

## COMPOSIÇÃO QUÍMICA DOS ÓLEOS ESSENCIAIS DE FOLHAS, FLORES E FRUTOS DE CASEARIA SYLVESTRIS SW POR CROMATOGRAFIA GASOSA ACOPLADA À ESPECTROMETRIA DE MASSAS E POR ÍNDICE DE RETENÇÃO.

### CHEMICAL COMPOSITION OF ESSENTIAL OILS FROM LEAVES, FLOWERS AND FRUITS OF CASEARIA SYLVESTRIS SW BY GAS CHROMATOGRAPHY COUPLED TO MASS SPECTROMETRY AND BY RETENTION INDEX.

Gabriela Godoy Santiago , Caetano Dartiere Zulian Fermino , Marcelo Telascrêa , Márcia Ortiz Mayo Marques<sup>2</sup>, Roselaine Faccanali<sup>2</sup>, José Alberto Cavalheiro<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Universidade Sagrado Coração de Jesus – UNISAGRADO, Bauru/SP.

<sup>2</sup>Instituto Agrônômico de Campinas – IAC, Campinas/SP

<sup>3</sup>Instituto de Química de Araraquara – UNESP, Araraquara/SP

\*Autor para correspondência, E-mail: gabigodoysan@gmail.com (autor principal)

## RESUMO

Este estudo investiga a composição química dos óleos essenciais e hidrolatos da *Casearia sylvestris*, uma planta nativa brasileira reconhecida por suas propriedades medicinais. A análise foi realizada por meio de Cromatografia Gasosa acoplada à Espectrometria de Massa, com o objetivo de identificar os principais compostos presentes nos extratos de diferentes partes da planta, incluindo flores, folhas e frutos. Os resultados revelaram a presença de compostos significativos, como biciclogermacreno, spathulenol,  $\beta$ -himachaleno e germacreno D, com concentrações variáveis entre os extratos. A comparação dos perfis dos óleos essenciais e hidrolatos evidenciou diferenças na composição química, destacando o valor dos hidrolatos como fontes de compostos aromáticos frequentemente subestimados na literatura. Adicionalmente, a análise cromatográfica identificou picos não caracterizados, sugerindo a necessidade de investigações adicionais com técnicas avançadas, como cromatografia bidimensional e ressonância magnética nuclear, para uma caracterização mais abrangente dos compostos presentes. Este estudo contribui para a compreensão da riqueza química de *Casearia sylvestris*, ressaltando seu potencial bioativo e suas aplicações terapêuticas. Os resultados obtidos enfatizam a importância de metodologias analíticas robustas na exploração da diversidade química dos extratos vegetais, abrindo novas perspectivas para a pesquisa e uso industrial desses compostos.

**Palavras-chave:** *Casearia silvestres*, Cromatografia Gasosa, Hidrolato, Óleos essenciais.

## ABSTRACT

*This study investigates the chemical composition of essential oils and hydrosols from *Casearia sylvestris*, a Brazilian native plant recognized for its medicinal properties. The analysis was conducted using Gas Chromatography coupled with Mass Spectrometry, aiming to identify the main compounds present in extracts from different parts of the plant, including flowers, leaves, and fruits. The results revealed the presence of significant compounds such as bicyclogermacrene, spathulenol,  $\beta$ -himachalene, and germacrene D, with varying concentrations among the extracts. The comparison of the profiles of essential oils and hydrosols highlighted differences in chemical composition, emphasizing the value of hydrosols as sources of aromatic compounds often underestimated in the literature. Additionally, the chromatographic analysis identified uncharacterized peaks, suggesting the need for further investigations using advanced techniques such as two-dimensional chromatography and nuclear magnetic resonance for a more comprehensive characterization of the compounds present. This study contributes to the understanding of the chemical richness of *Casearia sylvestris*, highlighting its bioactive potential and therapeutic applications. The obtained results emphasize the importance of robust analytical methodologies in exploring the chemical diversity of plant extracts, opening new perspectives for research and industrial use of these compounds.*

**Keywords:** *Casearia sylvestris*, Essential Oils, Gas Chromatography, Hydrosol.

## 1. INTRODUÇÃO DA PESQUISA.

Apresentam-se as reflexões que contextualizam e justificam este projeto

### 1.1 Óleos Essenciais

Os óleos essenciais (OEs) são substâncias complexas que se classificam como metabólitos secundários e podem ser obtidos de diversas partes das plantas, incluindo folhas, brotos, galhos, flores, frutos, sementes, raízes e madeira. Essas substâncias são amplamente reconhecidas por sua volatilidade, bem como por suas propriedades lipofílicas e aromáticas. Quimicamente, os OEs são compostos por uma combinação de terpênicos e fenilpropanóides, que são hidrocarbonetos com estruturas carbônicas que normalmente incluem múltiplos de cinco átomos de carbono. Assim, temos os monoterpenos (com 10 átomos de carbono), os sesquiterpenos (com 15 átomos de carbono) e os diterpenos (com 20 átomos de carbono). A volatilidade dos óleos essenciais está diretamente relacionada ao número de átomos de carbono em sua composição: cadeias carbônicas mais curtas resultam em substâncias mais voláteis. (DE ALMEIDA et al, 2020; ALMEIDA, M. P. et al, 2015).

A formação dos óleos essenciais, também conhecidos como óleos etéreos, é influenciada por uma variedade de fatores. Entre esses, as interações entre plantas e microrganismos, plantas e insetos, além das interações entre diferentes plantas, são especialmente relevantes.

Outros elementos que impactam a composição dos óleos incluem a fase de desenvolvimento da planta, as condições de luminosidade, temperatura, disponibilidade de água e nutrientes, bem como o método utilizado para a extração dos óleos. Devido a essas condições variadas às quais as plantas são expostas, cada óleo essencial possui uma composição única, podendo conter centenas de compostos químicos diferentes. Essa diversidade torna os óleos essenciais produtos altamente valorizados no mercado. (2020; ALMEIDA, M. P. et al, 2015; REIS et al, 2009; TAVARES et al., 2022)

## 1.2 Funções biológicas dos óleos essenciais

Atualmente, existem cerca de 3000 óleos essenciais identificados, que se destacam nas indústrias farmacêutica, agrícola, alimentícia, sanitária, cosmética e de fragrâncias. Esses compostos são amplamente reconhecidos por suas propriedades antissépticas, incluindo ações bactericida, virucida e fungicida, além de suas qualidades medicinais e aromas agradáveis. Sua aplicação abrange embalsamamento, conservação de alimentos e uso como agentes antimicrobianos, analgésicos, sedativos, anti-inflamatórios, espasmolíticos e anestésicos locais. Adicionalmente, os óleos essenciais apresentam atividades antioxidantes e antitumorais, que, quando investigadas e aplicadas, podem proporcionar benefícios significativos a diferentes formas de vida. Para ressaltar a importância desses metabólitos secundários, os próximos parágrafos explorarão suas aplicações e o potencial em várias áreas do conhecimento e da prática.. (MAIA, 2020; MENDES et al., 2010; WANNES, 2010; BURT, 2004;)

Os repelentes desempenham um papel fundamental na proteção contra picadas de insetos, funcionando principalmente ao criar uma barreira de vapor sobre a pele que impede a aproximação dos artrópodes. Entretanto, o uso de repelentes sintéticos levanta sérias preocupações, uma vez que pode resultar em impactos negativos para o meio ambiente e potenciais riscos à saúde humana (PITASAWAT et al., 2003). Essa realidade tem estimulado a pesquisa por soluções mais naturais e sustentáveis, como repelentes feitos a partir de óleos essenciais. No entanto, a volatilidade desses óleos pode limitar a duração de sua eficácia. Pesquisas indicaram que o óleo de *Cymbopogon winterianus* spp., quando combinado com 5% de vanilina, produz um repelente que garante 100% de proteção contra os mosquitos *Aedes aegypti*, *Culex quinquefasciatus* e *Anopheles dirus* por um período de até 6 horas.. (TAWATSIN et al., 2001; NERIO; OLIVERO-VERBEL e STASHENKO, 2010; MAIA, 2020).

A dor é um fenômeno universal que pode ser experimentado em diversas fases da vida, frequentemente motivando a busca por métodos eficazes de alívio. Tradicionalmente, os analgésicos são a primeira linha de defesa contra esse desconforto. No entanto, o uso desses medicamentos nem sempre é isento de riscos, pois pode levar a uma série de efeitos colaterais indesejáveis. Por exemplo, a morfina, um analgésico amplamente utilizado, está associada a complicações como distúrbios endócrinos, depressão respiratória, sonolência e náuseas. Isso ressalta a necessidade de explorar opções alternativas que ofereçam alívio da dor com menos

efeitos adversos. Nesse contexto, vários óleos essenciais têm mostrado potencial analgésico, entre os quais o óleo de *Rosmarinus officinalis* L. (alecrim) se destaca, sendo utilizado como um analgésico leve para tratar cólicas renais, distúrbios respiratórios e dismenorreia. (DE OLIVEIRA ARAÚJO et al. 2021; TAVARES et al., 2022).

