<b>Dendrolasina**</b>	<b>1568</b>	<b>1572</b>	---	<b>5.3</b>	---	---	---
94	<b>Óxido de cariofileno</b>	<b>1572</b>	<b>1583</b>	<b>3.0</b>	<b>1.3</b>	---	<b>1.4</b>	<b>0.5</b>
95	<b>Viridiflorol</b>	<b>1582</b>	<b>1593</b>	<b>0.5</b>	<b>8.0</b>	---	---	---
96	τ-Cadinol	1625	1640	---	0.6	---	---	---
97	τ-Muurolol	1626	1642	---	1.0	---	---	---
98	δ-Cadinol	1629	1646	---	tr	---	0.5	---
99	α-Cadinol	1638	1654	---	2.5	---	---	---
100	Sesquiterpeno oxigenado (M <sup>+</sup> 220, <i>m/z</i> 91 (IPB), 93, 79, 41)	1654	---	0.7	---	---	---	---
101	Eudesma-4(15),7-dien-1-β-ol**	1667	1688	---	0.8	---	---	---
102	Benzoato de bencilo	1722	1760	---	1.0	---	---	---
103	Benzoato de fenetilo	1811	1841	---	0.5	---	---	---
<b>Total</b>				<b>88.5</b>	<b>98.1</b>	<b>94.8</b>	<b>99.1</b>	<b>95.5</b>

‡ Calculados en columna HP-1MS; \* Índices de retención reportados en la literatura; † Índice de retención de la literatura en columna HP-1 (Young *et al.*, 2007); Ft – Extracto SDE de frutos inmaduros, Hj – Extracto SDE de hojas; Rm – Extracto SDE de ramas; CT – Extracto SDE de corteza del tallo; Rsn – Extracto SDE de la resina; \*\* Identificación tentativa; tr. Cantidad relativa < 0.4%; NI – No identificado; IPB – ión pico de base.

En las hojas se reconocieron a germacreno D (20.7%), *trans*- $\beta$ -cariofileno (18.0%), viridiflorol (8.0%), limoneno (6.6%), linalol (6.5%), dendrolasina (5.3%), indol (3.4%), benzoato de *cis*-3-hexenilo (3.1%) y  $\alpha$ -terpineol (3.1%), como los responsables del perfil volátil.

Mentofuranona (43.9%), *iso*-mentofuranona (6.8%), 3-hidroxi-mentofuranona (6.2%), derivado de mentofuranona (2.6%), pulegona (2.3%),  $\alpha$ -terpineol (1.9%), carvona (1.8%) y limoneno (1.8%) constituyeron los volátiles mayoritarios de las ramas.

La corteza del tallo estuvo caracterizada por mentofuranona (44.6%), 3-hidroxi-mentofuranona (16.2%), *iso*-mentofuranona (6.4%), limoneno (3.4%), limonen-1,2-diol (3.2%), *trans*-carveol (1.8%), carvona (1.7%) y derivado de mentofuranona (1.4%).

Finalmente, los volátiles de la resina fueron el limoneno (23.2%), mentofuranona (15.9%), mentofuranona derivado (14.8%), pulegona (12.1%), 3-hidroxi-mentofuranona (8.6%), mentofurano (6.2%) e *iso*-mentofuranona (2.3%).

La Figura N° 2 muestra la distribución por familias de compuestos, con base en su funcionalidad química, de los constituyentes presentes en los extractos SDE. Así, los frutos estuvieron representados por: alcoholes monoterpénicos monocíclicos (18.7%), hidroperóxidos monoterpénicos monocíclicos (10.4%), cetonas monoterpénicas monocíclicas (9.5%), ésteres monoterpénicos bicíclicos (7.3%) y alcoholes-ésteres monoterpénicos bicíclicos (6.7%), correspondientes al 52.6% del total. Sin embargo, a un número de compuesto (17.7%) no se les pudo establecer positivamente sus estructuras.

Las hojas estuvieron constituidas por hidrocarburos sesquiterpénicos monocíclicos (40.4%), alcoholes monoterpénicos acíclicos (9.2%), alcoholes

sesquiterpénicos tricíclicos (8.0%) e hidrocarburos monoterpénicos monocíclicos (6.6%), siendo un 64.2% del total.

Las ramas estuvieron formadas por ésteres monoterpénicos bicíclicos (53.3%), alcoholes-ésteres monoterpénicos bicíclicos (6.2%), alcoholes monoterpénicos monocíclicos (5.9%) y cetonas monoterpénicas monocíclicas (4.6%), aportando al total en un 70%. También, existió un número de compuesto (16.1%) que no se les pudo establecer sus estructuras inequívocamente.

La corteza del tallo estuvo integrada por ésteres monoterpénicos bicíclicos (52.4%), alcoholes-ésteres monoterpénicos bicíclicos (16.2%) y alcoholes monoterpénicos monocíclicos (5.5%), contribuyendo al 74.1% del total. Asimismo, existieron compuestos sin identificar irrefutablemente (11.5%).

