



Desarrollo de una metodología para la predicción del contenido de cannabinoides de la planta *Cannabis sativa* por medio de espectroscopia infrarroja combinada con quimiometría

Development of a Methodology for Predicting the Cannabinoid Content of The *Cannabis sativa* Plant Using Infrared Spectroscopy Combined with Chemometrics

Brayan Alexis Chavarro Hurtado¹, Andrés Felipe Vargas Ramirez¹, Luis Fernando Giraldo Morales²

¹ Institución Universitaria Instituto Tecnológico Metropolitano – ITM. Medellín, Colombia.

brayanchavarro249878@correo.itm.edu.co; andresvargas@itm.edu.co

² Laboratorio de Investigación en Polímeros (LIPOL), Instituto de Química de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia. luis.giraldo2@udea.edu.co

Presentación Poster 20

ABSTRACT

Cannabis sativa L. is a plant of growing medicinal and industrial importance ^[1-3].. This study presents a preliminary methodology to predict the content of cannabinoids (THC, CBD, and CBG) in *Cannabis sativa* inflorescences using near-infrared spectroscopy (NIRS) and chemometric modeling. Thirty samples from genotype #7, cultivated under controlled greenhouse conditions in Antioquia, Colombia, were provided by Terra Cann S.A.S.

Samples were dried at 120 °C, ground, sieved (mesh 60), and mixed with potassium bromide (KBr) for DRIFT-mode FT-NIR spectral acquisition using a Shimadzu IRTracer-100. Cannabinoid concentrations were determined via high-performance liquid chromatography with diode array detection (HPLC-DAD), serving as the reference method ^[4;5].

PLS regression models were developed using various spectral preprocessing strategies. Among them, multiplicative scatter correction (MSC) combined with first derivate yielded the best predictive performance, especially for THC and CBG. For THC, the model achieved an R² of 0.9999 and an RPD of 2,44, which is considered excellent.

Table 1. Calibration and validation statistics using the first derivative with MSC.

Métrica	THC	CBD	CBG
MSE	0,09118415	1433,408	0,05395458
RMSE	0,3019671	37,86037	0,2322812



MAE	0,2522574	28,04827	0,2090732
R ²	0,9999867	0,8956556	0,9999925
RMSEC	0,576941	23,0987	0,3170627
RMSECV	0,6257094		
R ² Cal	0,9999428	0,9601159	0,9999834
R ² CV	0,9999327	0,9287716	0,9999787
RPD	2,443508	0,7694834	1,1894192

These results support the viability of NIRS as a robust, non-destructive, and sustainable tool for the quantification of cannabinoids in plant material, significantly reducing analysis time and the need for organic solvents.

Key words:

Near-infrared spectroscopy (NIRS), partial least squares regression (PLS), cannabinoids and chemometrics.

RESUMEN

Cannabis sativa L. es una planta de creciente interés medicinal e industrial ^[1-3]. En este estudio se desarrolló una metodología para predecir el contenido de cannabinoides (THC, CBD y CBG) en inflorescencias de *Cannabis sativa* mediante espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS) combinada con análisis quimiométrico. Las muestras (n=30) fueron proporcionadas por la empresa Terra Cann S.A.S., correspondientes al genotipo #7 cultivado legalmente en invernadero en Antioquia, Colombia.

El material vegetal fue secado a 120 °C, molido, tamizado (malla 60) y mezclado con bromuro de potasio (KBr) para adquirir los espectros NIR por reflectancia difusa (DRIFT) usando un espectrofotómetro FT-NIR (Shimadzu IRTracer-100). Paralelamente, se determinó el contenido de cannabinoides mediante cromatografía líquida de alta resolución (HPLC-DAD), que actuó como método de referencia ^[4;5].

Se construyeron modelos de regresión PLS aplicando distintos preprocesamientos espectrales. En los resultados preliminares, el mejor desempeño se obtuvo con la corrección de dispersión multiplicativa (MSC) combinada con la primera derivada, alcanzando coeficientes de determinación superiores a 0,99 para THC y CBG. En particular, el modelo para THC mostró un RPD de 2,44, lo cual indica una excelente capacidad predictiva ^[6;7].