A trombose é uma condição médica caracterizada pela formação de coágulos sanguíneos, frequentemente ligada à ativação das plaquetas e à liberação de eicosanoides. Embora os métodos preventivos, como os agentes antiplaquetários, tenham demonstrado eficácia no combate a essa patologia, muitos desses fármacos podem causar efeitos colaterais adversos, como erosões gástricas e agranulocitose. Em vista desses efeitos indesejados, pesquisas têm explorado alternativas terapêuticas, destacando o óleo essencial de lavanda (*Lavandula hybrida* Reverchon cv.) como uma opção promissora. Este óleo apresenta um notável potencial antitrombótico, evidenciando um efeito antiplaquetário abrangente, capaz de inibir a agregação plaquetária provocada por ADP, ácido araquidônico, colágeno e agonistas estáveis do receptor de tromboxano, sem desencadear propriedades pró-hemorragicas (BALLABENIA et al., 2004; EDRIS, 2007; MAIA, 2020).

A quimioterapia é amplamente reconhecida como uma abordagem crucial no tratamento do câncer, porém, suas formulações geralmente contêm drogas citotóxicas que, apesar de sua eficácia, podem provocar efeitos colaterais severos em células saudáveis. Essa limitação tem motivado a busca por alternativas que possam complementar ou até substituir as terapias convencionais. Nesse contexto, os óleos essenciais têm despertado interesse na comunidade científica devido ao seu potencial terapêutico, especialmente pela diversidade de seus mecanismos de ação, que diferem dos tradicionais agentes citotóxicos. Pesquisas subsequentes revelaram que certos componentes dos óleos essenciais, em particular os monoterpenos, demonstram influência significativa no metabolismo do mevalonato, uma via bioquímica fundamental que desempenha um papel importante na supressão de tumores. (EDRIS, 2007).

A presença de *Staphylococcus aureus*, uma bactéria gram-positiva do grupo dos cocos, na microbiota humana pode ser tanto benéfica quanto prejudicial. Essa bactéria é responsável por uma ampla gama de infecções, que variam de casos simples, como espinhas, a doenças mais graves, como pneumonia. A capacidade patogênica de *Staphylococcus aureus* se deve à sua habilidade de adquirir genes que promovem a formação de biofilmes, a produção de toxinas e, principalmente, a resistência a antimicrobianos. Diante desse cenário, a busca por alternativas eficazes para combater esse patógeno torna-se crucial. Nesse contexto, muitos óleos essenciais e seus compostos têm demonstrado notável eficácia na inibição do crescimento de microrganismos. Esse efeito antimicrobiano é resultado da interferência na permeabilidade da membrana citoplasmática, afetando sistemas enzimáticos e componentes celulares. Como consequência, essa interferência pode levar à destruição ou inativação do material genético da bactéria, além de provocar a lise da parede celular. Um exemplo notável desses óleos com propriedades an-

timicrobianas é o óleo de tomilho (*Thymus vulgaris*), que se destaca por sua atividade contra *Staphylococcus aureus*.). (FANIN et al., 2020; SANTOS et al., 2007; RASHEED, 2021).

### 1.3 Extração do óleo essencial

Diversas abordagens tradicionais podem ser empregadas para a amostragem da fração volátil, incluindo técnicas como destilação a vácuo, destilação a vapor, hidrodestilação, extração de solvente off-line seguida de destilação, extração simultânea por destilação, extração com fluidos supercríticos, bem como extração assistida por micro-ondas e hidrodestilação com suporte de micro-ondas, além da amostragem de headspace com alta capacidade de concentração. É importante enfatizar que apenas os produtos obtidos por hidrodestilação ou destilação a vapor podem ser classificados como óleos essenciais. Para garantir a qualidade do material, recomenda-se que ele esteja fresco e, se necessário, congelado com nitrogênio líquido, seguido de trituração em um almofariz de porcelana. Essa abordagem assegura a preservação da integridade do óleo dentro da matriz vegetal (TELASCREA et al., 2008, RUBIOLO et al., 2010; DE OLIVEIRA JÚNIOR et al., 2020).

### 1.4 Hidrodestilação

Tradicionalmente, os óleos essenciais são extraídos por meio de técnicas de destilação, um método que foi introduzido por Clevenger em 1928. Teoricamente, as recuperações dos compostos voláteis podem ser completas se a destilação for realizada por um tempo infinito. Contudo, podem ocorrer a formação de artefatos ou substâncias resultantes de degradação térmica ou oxidativa, as quais são geralmente aceitas como parte desse processo convencional. Os dispositivos e as metodologias utilizadas para a obtenção de óleos essenciais são bem documentados e estão descritos em diversas farmacopeias. De acordo com a Farmacopeia Brasileira (Vol. 02), a destilação deve ser realizada em um balão de 1 litro, contendo 500 mL de água como líquido de destilação. A planta deve ser previamente moída e adicionada ao balão juntamente com 100 mL de água. Em seguida, inicia-se a hidrodestilação utilizando 50 g da planta durante um período de 4 horas. Após a extração, o óleo essencial deve ser armazenado a -18°C em frascos de vidro âmbar para evitar a fotodegradação e protegido em ambiente com nitrogênio (N<sub>2</sub>) até que seja realizada a análise. (BRASIL, 2010; TELASCREA et al., 2008; DE OLIVEIRA JÚNIOR et al., 2020).

O processo de destilação para extração de óleos essenciais pode ser realizado por meio de três variações principais: hidrodestilação, destilação com água e vapor, e destilação a vapor. Na hidrodestilação, a planta aromática é colocada em contato direto com a água fervente, podendo estar completamente submersa ou flutuando na superfície. Na destilação com água e vapor, o material a ser destilado é posicionado sobre uma placa perfurada ou em uma rede, ficando suspenso logo acima do fundo do destilador. Por outro lado, na destilação a vapor, a água não é mantida na parte inferior do equipamento; em vez disso, o vapor é introduzido através de

serpentinhas. Além disso, a destilação de óleos essenciais pode exigir a fragmentação do material vegetal para facilitar a liberação do óleo contido nos tricomas glandulares da planta. O grau de fragmentação necessário varia conforme a estrutura do material: flores, folhas e partes finas e não fibrosas geralmente não necessitam de fragmentação, enquanto sementes devem ser totalmente esmagadas. Raízes, caules e materiais lenhosos precisam ser cortados em pedaços menores para otimizar o processo de extração. (BUSATO et al., 2014; RASHEED, 2021).

### 1.5 *Casearia sylvestris*

A *Casearia sylvestris* é uma planta comum na flora brasileira e sua morfologia apresenta características distintas que facilitam sua identificação. As folhas são simples, ovais e apresentam margens serrilhadas. Elas podem medir entre 5 e 20 cm de comprimento e de 3 a 10 cm de largura (REZENDE et al., 2011). O tronco da planta é reto e pode medir até 10 metros de altura, mas normalmente não ultrapassa os 4 metros (SOUSA et al., 2018). A casca do tronco é lisa e cinza, podendo se soltar com facilidade (LIMA et al., 2012)

As flores da planta são pequenas e brancas, agrupadas em inflorescências que surgem nas axilas das folhas. Elas são hermafroditas e polinizadas por insetos, especialmente abelhas (SILVA et al., 2019). Os frutos da planta são pequenos, redondos e vermelhos quando maduros, medindo cerca de 1 cm de diâmetro. Eles contêm uma única semente envolta por uma camada fibrosa e esponjosa (LIMA et al., 2012; ).

A morfologia da *Casearia sylvestris* pode variar em função das condições ambientais em que a planta se encontra. Em locais com maior disponibilidade de água, as folhas tendem a ser maiores e mais largas, enquanto em locais mais secos, as folhas são menores e mais estreitas (SOUSA et al., 2018).

Conhecida também como Guaçatonga, essa planta apresenta diversas propriedades medicinais, como atividade anti-inflamatória, antioxidante, antitumoral, cicatrizante e antimicrobiana. Além disso, ela tem sido usada na medicina popular para tratar várias doenças, como problemas de pele, dores articulares e inflamações., (SANTOS et al., 2006; PEREIRA et al., 2019)

A atividade anti-inflamatória da *Casearia sylvestris* é uma das suas propriedades mais estudadas. A planta apresenta uma grande quantidade de compostos ativos com atividade anti-inflamatória, ácidos oleanólicos e ursólicos, além de outros compostos fenólicos. Estudos pré-clínicos e clínicos mostraram que a planta pode ser usada para tratar várias doenças inflamatórias, como artrite reumatoide e asma. (PEREIRA et al., 2019)

O estudo da atividade antitumoral também tem se destacado; em pesquisas pré-clínicas e clínicas a planta apresentou efeitos antiproliferativos em células cancerígenas de mama, próstata e cólon. Além disso, a planta apresentou efeitos antioxidantes que ajudam a proteger as células do dano oxidativo o que podem também prevenir o desenvolvimento de doenças crônicas

e cardiovasculares. (SANTOS et al.,2006)

## 2. JUSTIFICATIVA

Como discutido na introdução da pesquisa são muitas as aplicações que os O.E podem apresentar; A *Casearia sylvestris* tem sido alvo de estudo principalmente por suas propriedades medicinais, obtendo resultados satisfatórios como antiproliferativos em células cancerígenas de mama, próstata e cólon. Motivados pelas diversas propriedades que a *Casearia sylvestris* pode apresentar, esse projeto de pesquisa pretende estudar os principais componentes do óleo essencial extraído das folhas, flores e frutos dessa espécie, traçando um perfil comparativo entre eles.