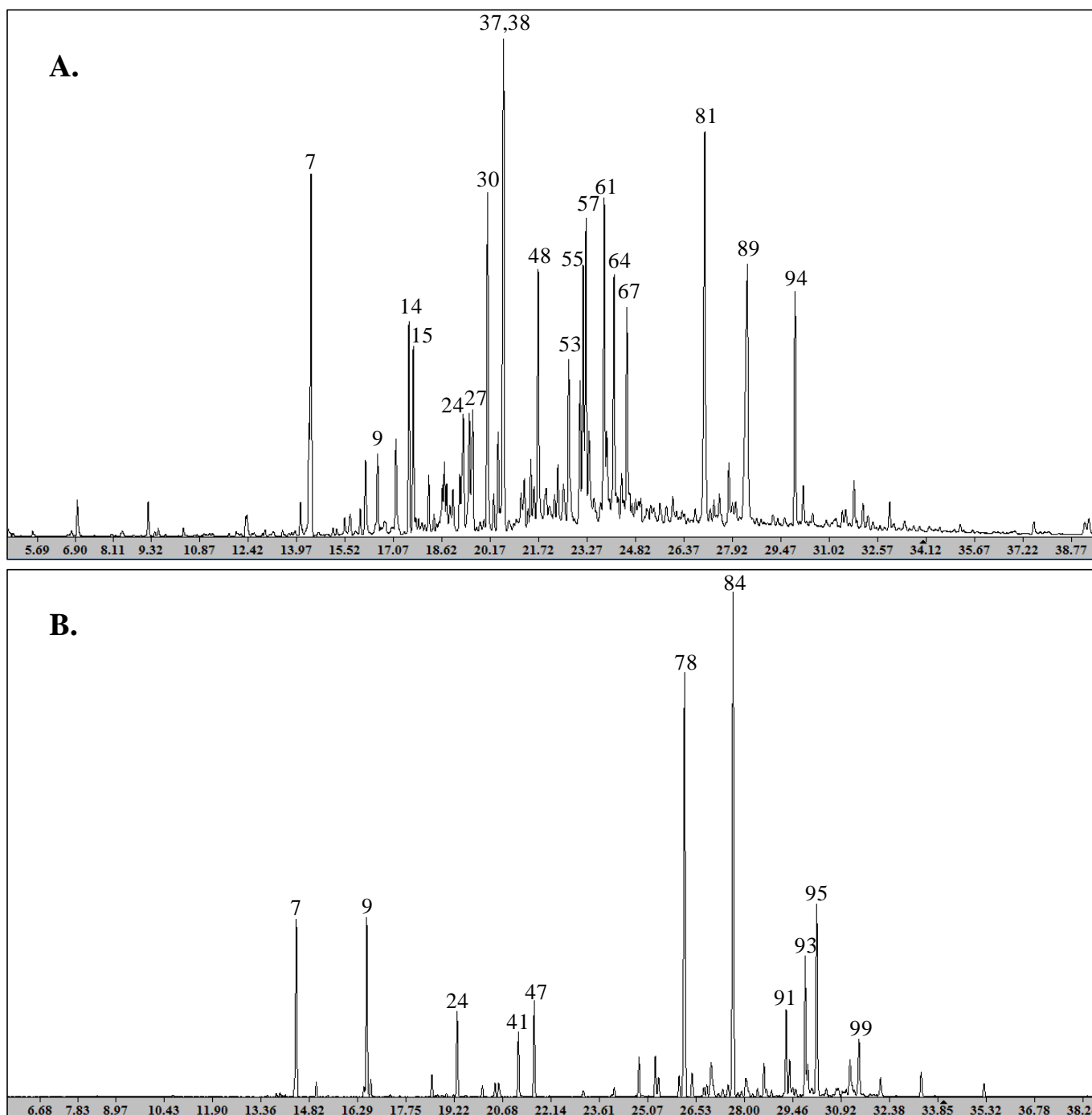
Finalmente, la resina estuvo conformada por ésteres monoterpénicos bicíclicos (33.0%), hidrocarburos monoterpénicos monocíclicos (23.2%), cetonas monoterpénicas monocíclicas (13.9%) y alcoholes-ésteres monoterpénicos bicíclicos (8.6%), sumando el 78.7% del total.

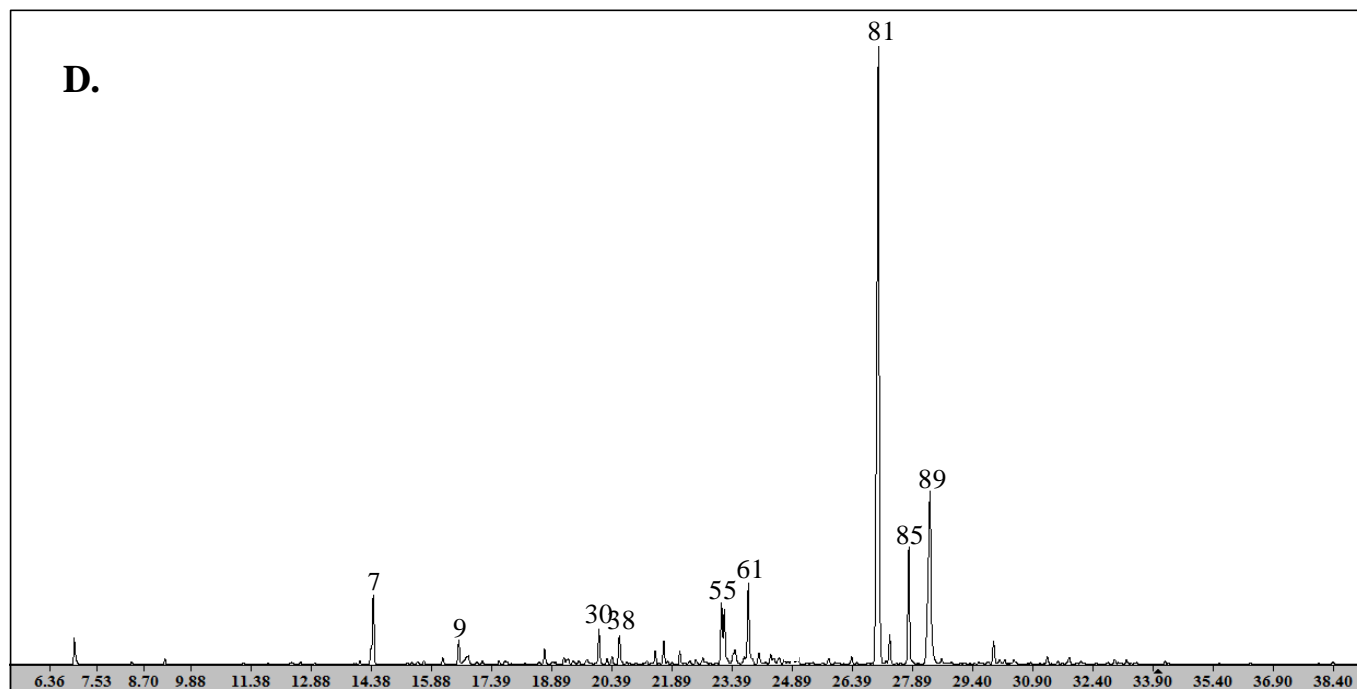
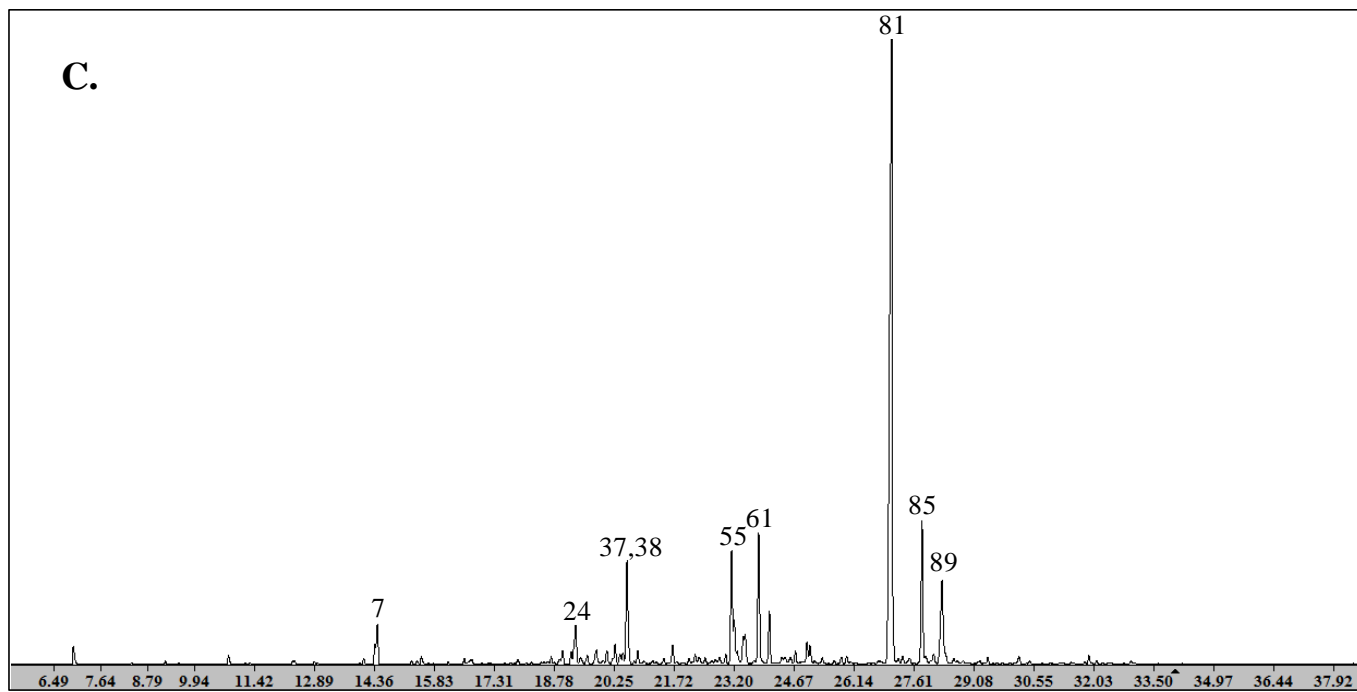
#### ***Análisis de componentes principales y de conglomerados de las fracciones volátiles de las partes aéreas y resina de *Bursera graveolens* (Kunth) Triana & Planch.***

