



Determinación espectroscópica por GC-MS de los compuestos de la planta *Pelargonium hortorum* y su análisis *in silico*.

Spectroscopic determination GC-MS of the compounds of *Pelargonium hortorum* and *in silico* analysis.

María Fernanda Casasola Jiménez¹, Kellyn Jhoana Ramirez Adan², Julián Patiño Rivera³, Gregorio Borja Meza², Gereli Darina Tejada Melo², Belky Tatiana Palencia Pérez⁴

¹. Licenciatura en Químico Farmacéutico Biólogo. Ciencias Exactas e Ingenierías. Universidad de Guadalajara. México.

². Químico Farmacéutico Biólogo. Ciencias Naturales. Universidad Autónoma de Guerrero. México.

³. Tecnología en Análisis y Laboratorio Químico, Sede Yumbo, Universidad del Valle. Colombia.

⁴. Química, Ciencias Naturales y Exactas, Universidad del Valle. Colombia.

belky.palencia@correounivalle.edu.co

Presentación Poster 23

ABSTRACT

Since ancient times, different plant-derived therapeutic agents have been used due to the richness and effects of secondary metabolites interacting between the substrate and the receptor to treat various diseases ^[1]. Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2) is no exception.

Among the plants found in the Valle del Cauca region (Colombia) is *Pelargonium hortorum*, commonly known as geranium, an ornamental plant native to North America with antimicrobial, antioxidant, anti-inflammatory, antiviral, analgesic, and wound-healing properties, suggesting broad potential and applications for medicinal purposes ^[2]. According to Deyny (2007), geranium oil contains citronellol (19.3–40.2%) and geraniol (6.5–18.4%) as its major constituents ^[3]. Additionally, according to Mehdi (2006), the oils of plants such as *Pelargonium hortorum* have low toxicity, making them useful as wound-healing agents and beneficial for respiratory health ^[4].

Currently, no specific drugs are available as therapeutic agents against SARS-CoV-2 ^[5]. Moreover, the development of new drugs requires multiple stages and an extended period. Therefore, computational tools such as Computer-Aided Drug Design (CADD), particularly *in silico* analysis, have been employed to expedite these processes for selecting a potential drug candidate based on Gibbs free energy analysis and ADME properties ^[6]. In this study, the compounds of *Pelargonium hortorum* were spectroscopically analyzed, along with *in silico* analysis.



For this purpose, 10 g of *Pelargonium hortorum* (red variety) was collected and subjected to simple drying for 24 hours, resulting in 2 g of dry sample. Subsequently, the percolation method was employed, yielding two extracts: ethanol (30 mg, dark green resinous) and cyclohexane (17.8 mg, granular brown-yellow).

Next, column chromatography fractionation was performed on the cyclohexane extract, using alumina as the stationary phase and a 70:30 (Hex:AcOEt) mobile phase, resulting in 10 fractions. The major fraction was labeled PHC1R. Once these steps were completed, a spectroscopic analysis was conducted using a gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) system, model QP2010 Ultra by Shimadzu.

From the spectroscopic analysis, 42 peaks corresponding to 10 compounds were identified in the ethanol extract, while 50 peaks corresponding to 21 compounds were identified in the cyclohexane fraction labeled PHC1R.

The *in silico* analysis of ADME properties and molecular docking was conducted using free-access computational tools (SwissDock, SwissADME, etc.), allowing the evaluation of the interaction between the GC-MS-identified compounds and SARS-CoV-2 enzymes, such as the Spike protein of the B.1.1.7 variant of SARS-CoV-2 and the Main Protease.

From these findings, it is concluded that *Pelargonium hortorum* contains various terpenic compounds, sterols, fatty acids, esters, nitrogenated compounds, and oxygenated compounds of carbonyl or hydroxyl types ^[7;8]. Tetratetracontane (C₄₄H₉₀) was the predominant compound found in both the cyclohexane and ethanol extracts, exhibiting antioxidant and cytoprotective activities.

Key words:

ADME, docking, GC-MS, *Pelargonium hortorum*, tetratetracontane

RESUMEN

Desde tiempos remotos, se han utilizado diferentes agentes terapéuticos de origen vegetal debido a la riqueza y efecto de metabolitos secundarios entre el sustrato, el receptor, para tratar diversas enfermedades ^[1] y el coronavirus tipo 2 del síndrome respiratorio agudo grave (SARS-CoV-II), no es la excepción.

De las plantas de la región del Valle del Cauca (Colombia), se encuentra *Pelargonium hortorum*, una planta conocida comúnmente como geranio, ornamental originaria de Norteamérica con propiedades antimicrobianas, antioxidantes, antiinflamatorias, antivirales, analgésicas, cicatrizantes, lo que sugiere un amplio potencial y espectro para fines medicinales ^[2]. Según Deyny, 2007, el aceite de geranio contiene como constituyentes mayoritarios citronelol (19.3–40.2%) y geraniol (6.5–18.4%) ^[3]. Por otra parte, según Mehdi, 2006, los aceites de plantas como *Pelargonium hortorum* poseen baja toxicidad por lo cual se emplea como cicatrizante y para la salud de las vías respiratorias ^[4].