## 3. OBJETIVOS

A presente Iniciação Científica teve por objetivo geral e objetivos específicos:

### 3.1 Objetivo Geral

O objetivo deste estudo foi extrair os óleos essenciais de folhas, flores e frutos da *Casearia sylvestris* coletados na cidade de Araraquara, identificando os seus principais componentes por técnicas cromatográficas, como espectrometria de massas e cálculos de índices de retenção, além de analisar as diferenças observadas em seus perfis cromatográficos

### 3.2 Objetivos Específicos

- Obter folhas, flores e frutos de *Casearia sylvestris*;
- Tratar o material vegetal e prepará-lo para as extrações;
- Extrair o óleo essencial dos materiais vegetais por hidrodestilação com aparato Clevenger;
- Extrair e identificar os principais componentes das flores de *Casearia sylvestris*
- Extrair e identificar os principais componentes das folhas de *Casearia sylvestris*
- Extrair e identificar os principais componentes dos fruto de *Casearia sylvestris*
- Traçar uma comparação entre os óleos essenciais obtidos da flor, folha e fruto de *Casearia sylvestris*

## 4. MATERIAIS E MÉTODOS

Neste tópico discorre-se sobre os materiais e métodos que serão usados na pesquisa que

através de um levantamento de referências bibliográficas, livros, teses, artigos científicos nacionais e internacionais, foi possível executar a elaboração da proposta científica.

#### 4.1 Aquisição da planta

Com o apoio do Prof. Dr. Alberto José Cavalheiro do Instituto de Química de Araraquara IQ – Unesp, Departamento de Química Orgânica no Núcleo de Bioensaios, Biossíntese e Eco-fisiologia de Produtos Naturais (NuBBE), um indivíduo plantado dentro do IQ permitiu ao projeto obter folhas, frutos e flores de *Casearia sylvestris*. Foram coletadas Em frente ao prédio do NuBBE, durante os meses de julho e outubro de 2023.

Obteve-se cerca de 300 g de folhas, 50 g de flores e 102 g de frutos. Foi dada prioridade aos materiais vegetais íntegros e saudáveis. O material coletado foi identificado separadamente e armazenado em freezer (-18 °C), aguardando as próximas etapas de pesquisa.

#### 4.2 Extração do óleo essencial

O material vegetal coletado foi separado para as extrações por hidrodestilação usando o aparato de Clevenger.

Foram usados 44,5 g de flores extraídas através de processo com o aparato Clevenger. O material foi pesado em balança de precisão (Modelo Bel S2202H). Esse material foi transferido para um balão de fundo redondo de 2 litros e complementadas com água ultrapura até atingir cerca de 60 ~ 70% do volume do balão. O sistema foi aquecido utilizando uma manta aquecedora (Modelo Fisatom 202) e foi acoplado a um sistema de resfriamento para condensar o vapor (condensador tipo Clevenger), utilizando um banho ultra termostático (Marca Nova Ética) ajustado para 3°C. Foi estabelecido que cada extração seria realizada por um período de 1 hora.

Foram usados 65,8 g de folhas para a segunda extração de óleo essencial utilizando o processo de hidrodestilação por Clevenger. As folhas foram moídas com auxílio de um liquidificador e, posteriormente, transferidas para um balão de fundo redondo de 1 litro e complementados com água ultrapura até atingir cerca de 60 ~ 70% do volume do balão. O sistema foi aquecido utilizando uma manta aquecedora (Modelo Fisatom 202). Para condensar o vapor, foi acoplado um sistema de resfriamento ao condensador tipo Clevenger com recipiente e água e gelo. A extração durou cerca de 1 hora.

Cerca de 10,2 g de frutos foram selecionados para a terceira extração do óleo essencial, que também foi realizada utilizando o sistema de extração tipo Clevenger. O material vegetal foi macerado com o auxílio de um almofariz e pistilo. O material macerado foi transferido para um balão de fundo redondo de 1 litro e complementado com água ultrapura até atingir 60 ~ 70% do volume do balão. O sistema, semelhante ao da extração do óleo essencial das folhas, também foi aquecido utilizando uma manta aquecedora (modelo Fisatom 202) e acoplado ao sistema de resfriamento utilizando um recipiente contendo água e gelo. A extração foi realizada por cerca

de 1 hora

As extrações dos O.E das flores foram realizadas no Instituto de Química de Araraquara – Unesp, Departamento de Química Orgânica no Núcleo de Bioensaios, Biossíntese e Ecofisiologia de Produtos Naturais (NuBBE) no dia 18 de julho de 2023. Já as extrações das folhas e frutos foram realizadas no Centro Universitário Sagrado Coração nos dias 8 de janeiro de 2024 e 5 de março de 2024 respectivamente.

### **4.3 Preparo das amostras de óleo essencial**

Após a extração, os óleos essenciais foram retirados com muito cuidado pipetas de vidro do tipo Pasteur e transferidos para frascos eppendorf de Teflon®, que foram devidamente identificados e armazenados em um freezer (-18°C) até serem enviados para análise por Cromatografia Gasosa, acoplada à Espectrometria de Massa, e para o cálculo dos índices de retenção. As quantidades de óleos essenciais obtidas em cada extração foram registradas para avaliar o rendimento.

### **4.4 Análises por Cromatografia Gasosa (CG) e por Espectrometria de Massas (CG-EM)**

As análises foram realizadas utilizando o equipamento modelo SHIMADZU QP-5000, um espectrômetro de massa acoplado a um sistema cromatográfico a gás equipado com uma coluna capilar de sílica apolar fundida DB-5 (J & W Scientific) com dimensões de 30 m x 0,25 mm e espessura de 0,25 µm. A temperatura do forno foi programada de 60 a 240°C, com um gradiente de temperatura de 3°C por minuto. As temperaturas do injetor e do detector foram de 240°C e 270°C, respectivamente, de acordo com a literatura (ADAMS, 2012). O gás carreador utilizado foi hélio, a uma vazão de 1,0 mL min<sup>-1</sup> (volume constante). Os espectros de massa foram obtidos a 70 eV no modo de íons totais (TIC). Foram injetados manualmente 1,0 µL de cada amostra em concentrações conhecidas no modo splitless (20:1).

As análises foram gentilmente realizadas no Instituto Agrônomo de Campinas (IAC) - Fazenda Santa Elisa, no Centro de Recursos Genéticos Vegetais, em colaboração com a Profa. Dra. Márcia Ortiz Mayo Marques. As análises dos resultados (cromatogramas e espectros) foram realizadas na UniSagrado de Bauru após o recebimento dos dados.

### **4.5 Identificação dos componentes do óleo essencial**

As identificações dos componentes do óleo essencial foram realizadas utilizando os espectros de massas obtidos de cada pico cromatográfico, os quais foram comparados com dados teóricos da biblioteca NIST 62 (MCLAFFERTY e STAUFFER, 1989; ADAMS, 2012; ADAMS, 1995). Os índices de retenção foram determinados em relação aos tempos de retenção de uma série de padrões de n-alcenos (C10 a C30), medidos nas mesmas condições cromatográficas descritas anteriormente, e comparados com valores publicados.

Para o cálculo do índice de retenção, foi utilizada a equação 1 (VAN DEN DOOL e KRATZ, 1963):

$$I = [(T's - T'Cn) / (T'Cn+1 - T's)100] + 100.Cn \quad (\text{Equação 1})$$

Onde:

I = índice de retenção

T's = tempo de retenção ajustado da substância analisada;

T'Cn = tempo de retenção ajustado do n-alcano que elui antes da substância;

T'Cn+1 = tempo de retenção ajustado do n-alcano que elui após a substância;

T'Cn+1 = tempo de retenção ajustado do n-alcano que elui após a substância;

Os dados foram gentilmente fornecidos pelo Instituto Agrônomo de Campinas (IAC) - Fazenda Santa Elisa, no Centro de Recursos Genéticos Vegetais, em colaboração com a Profa. Dra. Márcia Ortiz Mayo Marques. As análises dos resultados, incluindo os cálculos dos índices de retenção, foram realizadas no Centro Universitário Sagrado Coração de Bauru.

## 5. RESULTADOS

A seguir serão apresentados os resultados desta pesquisa

### 5.1 Material Vegetal

As coletas das flores, frutos e folhas da *Casearia sylvestris* foram feitas durante as manhãs entre os meses de julho e outubro de 2024 na cidade de Araraquara/SP.

Na Figura 1 pode-se visualizar a imagem do indivíduo de *Casearia sylvestris* utilizado como base neste estudo, onde as amostras vegetais foram coletadas. Em sequência serão apresentadas na Figura 2 as folhas e flores coletadas, na Figura 3 somente as flores, na Figura 4 somente as folhas e na Figura 5 os frutos.

Figura 1: Local de coleta das amostras da árvore Casearia sylvestris.



Fonte: elaborada pelo autor

Figura 2: Folhas e flores da Casearia sylvestris



Fonte: elaborado pelo autor

Figura 3: Amostragem das flores coletadas de *Casearia sylvestris*.



Fonte: elaborada pelo autor

Figura 4: Amostragem das folhas coletadas de *Casearia sylvestris*.