La representación gráfica de los casos, que contiene el ca. 70% de la información de las variables (Figura N° 3), mostró que existen tres grupos: I – Frutos, II – Hojas y III – Ramas, Corteza y Resina. Sin embargo, la discriminación de estos agrupamientos es significativa pero no concluyente por no incluir toda la información de las variables (< 90-95%).

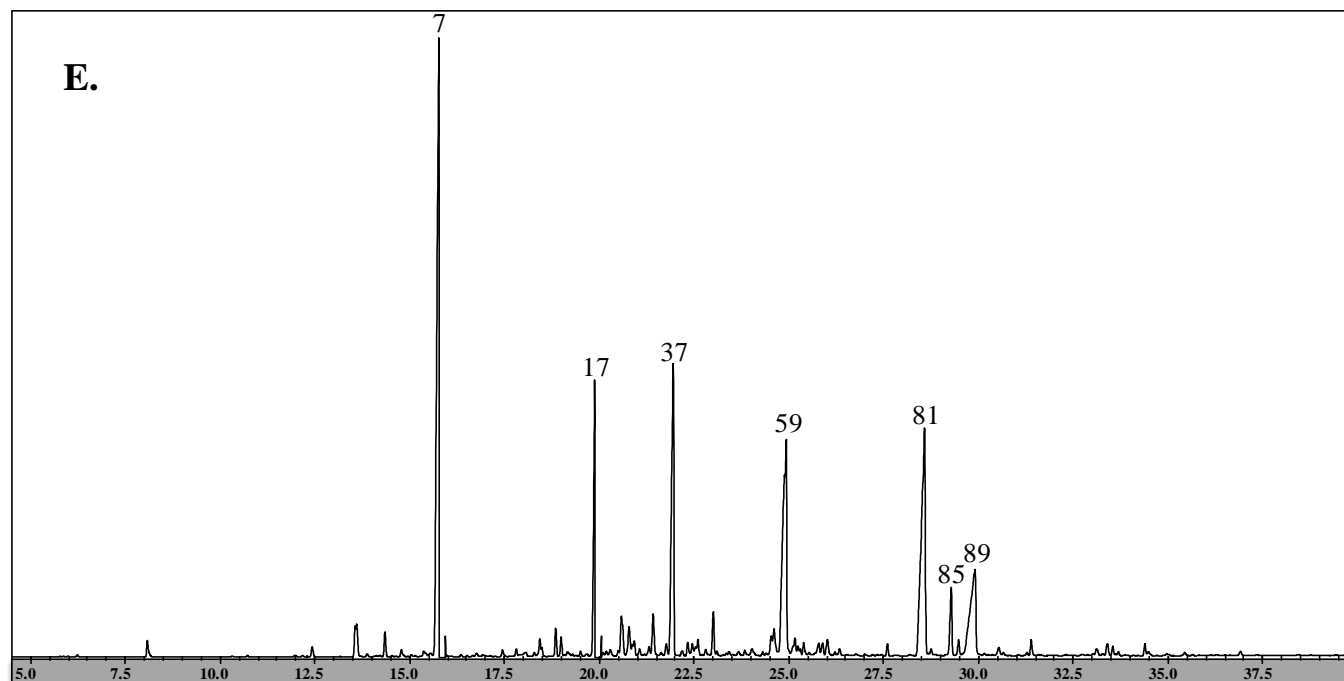
Figura N° 1

Corrientes iónicas totales reconstruidas (TIC) obtenidas por GC-MS de las fracciones volátiles aisladas por SDE de A. Frutos inmaduros, B. Hojas, C. Ramas, D. Corteza del tallo y E. Resina, de *Bursera graveolens*.