Tabla 1. Estadísticas de calibración y validación empleando la primera derivada con MSC

Métrica	THC	CBD	CBG
MSE	0,09118415	1433,408	0,05395458
RMSE	0,3019671	37,86037	0,2322812



MAE	0,2522574	28,04827	0,2090732
R ²	0,9999867	0,8956556	0,9999925
RMSEC	0,576941	23,0987	0,3170627
RMSECV	0,6257094		
R ² Cal	0,9999428	0,9601159	0,9999834
R ² CV	0,9999327	0,9287716	0,9999787
RPD	2,443508	0,7694834	1,1894192

Tabla 2. Predicción con MSC y 1^{ra} derivada

Datos MSC + 1 ^{ra} derivada					
Concentración real (ppm)			concentración predictiva (ppm)		
THC	CBD	CBG	THC	CBD	CBG
2,35	48,6	1,26	2,56	48,2	1,31
3,71	45,2	1,5	2,58	45,3	1,69
2,25	53,2	1,93	3,18	51,6	1,98
2,81	44,7	1,51	2,81	45,8	1,54
2,32	43,1	1,65	2,32	44,4	1,44
3,28	45,7	1,88	3,28	45,5	1,82

Estos resultados apoyan la viabilidad de NIRS como una herramienta robusta, no destructiva y sustentable para la cuantificación de cannabinoides en material vegetal, al reducir significativamente el tiempo de análisis y la necesidad de solventes orgánicos [6;7].

Palabras clave:

Espectroscopia infrarroja cercana (NIRS), regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS), cannabinoides y quimiometría.

Agradecimientos/Acknowledgements

Agradecemos a Terra Cann S.A.S por su valioso apoyo al suministrar muestras de inflorescencias de Cannabis. Finalmente, agradezco a la Institución Universitaria ITM y la Universidad de Antioquia que han brindado recursos y facilidades para llevar a cabo este trabajo.



REVISTA PRODUCTOS NATURALES

ISSN 1916-2413



Vol. 6 Núm. 1 (2025): I Congreso Colombiano de Productos Naturales

Disponible en línea en

<https://www.nozomiscience.org/index.php/rpn/issue/view/587>

doi: <https://doi.org/10.3407/rpn.v6i1pp20>



Referencias/References

- [1] ÁNGELES LÓPEZ, G. E. F. B., SOL CRISTIANS NIIZAWA, ROSA VENTURA MARTÍNEZ. (2014). Cannabis Sativa L., Una Planta Singular. *Revista Farmacéuticas Mexicanas*. **45**(4): 1-6. [URL](#)
- [2] GROTENHERMEN, F. y MLLER-VAHL, K. (2012). The Therapeutic Potential of Cannabis and Cannabinoids. *Dtsch Arztebl International* **109**(29-30): 495-501. [URL](#)
- [3] ZUARDI, A. W. (2006). History of Cannabis as a Medicine: A Review . *Revista Brasileira de Psiquiatria* **28**(2): 153-157. [DOI](#)
- [4] CARUSO, S. J., *et al.* (2024). Simultaneous Analysis of Cannabinoids and Terpenes in Cannabis Sativa Inflorescence Using Full Comprehensive Two-Dimensional Liquid Chromatography Coupled to Smart Active Modulation. *Journal of Chromatography A* **1720**: 464810. [DOI](#)
- [5] RADWAN, M. M., *et al.* (2021). Cannabinoids, Phenolics, Terpenes and Alkaloids of Cannabis. *Molecules* **26**(9). [DOI](#)
- [6] GESKOVSKI, N., *et al.* (2021). Mid-Infrared Spectroscopy as Process Analytical Technology Tool for Estimation of The and Cbd Content in Cannabis Flowers and Extracts. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* **251**: 119422. [DOI](#)
- [7] SU, K., *et al.* (2022). Nir Spectroscopy for Rapid Measurement of Moisture and Cannabinoid Contents of Industrial Hemp (Cannabis Sativa). *Industrial Crops and Products* **184**: 115007. [DOI](#)