Fonte: elaborada pelo autor

Figura 5: Amostragem dos frutos coletados de *Casearia sylvestris*.



Fonte: elaborada pelo autor

As coletas foram feitas dando prioridade aos materiais vegetais íntegros e saudáveis exigindo a separação de materiais danificados e/ou com a presença de fungos, além disso, foram feitas várias coletas em vários pontos do vegetal para garantir a máxima uniformidade na amostragem. Após a coleta, as amostras foram armazenadas em sacos plásticos identificados e reservados em refrigeradores. O deslocamento do material sempre ocorreu com isopores com gelo para manter a conservação do material para as próximas etapas da pesquisa.

## 5.2 Extração dos óleos essenciais.

Abaixo discorre-se sobre as extrações de óleo essencial realizadas até a presente etapa de pesquisa.

### 5.2.1 Extração dos óleos essenciais das flores de *Casearia sylvestris*

O óleo essencial das flores da *Casearia sylvestris* foi obtido a partir da extração por hidrodestilação por Clevenger, realizada no dia 18 de julho de 2023 no Instituto de Química de Araquara - Unesp.

Para a extração utilizando o sistema Clevenger foram pesadas 44,5 g de amostra com o auxílio de uma balança de precisão (Modelo Bel S2202H). Em seguida o material vegetal foi transferido para um balão de fundo redondo de 2 litros e complementadas com água ultrapura até atingir cerca de 60 ~ 70% do volume do balão, como ilustra a Figura 6.

O sistema foi formado por um balão de fundo redondo, Clevenger modificado, manta de aquecimento e pelo sistema de resfriamento, Figura 7.

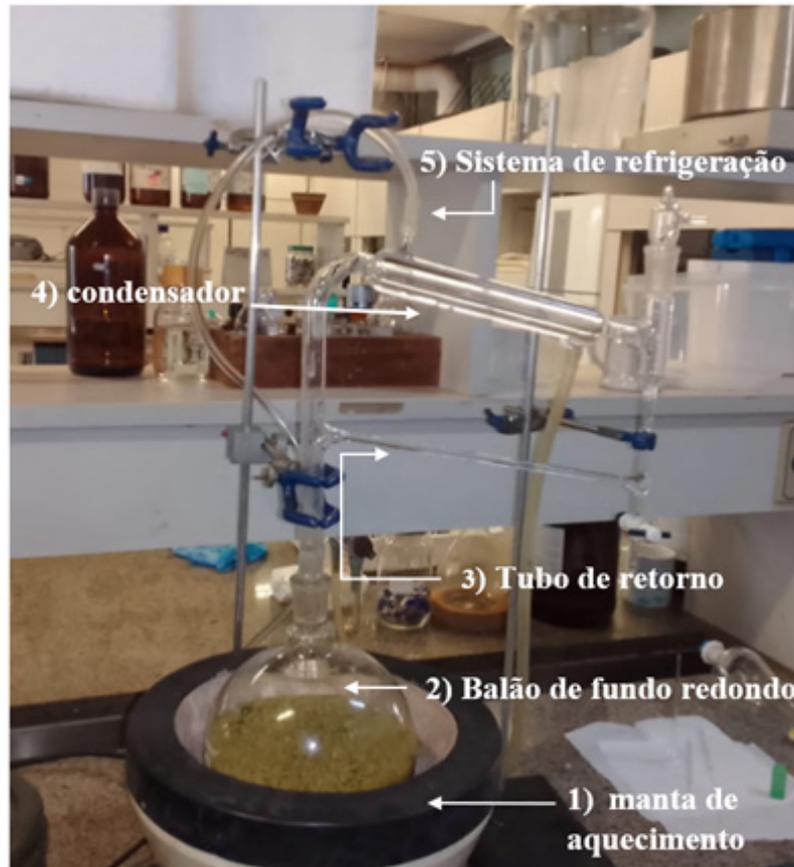
O sistema Clevenger é um dos aparatos mais utilizados para extrações de óleos essenciais, nessa análise foi utilizado o aparelho Clevenger modificado, isso é, possui trap com torneira e condensador reto formando uma peça única.

Figura 6: Amostra das flores em balão de fundo redondo para extração por Clevenger.



Fonte: elaborado pelo autor

Figura 7: Sistema de extração das flores por Clevenger.



Fonte: elaborado pelo autor

### 5.2.2 Extração dos óleos essenciais das folhas de *Casearia sylvestris*

A hidrodestilação realizada com as folhas foi realizado com o sistema Clevenger convencional. Foram pesadas 65,8 g de folhas que foram trituradas em liquidificador. Posteriormente, a amostra foi transferida para um balão de fundo redondo de 1 litro e foram complementados com água ultrapura até atingir cerca de 60 ~ 70% do volume do balão como mostra a Figura 10. O sistema foi formado por um balão de fundo redondo, Clevenger convencional, manta de aquecimento e pelo sistema de resfriamento como mostra a Figura 11



Fonte: elaborado pelo autor

Figura 11. Sistema de extração por Clevenger convencional.



Fonte: elaborado pelo autor

### 5.2.3 Extração dos óleos essenciais dos frutos de *Casearia sylvestris*

A hidrodestilação realizada com os frutos foi feita também com o sistema Clevenger convencional. Foram pesadas 10,2 g de amostras, as quais foram maceradas com o auxílio de um almofariz e pistilo, conforme mostra a Figura 12. A maceração foi importante para expor o óleo essencial que fica depositado dentro das células do material vegetal.

Figura 12: Forma de maceração dos frutos



Fonte: elaborado pelo autor

O material macerado foi transferido para um balão de fundo redondo de 1 litro e complementado com água ultrapura até atingir cerca de 60 ~ 70% do volume do balão.

O sistema, semelhante ao da extração do óleo essencial das folhas, também foi aquecido utilizando uma manta de aquecimento (modelo Fisatom 202) e acoplado ao sistema de resfriamento utilizando um recipiente com água e gelo, conforme mostra a Figura 13.

Figura 13: Sistema de extração do O.E do fruto por Clevenger convencional.



Fonte: elaborado pelo autor

### 5.3 Preparo das amostras de óleo essencial

Visualmente não foi observada a presença de gotas de óleos essenciais na extração dos frutos. Desta forma, optou-se por recolher a água do sistema condensador tipo Clevenger, onde pode-se obter uma solução transparente chamada de hidrolato. Um hidrolato (também conhecido como hidrossol, água floral, água aromática ou água de ervas) é um destilado que é um produto da condensação obtido após um procedimento de isolamento por destilação de óleo essencial. Os hidrolatos são suspensões coloidais compostas por uma fase contínua, a água destilada, e uma fase dispersa, a emulsão de gotículas de óleo essencial e componentes solúveis em água, nomeadamente compostos contendo oxigênio.

Foram recolhidos os hidrolatos de todas as extrações. As amostras de óleos e de hidrolatos foram armazenados em fracos identificados e em freezer -18°C, aguardando o envio para o Instituto Agrônômico de Campinas – IAC.

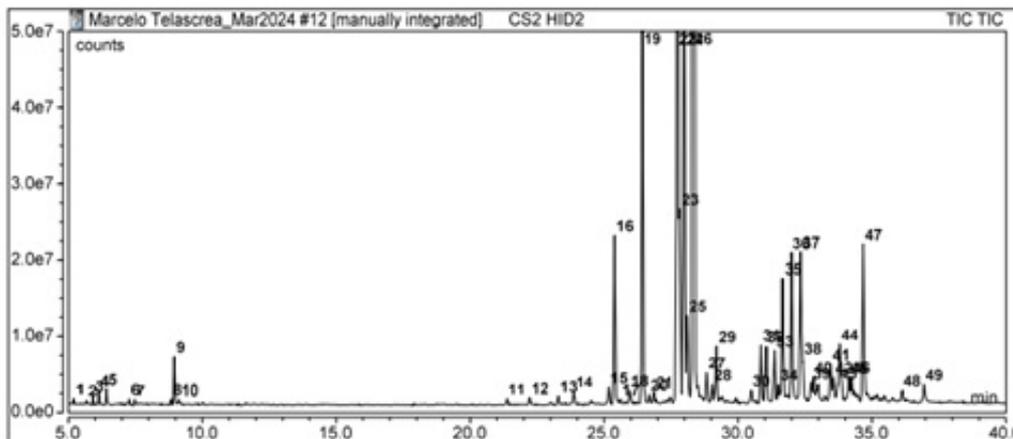
#### 5.4 Análise por Cromatografia gasosa

Serão apresentados os cromatogramas obtidos de cada amostra e as tabelas com as identificações das substâncias encontradas. O Tempo de Retenção (TR), indicado nas tabelas, representa o tempo necessário para que cada composto alcance o detector durante a análise cromatográfica. O Índice de Retenção Linear Experimental (IRL calc.) foi obtido através da injeção de uma série homóloga de n-alcanos (C9-C24) e calculado com base na equação de Van den Dool e Kratz ([https://doi.org/10.1016/S0021-9673\(01\)80947-X](https://doi.org/10.1016/S0021-9673(01)80947-X)). Para os casos em que o índice de retenção linear não estava disponível, foi registrado como s/ik. Finalmente, as substâncias marcadas como “ni” foram aquelas que não puderam ser identificadas

#### 5.5 Análise cromatográfica dos Hidrolatos das flores .

Como apresentado anteriormente, após o processo de hidrodestilação das flores , não foi possível observar a formação de uma segunda fase, óleo essencial aparente , entretanto, o hidrolato formado foi coletado e analisado pela técnica de Cromatografia Gasosa (Figura 14).