**La enumeración de los picos de las TIC se asignó de acuerdo con la elución de los componentes identificados en la Tabla 1.**

Por esta razón, adicionalmente, se utilizó el análisis de conglomerados y su representación como dendograma y análisis de K-medias, para relacionar y discriminar por similitudes o diferencias entre las variables (componentes). La Figura N° 4 muestra el dendograma resultante del análisis aplicado sobre los extractos de frutos, hojas, ramas, corteza de los tallos y resina de *B. graveolens*. Se obtuvieron, asimismo, tres grupos: I – Frutos, II – Hojas y III – Ramas, Corteza y Resina.

### DISCUSIÓN

La discusión se realizó con base en los reportes encontrado sobre los aceites esenciales (AE) o extractos SDE/totales obtenidos de hojas y partes maderables de *Bursera graveolens*.

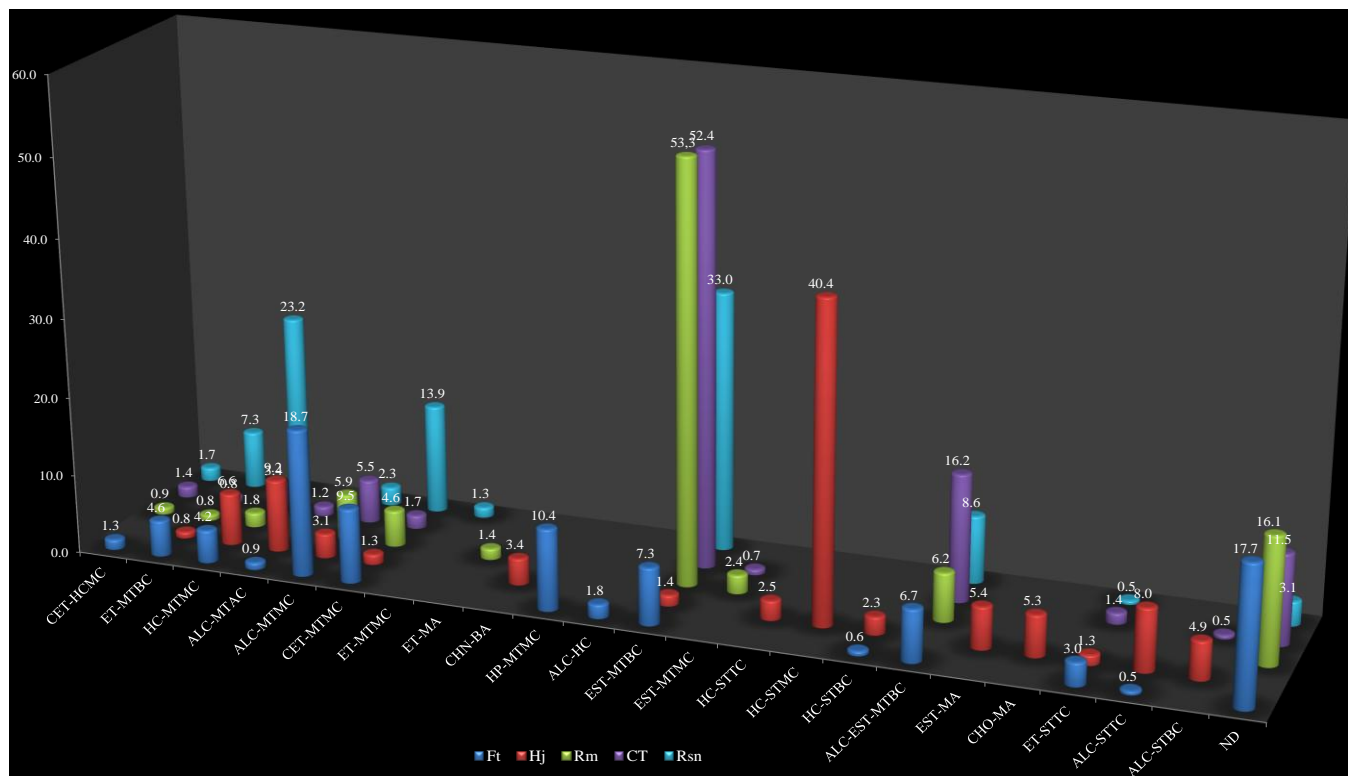
La fracción volátil determinada de las hojas, en este estudio estuvo constituida por sesquiterpenoides (59.7%), monoterpenoides (20.7%) y compuestos aromáticos (14.7%); siendo sus representantes el germacreno D y *trans*- $\beta$ -cariofileno (~18-21%), linalol y limoneno (~7%) y dendrolasina e indol (~3-5%), consecutivamente. Se resalta que dentro de los compuesto aromáticos se identificaron ésteres monoaromáticos (~7%). Los dos últimos

constituyentes mencionados junto con los ésteres monoaromáticos se reportan por primera vez, para las hojas de la especie. Al compararla con los reportes de literatura se encontraron diferencias entre componentes y cantidades relativas. Así, en las hojas de la especie estudiada en la zona oriente de Colombia se determinaron como constituyentes principales limoneno (48.3%), óxido de cariofileno (13.6%) y *trans*- $\beta$ -cariofileno (8.1%) (Leyva *et al.*, 2007). Y en las hojas de la especie de origen cubano se identificaron limoneno (30.7%), *trans*- $\beta$ -ocimeno (20.8%) y elemeno (11.3%) de acuerdo con Carmona *et al.* (2007). En estos dos estudios la familia de compuestos predominante fue tipo monoterpenoides, seguido por los sesquiterpenoides.

Para el caso de las ramas, los volátiles identificados estuvieron asociados principalmente a compuestos tipo benzofuranoides (59.5%) y monoterpenoides (17.8%); siendo sus representantes las mentofuranonas (~7-44%) y pulegona,  $\alpha$ -terpineol carvona y limoneno (~2%), respectivamente. Asimismo, los tipos de compuestos presentes en las ramas se hallaron en los volátiles de la corteza del tallo, difiriendo en sus cantidades relativas

Figura N° 2

Distribución por características estructurales terpénicas y funcionalidades químicas específicas de los constituyentes encontrados en los extractos SDE de frutos inmaduros, hojas, ramas, corteza del tallo y resina de *B. graveolens*.