Actualmente no se dispone de fármacos como agentes terapéuticos contra el SARS-CoV-II ^[5]. Además, el diseño de nuevos fármacos requiere varias etapas y un tiempo extenso; por lo cual, se han empleado herramientas computacionales como el diseño de fármacos asistido por computadora o en inglés (CADD) particularmente el



análisis in silico, lo que permite agilizar dichos tiempos para la selección de un posible candidato a fármaco con base en el análisis de la energía libre de Gibbs y de las propiedades ADME ¹⁶.

En el presente estudio se analizó espectroscópicamente los compuestos de la planta *Pelargonium hortorum* y su análisis in silico.

Para ello. Se recolectaron 10 g de *Pelargonium hortorum* variedad roja, el cual se sometió a un secado simple durante 24 h, hasta obtener 2 g de muestra seca. Posteriormente se empleó el método de percolación y se obtuvo 2 extractos: etanol (30 mg, resinoso verde oscuro) y ciclohexano (17.8 mg, amarillo marrón, granular).

Posteriormente se realizó un fraccionamiento en cromatografía de columna para el extracto en ciclohexano, empleando como fase estacionaria alúmina con fase móvil 70:30 (Hex:AcOEt), resultando 10 fracciones. La fracción mayoritaria se denominó PHC1R. Una vez obtenidos lo anterior, se procedió a realizar el análisis espectroscópico con ayuda de un equipo de cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS) modelo QP2010 Ultra y marca Shimadzu.

Del análisis espectroscópico se obtuvo 42 picos para el extracto en etanol que corresponden a 10 compuestos y para la fracción en ciclohexano denominada PHC1R se obtuvo 50 picos que corresponden a 21 compuestos.

El análisis *in silico* de las propiedades ADME y el acoplamiento molecular (Docking) se realizó haciendo uso de herramientas computacionales de acceso libre (Swissdock, SwissADME, etc.), lo que permitió evaluar la interacción de los compuestos del análisis por GC-MS frente a las enzimas del SARS-CoV-2, como la proteína espina (Spike) de la variante B.1.1.7 del SARS-CoV-2 y la proteasa principal (Main Protease).

De lo anterior se concluye que *Pelargonium hortorum* posee distintos compuestos de naturaleza terpénica, esteroides, ácidos grasos, ésteres, compuestos nitrogenados y oxigenados de tipo carbonilo o hidroxilo ^{17,8}; el tetratetracontano (C₄₄H₉₀) es el compuesto mayoritario obtenido en los extractos de ciclohexano y etanol que posee actividades antioxidantes y citoprotectoras.

Palabras clave:

ADME, docking, GC-MS, *Pelargonium hortorum*, tetratetracontano

Agradecimientos/Acknowledgements

Los autores agradecen al Programa Interinstitucional para el Fortalecimiento de la Investigación y el Posgrado del Pacífico para el desarrollo de este proyecto.

The authors thank the Interinstitutional Program for the Strengthening of Research and Graduate Studies of the Pacific for supporting the development of this project.

Referencias/References

- [1] NINAMA, V., *et al.* (2024). Assessment of Phytochemicals, Nutritional Compositions and Metabolite Profiling Using Gcms– from Annual Edible Flowers. *Scientia Horticulturae* **323**: 112551. [DOI]



-
- [2] DRAIAIA, R., *et al.* (2024). Análisis Gc/Ms, Actividad Antioxidante Y Antiinflamatoria De Pelargonium Graveolens. *Boletín Latinoamericano y del Caribe de Plantas Medicinales y Aromáticas* **24**(2): 199 - 211. [\[DOI\]](#)
 - [3] MENDIVELSO PÉREZ, D. L., *et al.* (2007). Composición Química De Los Metabolitos Secundarios Volátiles De Pelargonium Graveolens, En Función Del Método De Extracción Y Época De Recolección Del Material Vegetal. *Scientia Et Technica* **1**(33). [URL](#)
 - [4] JALALI-HERAVI, M., *et al.* (2006). Characterization of Essential Oil Components of Iranian Geranium Oil Using Gas Chromatography–Mass Spectrometry Combined with Chemometric Resolution Techniques. *Journal of Chromatography A* **1114**(1): 154-163. [\[DOI\]](#)
 - [5] BOUKHATEM, M. N., *et al.* (2013). Essential Oil of Algerian Rose-Scented Geranium (Pelargonium Graveolens): Chemical Composition and Antimicrobial Activity against Food Spoilage Pathogens. *Food Control* **34**(1): 208-213. [\[DOI\]](#)
 - [6] M'HAMDI, Z., *et al.* Chemical Composition and Antibacterial Activity of Essential Oil of Pelargonium Graveolens and Its Fractions. *Arabian Journal of Chemistry* **17**: 105375. [\[DOI\]](#)
 - [7] VILJOEN, A., *et al.* 19 - Pelargonium Graveolens. In: VILJOEN, A., *et al.* (eds.). *Phytochemical Profiling of Commercially Important South African Plants*. Academic Press, (2022). p. 189-196. [\[DOI\]](#)
 - [8] BOUKHRIS, M., *et al.* (2013). Trichomes Morphology, Structure and Essential Oils of Pelargonium Graveolens L'hér. (Geraniaceae). *Industrial Crops and Products* **50**: 604-610. [\[DOI\]](#)