Figura 14. Cromatograma obtido do Hidrolato das flores de Casearia Sylvestris



No.	Peak Name	Retention Time min	Area counts*min	Height counts	Relative Area %	Relative Height %	Amount
1	Component 1	5.193	13545.388	546917.958	0.02	0.06	n.a.
2	Component 2	5.667	13858.183	463455.304	0.03	0.05	n.a.
3	Component 3	5.922	41593.748	1082636.566	0.08	0.12	n.a.
4	Component 4	6.145	65966.776	1827730.605	0.12	0.20	n.a.
5	Component 5	6.425	79712.366	2040420.485	0.15	0.22	n.a.
6	Component 6	7.273	24504.541	671093.915	0.04	0.07	n.a.
7	Component 7	7.484	20699.999	573666.382	0.04	0.06	n.a.
8	Component 8	8.841	20996.262	638701.036	0.04	0.07	n.a.
9	Component 9	8.955	272214.268	6175707.252	0.50	0.68	n.a.
10	Component 10	9.142	21376.811	548728.930	0.04	0.06	n.a.
11	Component 11	21.375	25864.164	642524.906	0.05	0.07	n.a.
12	Component 12	22.206	39415.862	795889.196	0.07	0.09	n.a.
13	Component 13	23.295	60427.374	1074785.550	0.11	0.12	n.a.
14	Component 14	23.869	77870.537	1504854.686	0.14	0.16	n.a.
15	Component 15	25.174	109790.939	2055310.556	0.20	0.23	n.a.
16	Component 16	25.385	1295666.712	21960805.178	2.37	2.40	n.a.
17	Component 17	25.607	15362.372	369850.865	0.03	0.04	n.a.
18	Component 18	25.958	67605.633	1329695.805	0.12	0.15	n.a.
19	Component 19	26.429	2759157.609	49843256.604	5.05	5.46	n.a.
20	Component 20	26.681	41215.524	858560.426	0.08	0.09	n.a.
21	Component 21	26.868	56047.457	1116166.752	0.10	0.12	n.a.
22	Component 22	27.734	10957826.781	180368775.271	20.06	19.75	n.a.
23	Component 23	27.817	1180579.166	24580827.308	2.16	2.69	n.a.
24	Component 24	27.985	3916892.799	65844681.293	7.17	7.21	n.a.
25	Component 25	28.105	451658.178	8411635.809	0.83	0.92	n.a.
26	Component 26	28.336	24630664.367	400289085.736	45.10	43.83	n.a.
27	Component 27	28.821	153691.580	3013445.773	0.28	0.33	n.a.
28	Component 28	29.036	75993.694	1671230.528	0.14	0.18	n.a.
29	Component 29	29.198	410551.672	6682384.393	0.75	0.73	n.a.
30	Component 30	30.488	75477.052	1368010.466	0.14	0.15	n.a.
31	Component 31	30.852	356592.062	6791878.588	0.65	0.74	n.a.
32	Component 32	31.052	318228.879	6037474.705	0.58	0.66	n.a.
33	Component 33	31.364	316512.172	5729427.099	0.58	0.63	n.a.
34	Component 34	31.501	67824.491	1475408.486	0.12	0.16	n.a.
35	Component 35	31.664	871120.425	14989888.208	1.60	1.64	n.a.
36	Component 36	31.995	1270250.384	19178538.019	2.33	2.10	n.a.
37	Component 37	32.335	1271810.878	19244295.711	2.33	2.11	n.a.
38	Component 38	32.404	275695.974	5257352.596	0.50	0.58	n.a.
39	Component 39	32.734	106475.614	1848216.403	0.19	0.20	n.a.
40	Component 40	32.822	127537.184	2329265.435	0.23	0.26	n.a.
41	Component 41	33.462	255666.391	4312533.575	0.47	0.47	n.a.
42	Component 42	33.568	175773.049	2648278.959	0.32	0.29	n.a.
43	Component 43	33.721	69699.867	1654807.454	0.13	0.18	n.a.
44	Component 44	33.792	573907.718	6828721.731	1.05	0.75	n.a.
45	Component 45	34.139	80302.484	1895590.684	0.15	0.21	n.a.
46	Component 46	34.234	84732.439	1908767.410	0.16	0.21	n.a.
47	Component 47	34.671	1277936.570	20109312.642	2.34	2.20	n.a.
48	Component 48	36.137	41241.081	952179.277	0.08	0.10	n.a.
49	Component 49	36.935	97202.245	1781439.358	0.18	0.20	n.a.
<b>Total:</b>			<b>##### 913324211.872</b>		<b>100.00</b>	<b>100.00</b>	

Fonte: elaborado pelo autor

A análise revelou a presença de 49 componentes no hidrolato de Casearia - Flores, dos quais 22 não puderam ser identificados pela metodologia aplicada. Apenas 85,82% dos componentes foram identificados, conforme detalhado na Tabela 1 a seguir

Tabela 1. Composição Química (% Relativa) do Hidrolato de Casearia - Flores

Pico	TR	IRL cal.	IRL lit.	Substância Identificada	%Relativa
1	5,193	909	-	ni	0,02
2	5,667	926	-	ni	0,03
3	5,922	936	932	a-pinene	0,08
4	6,145	944	-	ni	0,12
5	6,425	954	-	ni	0,15
6	7,273	984	974	b-pinene	0,04
7	7,784	1002	989	myrcene	0,04
8	8,841	1030	1022	ortho-cymene	0,04
9	8,955	1033	1024	limonene	0,5
10	9,142	1039	1026	1,8-cineole	0,04
11	21,375	1335	1335	d-elemene	0,05
12	22,206	1354	1350	a-longipinene	0,07
13	23,295	1380	-	ni	0,11
14	23,869	1393	1389	b-elemene	0,14
15	25,174	1425	1417	( E ) - -caryophylle- ne	0,2
16	25,385	1430	-	ni	2,37
17	25,607	1436	1430	b-copaene	0,03
18	25,958	1444	1439	aromadene	0,12
19	26,429	1456	1450*	(E)-b-farnesene	5,05
20	26,681	1462	1452	a-humulene	0,08
21	26,868	1466	1464	9-epi-(E)- -caryophylle- ne	0,1
22	27,734	1488	1480	germacrene D	20,06
23	27,817	1490	1481	g-himachalene	2,16
24	27,985	1494	-	ni	7,17
25	28,105	1497	1489	b-selinene	0,83

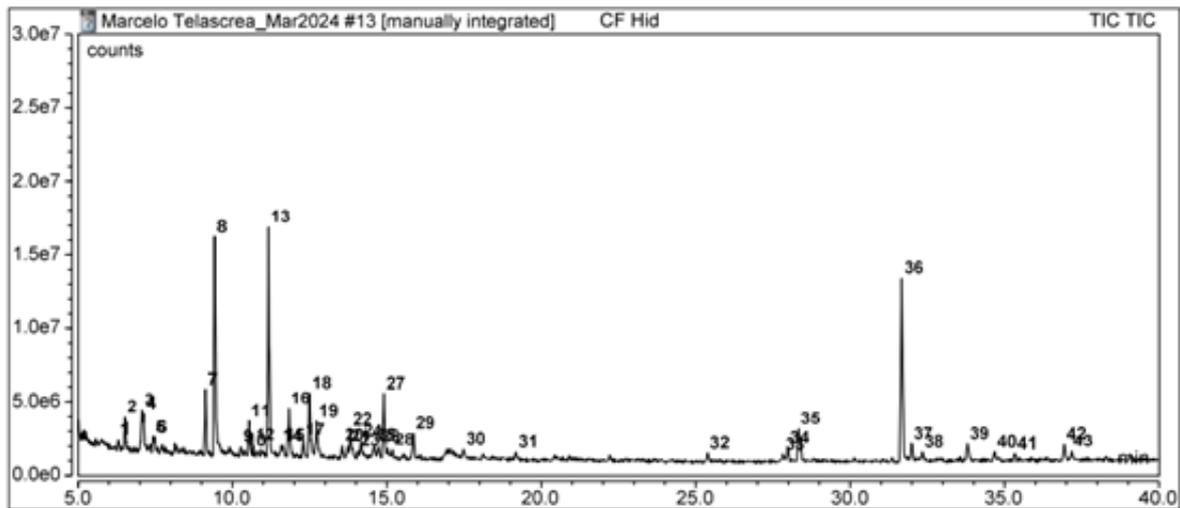
26	28,336	1502	1500	biciclogermacrene	45,1
27	28,821	1515	1508	germacrene A	0,28
28	29,036	1520	1513	g-cadinene	0,14
29	29,198	1524	1522	d-cadinene	0,75
30	30,488	1557	-	ni	0,14
31	30,852	1567	1561	(E)-nerolidol	0,65
32	31,052	1572	-	ni	0,58
33	31,364	1580	-	ni	0,58
34	31,501	1583	1565	(3Z)-hexenyl benzoate	0,12
35	31,664	1587	1577	spathulenol	1,6
36	31,995	1596	-	ni	2,33
37	32,335	1605	-	ni	2,33
38	32,404	1607	-	ni	0,5
39	32,734	1615	-	ni	0,19
40	32,822	1618	1600	Rosifoliol	0,23
41	33,462	1635	-	ni	0,47
42	33,568	1638	-	ni	0,32
43	33,721	1642	-	ni	0,13
44	33,792	1644	-	ni	1,05
45	34,139	1653	1644	a-muurolol	0,15
46	34,234	1656	-	ni	0,16
47	34,671	1667	-	ni	2,34
48	36,137	1707	-	ni	0,08
49	36,935	1730	-	ni	0,18
Total Identificado	85,82				

Os picos 26, 22, 24, 19 e 16 foram os principais componentes do hidrolato de *Casearia* - Flores, com porcentagens relativas de 45,1%, 20,06%, 7,17%, 5,05% e 2,37%, respectivamente, totalizando 79,75% da composição da amostra. Dentre esses picos majoritários, três foram identificados na literatura: o pico 26 (45,1%) corresponde ao biciclogermacrene, o pico 22 (20,06%) ao germacrene D e o pico 19 (5,05%) ao (E)- $\beta$ -farnesene. Os picos 24 e 16, que representam 9,54% da composição do hidrolato, são de substâncias não identificadas na literatura consultada.