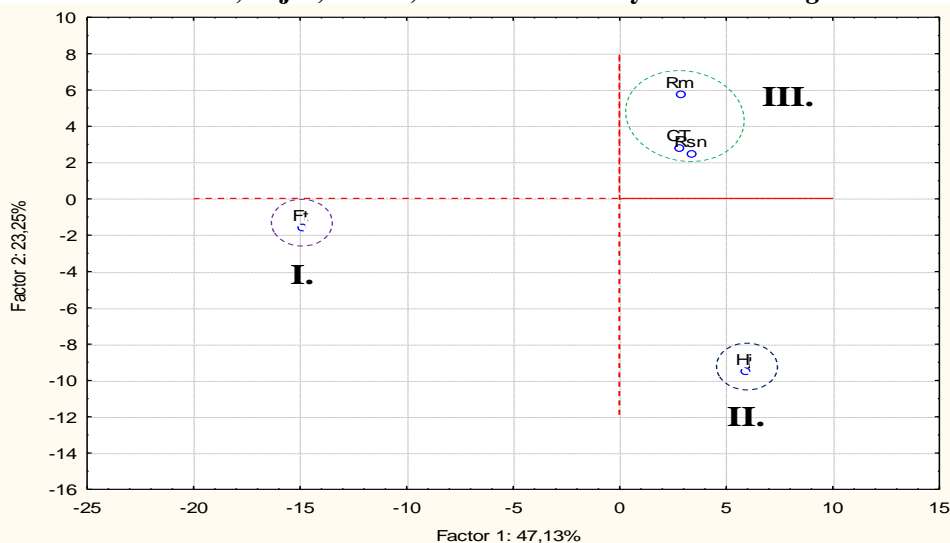
- Ft Extracto SDE de frutos inmaduros
- Hj Extracto SDE de hojas
- Rm Extracto SDE de ramas
- CT Extracto SDE de corteza de tallo
- Rsn Extracto SDE de resina
- CET-HCMC Cetonas hidrocarbonadas monocíclicas
- ET-MTBC Éteres monoterpénicos bicíclicos
- HC-MTMC Hidrocarburos monoterpénicos monocíclicos
- ALC-MTAC Alcoholes monoterpénicos acíclicos
- ALC-MTMC Alcoholes monoterpénicos monocíclicos
- CET-MTMC Cetonas monoterpénicas monocíclicas
- ET-MTMC Éteres monoterpénicos monocíclicos
- ET-MA Éteres monoaromáticos
- CHN-BA Compuestos heterocíclicos nitrogenados biaromáticos
- HP-MTMC Hidroperóxidos monoterpénicos monocíclicos
- ALC-HC Alcoholes hidrocarbonados
- EST-MTBC Ésteres monoterpénicos bicíclicos
- EST-MTMC Ésteres monoterpénicos monocíclicos
- HC-STTC Hidrocarburos sesquiterpénicos tricíclicos
- HC-STMC Hidrocarburos sesquiterpénicos monocíclicos
- HC-STBC Hidrocarburos sesquiterpénicos bicíclicos
- ALC-EST-MTBC Alcoholes ésteres monoterpénicos bicíclicos
- EST-MA Ésteres monoaromáticos
- CHO-MA Compuestos heterocíclicos oxigenados monoaromáticos
- ET-STTC Éteres sesquiterpénicos tricíclicos
- ALC-STTC Alcoholes sesquiterpénicos tricíclicos
- ALC-STBC Alcoholes sesquiterpénicos bicíclicos
- ND Estructuras no determinadas

(benzofuranoides – 68.6% y monoterpénoides – 14.3%). Adicionalmente, se encontraron compuestos tipo sesquiterpenoides (~2%). Sus representantes fueron las mentofuranonas (~6-45%); limoneno, limonen-1,2-diol y *trans*-carveol (~2-3%); y óxido de cariofileno (1.4%), respectivamente. Este último componente se reporta por primera vez para la corteza del tallo de *B. graveolens*.

Puesto que la mentofuranona e isomentofuranona no se aislaron en los extractos estudiados y que son compuestos *target* pocos comunes en aceites esenciales, sus asignaciones estructurales se basaron en el análisis detallado de sus espectros de masas (posible fragmentación) junto con la comparación de las bases de datos utilizadas (NIST02, Wiley8 y NIST Chemistry WebBook, 2011/2012) y reportes de literatura.

Figura N° 3

Análisis de componentes principales de las fracciones volátiles aisladas y analizadas por SDE-GC-MS de los frutos inmaduros, hojas, ramas, corteza del tallo y resina de *B. graveolens*



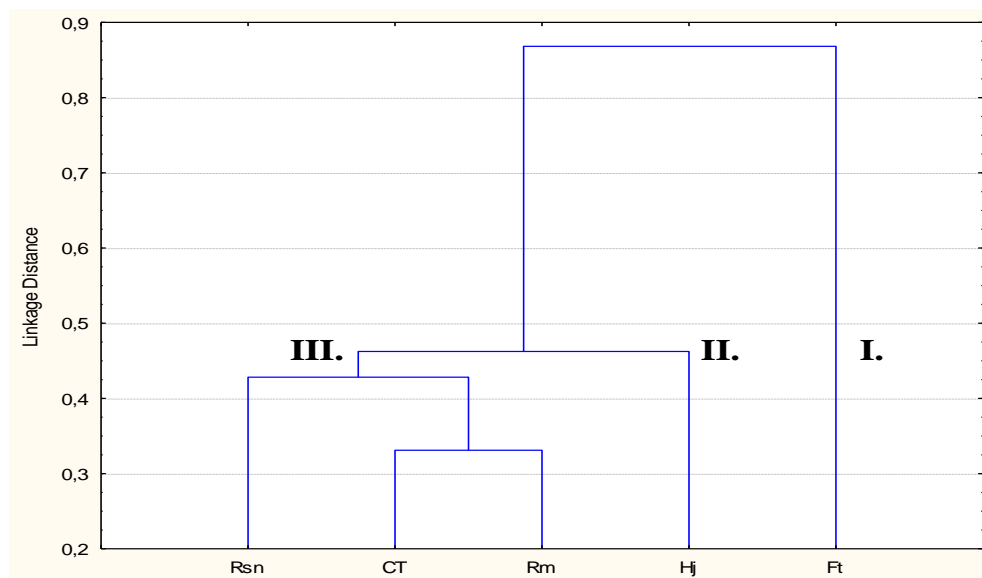
Los espectros de masas experimentales de los dos estereoisómeros fueron similares de acuerdo con la relación  $m/z$  de los iones presentes, con pequeñas diferencias en sus intensidades. Así, el espectro de masas de la mentofuranona (Figura N° 5a) se caracterizó por los iones con  $m/z$  166 ( $M^+$ , 100%), 138 (32%), 137 (53%), 123 (15%), 110 (24%), 109 (44%), 95 (33%), 81 (43%) y 67 (52%); espectro de masas muy similar al reportado por Khojasteh-Bakht *et al.* (1999), quienes aislaron a la mentofuranona y la caracterizaron estructuralmente por NMR y MS.