## 5.6 Análise cromatográfico do Hidrolato das folhas

Como apresentado anteriormente, após a amostra passar pela hidrodestilação, o hidrolato formado foi coletado e analisado pela técnica de Cromatografia Gasosa (Figura 15)

Figura 15. Cromatograma obtido do Hidrolato das folhas de Casearia Sylvestris



Report-Padrao\_MS\_09-03-2022/Peak Analysis

Chromeleon (c) Dionex  
Version 7.2.10.23925

Peak Results							
No.	Peak Name	Retention Time min	Area counts*min	Height counts	Relative Area %	Relative Height %	Amount
1	Component 1	6.303	17435.263	575434.872	0.37	0.63	n.a.
2	Component 2	6.520	83574.782	2027985.160	1.77	2.23	n.a.
3	Component 3	7.068	162507.519	2573450.469	3.44	2.83	n.a.
4	Component 4	7.127	75075.254	2274104.874	1.59	2.50	n.a.
5	Component 5	7.444	33169.796	821243.785	0.70	0.90	n.a.
6	Component 6	7.486	19220.379	705151.541	0.41	0.78	n.a.
7	Component 7	9.128	178111.876	4182567.804	3.77	4.60	n.a.
8	Component 8	9.425	730116.714	14352633.364	15.45	15.78	n.a.
9	Component 9	10.270	28242.664	580974.394	0.60	0.64	n.a.
10	Component 10	10.389	11280.419	291989.065	0.24	0.32	n.a.
11	Component 11	10.537	89914.327	2056152.874	1.90	2.26	n.a.
12	Component 12	10.670	24264.982	616649.993	0.51	0.68	n.a.
13	Component 13	11.168	744723.318	15238431.469	15.75	16.75	n.a.
14	Component 14	11.576	18028.701	555340.423	0.38	0.61	n.a.
15	Component 15	11.631	27825.362	596403.990	0.59	0.66	n.a.
16	Component 16	11.831	150925.112	3045813.481	3.19	3.35	n.a.
17	Component 17	12.294	56281.329	1132196.326	1.19	1.24	n.a.
18	Component 18	12.493	246600.738	4112720.068	5.22	4.52	n.a.
19	Component 19	12.725	97142.359	2026643.332	2.06	2.23	n.a.
20	Component 20	13.561	52703.374	855253.235	1.11	0.94	n.a.
21	Component 21	13.744	25823.379	525885.852	0.55	0.58	n.a.
22	Component 22	13.813	57763.894	1377372.547	1.22	1.51	n.a.
23	Component 23	14.071	10088.506	278041.033	0.21	0.31	n.a.
24	Component 24	14.162	31200.441	791091.583	0.66	0.87	n.a.
25	Component 25	14.587	27967.160	569944.118	0.59	0.63	n.a.
26	Component 26	14.725	27387.480	570440.890	0.58	0.63	n.a.
27	Component 27	14.900	215769.977	4010939.675	4.56	4.41	n.a.
28	Component 28	15.180	10124.247	345835.505	0.21	0.38	n.a.
29	Component 29	15.858	90767.652	1667232.170	1.92	1.83	n.a.
30	Component 30	17.485	31818.514	518215.443	0.67	0.57	n.a.
31	Component 31	19.176	18480.621	401884.223	0.39	0.44	n.a.
32	Component 32	25.390	25548.899	514068.800	0.54	0.57	n.a.
33	Component 33	27.824	15476.987	349765.203	0.33	0.38	n.a.
34	Component 34	27.985	42975.479	816497.664	0.91	0.90	n.a.
35	Component 35	28.335	193980.002	2176817.813	4.10	2.39	n.a.
36	Component 36	31.667	755748.184	12332617.395	15.99	13.56	n.a.
37	Component 37	31.988	64077.763	1065902.716	1.36	1.17	n.a.
38	Component 38	32.333	19355.361	457819.489	0.41	0.50	n.a.
39	Component 39	33.797	69872.740	1036643.316	1.48	1.14	n.a.
40	Component 40	34.678	22117.821	499320.104	0.47	0.55	n.a.
41	Component 41	35.346	24043.976	477329.176	0.51	0.52	n.a.
42	Component 42	36.936	78263.665	1064500.031	1.66	1.17	n.a.
43	Component 43	37.167	21297.430	494205.834	0.45	0.54	n.a.
<b>Total:</b>			<b>4727094.451</b>	<b>90963511.098</b>	<b>100.00</b>	<b>100.00</b>	

Fonte: elaborado pelo autor

A análise indica a presença de 43 componentes dos quais 22 Não puderam ser identificados pela metodologia escolhida, tendo ao todo 79,47% identificado. Que podem ser visualizados na Tabela 2 a Seguir

Tabela 2. Composição Química (% Relativa) do Hidrolato de Casearia - Folhas

Pico	TR	IRL cal.	IRL lit.	Substância Identificada	%Relativa
1	6,303	961	-	ni	0,37
2	6,520	967	-	ni	1,77
3	7,068	982	952	benzaldehyde	3,44
4	7,127	984	967	hexanoic acid	1,59
5	7,444	992	-	ni	0,70
6	7,486	994	-	ni	0,41
7	9,128	1038	1026	1,8-cineole	3,77
8	9,425	1046	1026	benzyl alcohol	15,45
9	10,270	1069	1060	g-hexalactone	0,60
10	10,389	1072	-	ni	0,24
11	10,537	1076	1067	cis-linalool oxide (furanoid)	1,90
12	10,670	1080	1067*	acetophenone	0,51
13	11,168	1093	1084	trans-linalool oxide (furanoid)	15,75
14	11,576	1104	-	ni	0,38
15	11,631	1105	-	ni	0,59
16	11,831	1110	-	ni	3,19
17	12,294	1121	s/ik	3-octen-2-ol**	1,19
18	12,493	1126	1116*	Phenylethyl alcohol	5,22
19	12,725	1132	-	ni	2,06
20	13,561	1152	1135	trans-pinocarveol	1,11
21	13,744	1156	1140*	cis-verbenol	0,55
22	13,813	1158	1144	neo-isopulegol	1,22
23	14,071	1164	1149	(3E,6Z)-nonadienol	0,21
24	14,162	1166	-	ni	0,66
25	14,587	1176	1167	octanoic acid	0,59
26	14,725	1179	1170	cis-linalool oxide (pyranoid)	0,58
27	14,900	1184	1173	trans-linalool oxide (pyranoid)	4,56

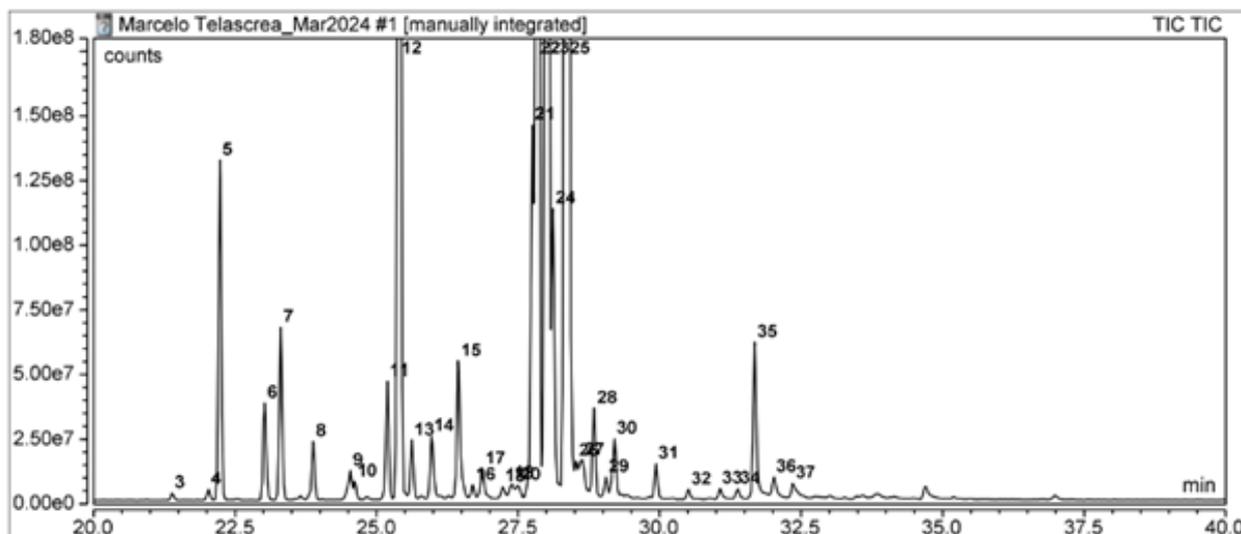
28	15,180	1190	1174	terpinen-4-ol	0,21
29	15,858	1206	1186	a-terpineol	1,92
30	17,485	1244	-	ni	0,67
31	19,176	1283	-	ni	0,39
32	25,390	1430	-	ni	0,54
33	27,824	1490	-	ni	0,33
34	27,985	1494	-	ni	0,91
35	28,335	1502	1500	biciclogermacrene	4,10
36	31,667	1587	1577	spathulenol	15,99
37	31,988	1596	-	ni	1,36
38	32,333	1605	-	ni	0,41
39	33,797	1644	-	ni	1,48
40	34,678	1668	-	ni	0,47
41	35,346	1686	-	ni	0,51
42	36,936	1730	-	ni	1,66
43	37,167	1736	-	ni	0,45
Total Identificado	79,47				