La posible fragmentación de la mentofuranona inicia con la apertura del anillo lactónico de cinco miembros, por ruptura  $\alpha$  entre los grupos funcionales éter y carbonilo y por reordenamiento de un hidrógeno, que permite la formación del precursor biosintético oxidado (pulegona oxidada a  $\gamma$ -cetoenal – Khojasteh-Bakht *et al.*, 1999) y padecer una fragmentación similar a la de la pulegona (Figura N° 5b).

Así, la eliminación de CO o  $CHO^+$ , consecutivamente desde  $M^+$ , promueve la generación de los iones con  $m/z$  138 o  $m/z$  137. A partir de estos últimos iones ( $[M-CO]^+$  y  $[M-CHO]^+$ ), la salida respectiva de CO en cada uno de ellos, induce la producción de los iones con  $m/z$  110  $[M-CO-CO]^+$  y  $m/z$  109  $[M-CHO-CO]^+$ . El catión  $m/z$  123 ( $C_8H_{11}O^+$ ) posiblemente se origina por la salida simultánea de CO y  $CH_3^+$  desde el ion molecular. Los cationes  $m/z$  110,  $m/z$  109,  $m/z$  95,  $m/z$  81 y  $m/z$  67 posiblemente, corresponden a fragmentos con esqueleto hidrocarbonado.

Los reportes científicos consultados sobre la química de los AE de los tallos o partes maderables de *B. graveolens*, en la mayoría de los casos, no mostraron la diferenciación composicional entre las ramas y corteza, como sí se realizó en el presente estudio.

**Figura N° 4.**  
**Análisis de conglomerados de las fracciones volátiles aisladas y analizadas por SDE-GC-MS de los frutos inmaduros, hojas, ramas, corteza del tallo y resina de *B. graveolens***



La comparación composicional entre ramas/corteza del tallo de este estudio con el trabajo publicado por Leyva *et al.* (2007) sobre el AE de las ramas de la especie del oriente colombiano mostró diferencias significativas: su AE fue rico en limoneno (42.1%),  $\beta$ -mirceno (19.8%), mentofurano (14.7%) y *cis*- $\beta$ -ocimeno (14.3%). Asimismo, existieron diferencias composicionales en el AE de las ramas (Manzano *et al.*, 2009) y de los tallos (Young *et al.*, 2007) de la especie de origen ecuatoriano; sus composiciones presentaron un alto contenido de viridiflorol (70.9%) y 3,4-metilendioxiacetofenona (6.1%) para las ramas, y limoneno (58.6%),  $\alpha$ -terpineol (10.9%) y mentofurano (6.6%) para los tallos. En estos reportes la familia de compuestos principal fue de tipo monoterpenoides y sesquiterpenoides, seguido por los benzofuranoides.

Por otra parte, los reportes bibliográficos detallados (Yukawa *et al.*, 2005; Yukawa *et al.*, 2004a; Yukawa *et al.*, 2004b; Yukawa e Iwabuchi, 2003), sobre la química de los metabolitos secundarios volátiles encontrados en las partes maderables de *B. graveolens* de origen peruano, se fundamentaron en la

elucidación estructural (NMR, IR, HPLC, GC, MS). Así, en el primer trabajo se aislaron y elucidaron las estructuras de cuatro compuestos benzofuránicos (**1.** 3-hidroxi-mentofuranona, **2.** 2,3-dihidro-mentofuranona, **3.** mentofuranona y **4.** *iso*-mentofuranona) en un extracto SDE con éter (Yukawa e Iwabuchi, 2003). No obstante, la mentofuranona fue el tercer componente con mayor cantidad identificado en esa publicación. En este trabajo, la mentofuranona, tanto en ramas como en corteza, fue el constituyente más abundante (44-45%). La similitud composicional radica en que los compuestos **1.**, **3.** y **4.**, caracterizados por Yukawa e Iwabuchi, estuvieron presentes en las fracciones volátiles de las ramas y corteza del tallo de este estudio. Sin embargo, el compuesto **2.** estuvo ausente y apareció un nuevo derivado de mentofuranona con las siguientes características espectrales másicas  $M^+$ ,  $m/z$  166 (63%), 138 (18%), 123 (35%), 110 (26%), 95 (63%), 81 (100%) y 67 (24%). Este componente se encuentra aislado y en estudios de caracterización estructural.



al., 2005; Yukawa *et al.*, 2004a; Yukawa *et al.*, 2004b). Ninguno de estos compuestos alifáticos y sesquiterpenoides se encontraron en los volátiles de las ramas/corteza del tallo de la especie del norte de Colombia.

Adicionalmente, Zuñiga *et al.*, (2005) estudiaron los AE de las cortezas de ocho especies de *Bursera* de origen mejicano. Los componentes más frecuentes encontrados fueron de tipo monoterpenoides:  $\alpha$ -terpineol, terpinen-4-ol,  $\alpha$ -tuyeno, linalol y limoneno. Además, se identificaron sesquiterpenos e hidrocarburos de cadena larga.

Los metabolitos volátiles identificados en los frutos inmaduros, estuvieron agrupados principalmente en compuestos tipo monoterpenoides (53.8%), benzofuranoides (14.7%) y sesquiterpenoides (4.1%); representados por carvona, limoneno e hidroperóxido-*p*-mentadienos (~3-5%); mentofuranonas (~7%) y óxido de cariofileno (3%), sucesivamente. Finalmente, los constituyentes volátiles determinados en la resina fueron clasificados principalmente como benzofuranoides (48.5%) y monoterpenoides (42.5%). Los componentes característicos fueron mentofuranonas (~9-16%) y pulegona y limoneno (12-23%). Las composiciones químicas de las fracciones volátiles de frutos inmaduros y resina se reportan por primera vez para esta especie.