Os Picos 8,13 e 36 foram os majoritários com 15,45%, 15,75% e 15,99% respectivamente, correspondendo a 47,19% da composição da amostra, sendo identificados esses componentes como benzyl alcohol, trans-linalool oxide (furanoid) e spathulenol respectivamente.

### 5.7 Análise cromatográfica do óleos essencial das folhas

Como apresentado anteriormente, após passar pela hidrodestilação, o óleo essencial obtido não foi suficiente para a quantificação, entretanto foi coletado e analisado pela técnica de Cromatografia Gasosa (Figura 16)

Figura 16. Cromatograma obtido do Óleo essencial das folhas de *Casearia Sylvestris*



Peak Results							
No.	Peak Name	Retention Time min	Area counts*min	Height counts	Relative Area %	Relative Height %	Amount
1	Component 1	8.969	171044.842	3972223.567	0.05	0.07	n.a.
2	Component 2	13.888	537778.687	11078628.246	0.15	0.19	n.a.
3	Component 3	21.394	140287.055	2607175.348	0.04	0.05	n.a.
4	Component 4	22.031	207595.763	3915449.445	0.06	0.07	n.a.
5	Component 5	22.235	7641079.563	131059247.587	2.14	2.30	n.a.
6	Component 6	23.021	2370977.283	37542482.468	0.66	0.66	n.a.
7	Component 7	23.307	3993675.161	66753730.008	1.12	1.17	n.a.
8	Component 8	23.881	1372321.628	22428614.685	0.38	0.39	n.a.
9	Component 9	24.537	880368.049	11017876.507	0.25	0.19	n.a.
10	Component 10	24.610	401306.123	6876910.313	0.11	0.12	n.a.
11	Component 11	25.192	2774938.425	45701441.289	0.78	0.80	n.a.
12	Component 12	25.401	38140809.531	642170835.406	10.69	11.26	n.a.
13	Component 13	25.623	1333811.123	22621179.684	0.37	0.40	n.a.
14	Component 14	25.973	1569638.886	23762477.105	0.44	0.42	n.a.
15	Component 15	26.443	3728491.980	53001761.903	1.04	0.93	n.a.
16	Component 16	26.701	240011.109	4480397.170	0.07	0.08	n.a.
17	Component 17	26.878	563860.641	9525271.318	0.16	0.17	n.a.
18	Component 18	27.232	222429.181	3662621.428	0.06	0.06	n.a.
19	Component 19	27.390	362863.569	4636874.638	0.10	0.08	n.a.
20	Component 20	27.503	354587.638	4329801.234	0.10	0.08	n.a.
21	Component 21	27.754	7211549.204	133934036.626	2.02	2.35	n.a.
22	Component 22	27.843	34986800.468	550424183.122	9.81	9.65	n.a.
23	Component 23	28.013	85715033.219	1419221456.240	24.02	24.89	n.a.
24	Component 24	28.113	5751939.073	102085688.944	1.61	1.79	n.a.
25	Component 25	28.368	#####	2222676740.899	40.90	38.98	n.a.
26	Component 26	28.524	199695.051	4481382.076	0.06	0.08	n.a.
27	Component 27	28.627	794310.356	8362994.379	0.22	0.15	n.a.
28	Component 28	28.843	2030132.251	33306432.958	0.57	0.58	n.a.
29	Component 29	29.053	316121.384	6168053.020	0.09	0.11	n.a.
30	Component 30	29.204	1535323.013	21290986.874	0.43	0.37	n.a.
31	Component 31	29.936	766455.585	13067957.241	0.21	0.23	n.a.
32	Component 32	30.512	161472.484	3182763.527	0.05	0.06	n.a.
33	Component 33	31.067	175977.097	3193876.766	0.05	0.06	n.a.
34	Component 34	31.374	125973.313	2465598.028	0.04	0.04	n.a.
35	Component 35	31.679	3413903.009	56941015.407	0.96	1.00	n.a.
36	Component 36	32.019	377116.007	6283923.037	0.11	0.11	n.a.
37	Component 37	32.357	309432.573	4112032.729	0.09	0.07	n.a.
<b>Total:</b>					<b>100.00</b>	<b>100.00</b>	

Fonte: elaborado pelo autor

A análise indica a presença de 37 componentes dos quais 11 Não puderam ser identificados pela metodologia escolhida, tendo ao todo 63,31% identificado. Que podem ser visualizados na Tabela 3 a Seguir

Tabela 3. Composição Química (% Relativa) do Óleo essencial de Casearia - Folhas

Pico	TR	IRL cal.	IRL lit.	Substância Identificada	%Relativa
1	8,969	1034	1024	limonene	0,05
2	13,888	1159	1148	citronellal	0,15
3	21,394	1335	1335	d-elemene	0,04
4	22,031	1350	1348	a-cubebene	0,06
5	22,235	1355	1350	a-longipinene	2,14
6	23,021	1373	1373	a-ylangene	0,66
7	23,307	1380	-	ni	1,12
8	23,881	1394	1389	b-elemene	0,38
9	24,537	1409	-	ni	0,25
10	24,61	1411	1409	a-gurjunene	0,11
11	25,192	1425	1417	(E)-caryophyllene	0,78
12	25,401	1431		ni	10,69
13	25,623	1436	1430	b-copaene	0,37
14	25,973	1445	1439	aromadendrene	0,44
15	26,443	1456	1450*	(E)-b-farnesene	1,04
16	26,701	1462	1454	a-humulene	0,07
17	26,878	1467	1464	9-epi-(E)-caryophyllene	0,16
18	27,232	1475	-	ni	0,06
19	27,39	1479	1474	selina-4,11-diene	0,1
20	27,503	1482	1475	g-gurjunene	0,1
21	27,754	1488	1480	germacrene D	2,02
22	27,843	1490	1481	g-himachalene	9,81
23	28,013	1494	-	ni	24,02
24	28,113	1497	1489	b-selinene	1,61
25	28,368	1503	1500	biciclogermacrene	40,9
26	28,524	1507	1500	b-himachalene	0,06
27	28,627	1510	-	ni	0,22
28	28,843	1515	1508	germacrene A	0,57
29	29,053	1521	1513	g-cadinene	0,09
30	29,204	1525	1522	d-cadinene	0,43

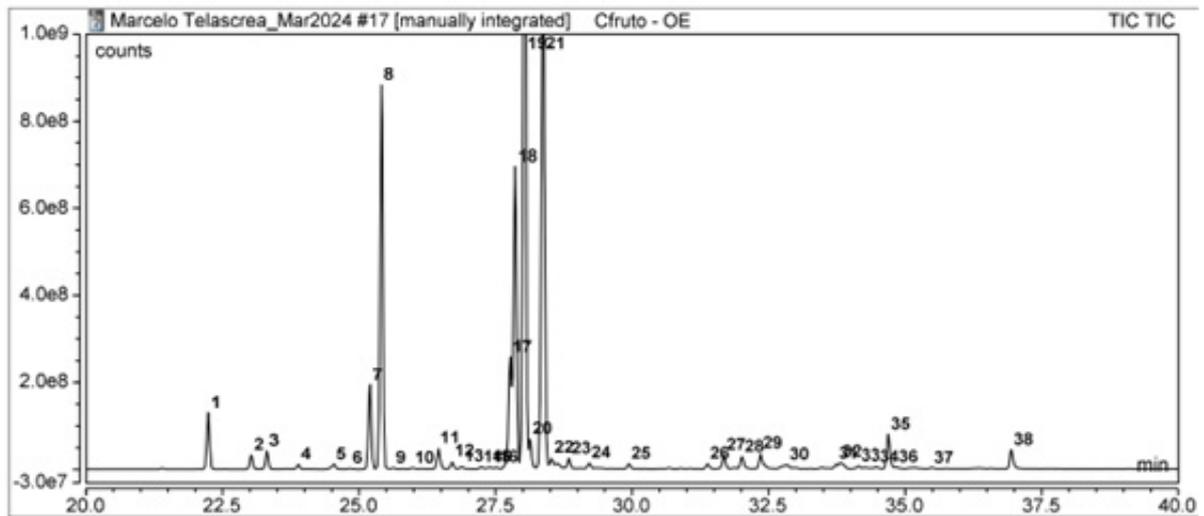
31	29,936	1543	1531	g-vetivenene	0,21
32	30,512	1558	-	ni	0,05
33	31,067	1572	-	ni	0,05
34	31,374	1580	-	ni	0,04
35	31,679	1588	1577	spathulenol	0,96
36	32,019	1596	-	ni	0,11
37	32,357	1605	-	ni	0,09
Total Identificado	63,31				

Os Picos 12, 22, 23 e 25 foram os majoritários com 10,69%, 9,81%, 24,2% e 40,9% respectivamente, correspondendo a 85,42% da composição da amostra. Destes 4 majoritários, 2 puderam ser identificados pela literatura utilizada; pico 22 (9,81%) g-himachalene e pico 25 (40,9%) biciclogermacrene.