Por otro lado, el análisis PCA permitió encontrar similitudes entre los 5 extractos SDE estudiados, generando tres grupos (Figura N° 3). El grupo III fue el de mayor importancia, puesto que relacionó estrechamente las composiciones de las ramas, resina y corteza del tallo. Sin embargo, según este análisis, la composición de las ramas fue ligeramente diferente al de la resina y corteza del tallo. Las variables de mayor contribución al Factor 1 (47% información) fueron el  $\delta$ -cadinol, *trans*- $\beta$ -ocimeno,  $\alpha$ -cianotolueno, nerol, geraniol, indol, *trans*-jasmona,  $\beta$ -elemeno, benzoato de 2-metilbutilo, *trans*- $\square$ -cariofileno,  $\beta$ -copaeno,  $\alpha$ -humuleno, germacreno D, bicilogermacreno,  $\alpha$ -muuroleno,  $\delta$ -cadineno, benzoato de *cis*-3-hexenilo, *trans*-nerolidol, dendrolasina,  $\tau$ -cadinol,  $\tau$ -muurolol,  $\alpha$ -cadinol, eudesma-4(15),7-dien-1- $\beta$ -ol, benzoato de bencilo y benzoato de fenilo. Compuestos categorizados de forma general como sesquiterpenoides, ésteres aromáticos junto con algunos monoterpenoides, los cuales estuvieron presentes en las fracciones volátiles de frutos y hojas.

Para el Factor 2 (23% información) los compuestos contribuyentes fueron: *iso*-mentofuranona, mentofuranona, 3-hidroxi-mentofuranona, 3-metil-ciclopentanona, 3-metil-ciclohexanona, ácido 1-hidroxiciclohexanocarboxílico, *cis*-dihidrocarvona, *neo-iso*-dihidrocarveol, metil-timil-éter, pulegona, *trans-p*-menta-1(7),8-dien-2-ol, limonen-1,2-diol, derivado de mentofuranona, acetato de *neo-iso*-dihidrocarvilo, terpinen-4-ol, ácido 5-metil-1-ciclopenten-1-carboxílico, timol,  $\square$ -mirceno, *trans*-dihidrocarvona y evodona; componentes clasificados principalmente como benzofuranoides y monoterpenoides junto con algunos compuestos alifáticos. Estos compuestos se hallaron en las fracciones volátiles de ramas, resina y corteza del tallo.

Así, las sustancias que mayor contribución hicieron a las agrupaciones propuestas mediante el análisis PCA (similitud/diferencias), de acuerdo con su *media* en orden descendente (22.4-1.0), fueron mentofuranona, 3-hidroximentofuranona, limoneno, germacreno D, derivado de mentofuranona, *trans*- $\square$ -cariofileno, pulegona, *iso*-mentofuranona, limonen-1,2-diol, carvona, viridiflorol, linalol, *trans*-carveol, mentofurano,  $\square$ -terpineol, derivado de dióxido de limoneno, óxido de cariofileno y dendrolasina.

De acuerdo con el análisis de conglomerados, se determinaron 3 *clusters* (Figura N° 4). De la misma manera que con el PCA, el grupo de mayor importancia (III) relacionó a las composiciones de las ramas, resina y corteza del tallo; no obstante, surgió un subgrupo que correlacionó más cercanamente a las composiciones de las ramas y la corteza del tallo. De acuerdo con el análisis de conglomerados, se determinaron 3 *clusters* y este mismo número se utilizó para el análisis de K-medias. Este tipo de análisis examina las *medias* de cada *cluster* (predefinido) en cada dimensión y evalúa cuán distintos son los *n clusters*. Además, discrimina las dimensiones entre *cluster* de acuerdo con los valores F a partir del análisis de varianza ejecutado sobre cada dimensión.

La discusión de los valores F, reveló que la variable (compuesto) de mayor aporte a la diferenciación entre los extractos fue el viridiflorol (F = 402). Aunque, otras variables también contribuyeron a la diferenciación general con valores de F menores (F  $\geq$  4), *i.e.*, *iso*-mentofuranona (F = 36.5), mentofuranona (F = 36.4),  $\beta$ -bourboneno (F = 39.0), linalol (F = 25.4), 3-metil-ciclopentanona (6.8%), *cis*-óxido de limoneno (F = 5.4) y *neo-iso*-dihidrocarveol (F = 3.8). Con base en el análisis de K-medias, los tres

clusters estuvieron conformados por I – Frutos y Resina, II – Hojas y III – Ramas y Corteza. Así, la característica composicional para las ramas y corteza del tallo es que la mayoría de sus componentes correspondieron a la familia benzofuranoides; los componentes de las hojas, hicieron parte de los sesquiterpenoides y los constituyentes de la resina y frutos, pertenecieron a monoterpenoides y benzofuranoides.

## CONCLUSIONES

Se reporta por primera vez la composición química de las fracciones volátiles de los frutos inmaduros, hojas y resina de *B. graveolens* de la región norte de Colombia. Existieron algunas diferencias, tanto en las cantidades relativas como en constituyentes, entre los metabolitos secundarios volátiles de las partes aéreas y resina de la especie de estudio. La aplicación de técnicas estadísticas multivariable (PCA, dendograma y K-medias) al conjunto de datos permitió relacionar los extractos estudiados de acuerdo con sus similitudes y diferencias en tres grupos: I – Frutos, II – Hojas y III – Ramas, Corteza del tallo y Resina. Sin embargo, la resina puede relacionarse con los frutos, por su alto contenido de monoterpenoides.

## AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la División de Ciencias Básicas de la Universidad del Norte por su apoyo financiero. 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.
- Alonso-Castro AJ, Villarreal ML, Salazar-Olivod LA, Gómez-Sánchez M, Domínguez F, García-Carranca A. 2011. Mexican medicinal plants used for cancer treatment: pharmacological, phytochemical and ethnobotanical studies. **J Ethnopharmacol** 133: 945 - 972.
- Álvarez OL. 1991. **Recuperación de la medicina indígena**. Memorias del I Encuentro de Médicos Tradicionales. Santiago - Putumayo. Cartilla de Educación Popular No. 8. Servicio Colombiano de Comunicación, Bogotá, Colombia.
- Cárdenas D, Salinas NR. 2007. **Libro rojo de plantas de Colombia**. Volumen 4. Especies maderables amenazadas: primera parte. Serie libros rojos de especies amenazadas de Colombia. Instituto de Amazónico de Investigaciones Científicas SINCHI – Ministerio de Ambiente, Vivienda y Desarrollo Territorial, Bogotá, Colombia.
- Carmona R, Quijano-Celís CE, Pino JA. 2007. Leaf oil composition of *Bursera graveolens* (Kunth) Triana et Planch. **J Essent Oil Res** 21: 387 - 389.
- Correa JM, Bernal HY. 1990. **Bursera graveolens (H.B.K.) Triana & Planchon**. En: Especies Vegetales Promisorias de los países del Convenio Andrés Bello. Tomo III. Editora Guadalupe Ltda., Santafé de Bogotá, Colombia.
- Cuatrecasas, J. 1957. Prima flora colombiana: 1. *Burseraceae*. **Webbia** 12: 375 - 441.
- Duke JA, Bogenschutz-Godwin MJ, Ottesen AR. 2009. **Duke's handbook of medicinal plants of Latin America**. CRC Press, Boca Raton, USA.
- Gardiner WP. 1997. **Statistical analysis methods for chemists. A software-based approach**. In: Multivariate analysis methods in chemistry. The Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK.
- Godefroot M, Sandra P, Verzele M. 1981. New method for quantitative essential oil analysis. **J Chromatogr** 203: 325 - 335.
- Grandtner MM. 2005. **Elsevier's dictionary of trees**. Volume I. Elsevier B.V., Amsterdam, The Netherland.
- Gupta MP. 1995. **270 plantas medicinales iberoamericanas**. CYTED-SECAB. Editora Presencia Ltda., Santafé de Bogotá, Colombia.
- Härdler W, Simar L. 2003. **Applied multivariate statistical analysis**. Version 29th, Springer Science + Business Media LLC, New York, USA.
- Izenman AJ. 2008. **Modern multivariate statistical techniques. Regression, classification, and manifold learning**. Springer Science + Business Media LLC, New York, USA.
- Joulian D, König WA. 1998. **The atlas of spectral data of sesquiterpenes hydrocarbons**. Ed. E.B.-Verlag, Hamburg, Germany.
- Khojasteh-Bakht SC, Chen W, Koenigs LL, Peter RM, Nelson SD. 1999. Metabolism of (R)-(1)-pulegone and (R)-(1)-menthofuran by human liver cytochrome P-450s: evidence for formation of a furan epoxide. **Drug Metab Dispos** 27: 574 - 580.

- Leyva MA, Martínez JR, Stashenko EE. 2007. Composición química del aceite esencial de hojas y tallos de *Bursera graveolens* (Burseraceae) de Colombia. **Sci et Techn** 33: 201 - 202.
- Manzano P, Miranda M, Gutiérrez Y, García G, Orellana T, Orellana A. 2009. Efecto antiinflamatorio y composición química del aceite de ramas de *Bursera graveolens* Triana & Planch (palo santo) de Ecuador. **Rev Cubana Plant Med** 14: 45 - 53.
- McMullen CK. 1999. **Flowering plants of the Galápagos**. Cornell University Press, New York, USA.
- Nakanishi T, Inatomi Y, Murata H, Shigeta K, Iida N, Inada A, Murata J, Farrera MA, Linuma M, Tanaka T, Tajima S, Oku N. 2005. A new and known cytotoxic aryltetralin-type lignans from stems of *Bursera graveolens*. **Chem Pharm Bull** 53: 229 - 231.
- NIST 2011/2012. National Institute of Standards and Technology.  
<http://webbook.nist.gov/chemistry/>  
[Consultado Marzo 2013].
- Noge K, Venable DL, Becerra JX. 2011. 2-Phenylethanol in the leaves of *Bursera velutina* bullock (Burseraceae). **Acta Bot Mex** 97: 9 - 16.
- Robles J, Torrenegra R, Gray AI, Piñeros C, Ortiz L, Sierra M. 2005. Triterpenos aislados de corteza de *Bursera graveolens* (Burseraceae) y su actividad biológica. **Rev Bras Farmacognosy** 15: 283 - 286.
- Sánchez O, Kvist LP, Aguirre Z. 2006. **Bosques secos en Ecuador y sus plantas útiles**. En Botánica Económica de los Andes Centrales. Universidad Mayor de San Andrés, La Paz, Bolivia.
- Soukup J. 1970. **Vocabulario de los nombres vulgares de la flora peruana**. Imprenta Salesiana, Lima, Perú.
- Tene V, Malagón O, Vita Finzi P, Vidari G, Armijos Ch, Zaragoza T. 2007. An ethnobotanical survey of medicinal plants used in Loja and Zamora-Chinchipe, Ecuador. **J Ethnopharmacol** 111: 63 - 81.
- Young DG, Chao S, Casabianca H, Bertrand M-C, Minga D. 2007. Essential oil of *Bursera graveolens* (Kunth) Triana et Planch from Ecuador. **J Essent Oil Res** 19: 525 - 526.
- Yukawa C, Iwabuchi H. 2003. Terpenoids of the volatile oil of *Bursera graveolens*. **J Oleo Sci** 52: 483 - 489.
- Yukawa C, Iwabuchi H, Kamikawa T, Komemushi S, Sawabe A. 2004a. Terpenoids of the volatile oil of *Bursera graveolens*. **Flavour Frag J** 19: 565 - 570.
- Yukawa C, Iwabuchi H, Komemushi S, Sawabe A. 2004b. Eudesmane-type sesquiterpenoids in the volatile oil from *Bursera graveolens*. **J Oleo Sci** 53: 343 - 348.
- Yukawa C, Iwabuchi H, Komemushi S, Sawabe A. 2005. Mono and sesquiterpenoids of the volatile oil of *Bursera graveolens*. **Flavour Frag J** 20: 635 - 658.
- Zúñiga B, Guevara-Fefer P, Herrera J, Contreras JL, Velasco L, Pérez FJ, Esquivel B. 2005. Chemical composition and anti-inflammatory activity of the volatile fractions from the bark of eight mexican *Bursera* species. **Planta Medica** 71: 825 - 828.