### 5.8 Análise cromatográfica do Hidrolato do Fruto

Como apresentado anteriormente, após a hidrodestilação do fruto, não se obteve óleo essencial, entretanto, o hidrolato formado foi coletado e analisado pela técnica de Cromatografia Gasosa (Figura 17).

Figura 17. Cromatograma do hidrolato dos frutos de Casearia Sylvestris



Peak Results							
No.	Peak Name	Retention Time min	Area counts*min	Height counts	Relative Area %	Relative Height %	Amount
1	Component 1	22.234	7436320.566	129360397.884	2.04	2.12	n.a.
2	Component 2	23.027	1938312.576	32254830.005	0.53	0.53	n.a.
3	Component 3	23.310	2532477.455	42026461.786	0.70	0.69	n.a.
4	Component 4	23.891	482736.830	9570836.145	0.13	0.16	n.a.
5	Component 5	24.539	674140.681	9764335.720	0.19	0.16	n.a.
6	Component 6	24.832	62620.094	1306802.264	0.02	0.02	n.a.
7	Component 7	25.200	11505346.978	193342203.171	3.16	3.17	n.a.
8	Component 8	25.412	50249136.551	881910772.106	13.79	14.47	n.a.
9	Component 9	25.623	91244.843	1816727.709	0.03	0.03	n.a.
10	Component 10	25.984	66911.602	1671587.168	0.02	0.03	n.a.
11	Component 11	26.452	3080829.198	46979192.341	0.85	0.77	n.a.
12	Component 12	26.704	1001000.787	17017937.416	0.27	0.28	n.a.
13	Component 13	26.881	221189.480	4396268.145	0.06	0.07	n.a.
14	Component 14	27.235	216757.009	3656935.274	0.06	0.06	n.a.
15	Component 15	27.394	160873.205	2514797.825	0.04	0.04	n.a.
16	Component 16	27.510	137646.102	2458802.670	0.04	0.04	n.a.
17	Component 17	27.771	17717285.842	246071688.749	4.86	4.04	n.a.
18	Component 18	27.859	40467165.587	680349610.120	11.11	11.16	n.a.
19	Component 19	28.038	#####	2030777212.356	31.47	33.32	n.a.
20	Component 20	28.128	2795222.005	55581759.611	0.77	0.91	n.a.
21	Component 21	28.374	86686179.672	1373459542.431	23.80	22.54	n.a.
22	Component 22	28.527	816500.222	16859622.803	0.22	0.28	n.a.
23	Component 23	28.842	1388172.104	22803278.675	0.38	0.37	n.a.
24	Component 24	29.212	452693.331	10005884.267	0.12	0.16	n.a.
25	Component 25	29.944	469837.161	9662974.101	0.13	0.16	n.a.
26	Component 26	31.382	625915.184	10153970.932	0.17	0.17	n.a.
27	Component 27	31.680	1978769.959	31399976.673	0.54	0.52	n.a.
28	Component 28	32.013	1845015.800	26872947.122	0.51	0.44	n.a.
29	Component 29	32.355	2698070.622	34213496.974	0.74	0.56	n.a.
30	Component 30	32.842	972448.899	8570118.043	0.27	0.14	n.a.
31	Component 31	33.735	655954.644	10034526.476	0.18	0.16	n.a.
32	Component 32	33.812	1313530.774	13809810.648	0.36	0.23	n.a.
33	Component 33	34.148	304966.164	5170388.715	0.08	0.08	n.a.
34	Component 34	34.479	167932.948	2969477.505	0.05	0.05	n.a.
35	Component 35	34.691	5043593.789	77327671.099	1.38	1.27	n.a.
36	Component 36	34.840	103357.690	2160430.552	0.03	0.04	n.a.
37	Component 37	35.489	136176.379	2353716.961	0.04	0.04	n.a.
38	Component 38	36.940	3150264.540	43219317.405	0.86	0.71	n.a.
<b>Total:</b>			#####	#####	<b>100.00</b>	<b>100.00</b>	

Fonte: elaborado pelo autor

A análise indica a presença de 38 componentes dos quais 15 Não puderam ser identificados pela metodologia escolhida, tendo ao todo 81,05% identificado. Que podem ser visualizados na Tabela 4 a Seguir

Tabela 4. Composição Química (% Relativa) do Hidrolato de Casearia - Fruto (CFruto óleo)

Pico	TR	IRL cal.	IRL lit.	Substância Identificada	%Relativa
1	22,234	1355	1350	a-longipinene	2,04
2	23,027	1374	1373	a-ylangene	0,53
3	23,310	1380	-	ni	0,70
4	23,891	1394	1389	b-selinene	0,13
5	24,539	1410	1400	b-longipinene	0,19
6	24,832	1417	1407	longifolene	0,02
7	25,200	1426	1417	( E ) - -caryophylle- ne	3,16
8	25,412	1431	-	ni	13,79
9	25,623	1436	1430	b-copaene	0,03
10	25,984	1445	1439	a r o m a d e n - drene	0,02
11	26,452	1456	1450*	(E)-b-farnese- ne	0,85
12	26,704	1462	1454	a-humulene	0,27
13	26,881	1467	1464	9 - e p i - ( E ) - -caryophylle- ne	0,06
14	27,235	1475	-	ni	0,06
15	27,394	1479	1474	s e l i n a - 4 , - 11-diene	0,04
16	27,510	1482	1475	g-gurjunene	0,04
17	27,771	1488	1480	germacrene D	4,86
18	27,859	1491	1481	g-himachale- ne	11,11
19	28,038	1495	-	ni	31,47
20	28,128	1497	1489	b-selinene	0,77
21	28,374	1503	1500	biciclogerma- crene	23,8

22	28,527	1507	1500	b-himachalene	0,22
23	28,842	1515	1508	germacrene A	0,38
24	29,212	1525	1522	d-cadinene	0,12
25	29,944	1543	1531	g-vetivenene	0,13
26	31,382	1580	-	ni	0,17
27	31,680	1588	1577	spathulenol	0,54
28	32,013	1596	-	ni	0,51
29	32,355	1605	-	ni	0,74
30	32,842	1618	1600	rosifoliol	0,27
31	33,735	1642	-	ni	0,18
32	33,812	1644	-	ni	0,36
33	34,148	1653	-	ni	0,08
34	34,479	1662	-	ni	0,05
35	34,691	1668	-	ni	1,38
36	34,840	1672	-	ni	0,03
37	35,489	1689	-	ni	0,04
38	36,940	1730	-	ni	0,86
Total Identificado	81,05				

Os Picos 8,18, 19 e 21 foram os majoritários com 13,79%, 11,11%, 31,47% e 23,8% respectivamente, correspondendo a 80,17% da composição da amostra. Destes 4 majoritários, 2 puderam ser identificados pela literatura utilizada; pico 18 (11,11%) g-himachalene e pico 21 (23,8%) biciclogermacrene

## 6. DISCUSSÃO

A seguir serão discutidos acerca do material vegetal coletado bem como seu preparo, a extração e preparo das amostras e a obtenção dos óleos essenciais e hidrolato de *Casearia sylvestris*.

### 6.1 Material Vegetal

*Casearia sylvestris*, conhecida como Guaçatonga, é uma planta nativa e de fácil identificação. Suas folhas são ovais, com bordas serrilhadas, podendo medir entre 5 e 20 cm de comprimento e de 3 a 10 cm de largura. O tronco é reto e pode atingir até 4 metros de altura; sua casca é cinza e lisa, destacando-se facilmente. (REZENDE et al., 2011; LIMA et al., 2012.)

As flores são pequenas e brancas, agrupadas em cachos nas junções das folhas com o caule. Os frutos são pequenos e vermelhos, com cerca de 1 cm de diâmetro. Têm formato arredondado e, quando maduros, contêm uma única semente, envolta por uma camada fibrosa e esponjosa. Assim como outras espécies vegetais, a *Casearia sylvestris* pode apresentar variações morfológicas dependendo do ambiente; em locais mais úmidos, as folhas podem crescer mais facilmente, tornando-se maiores e mais largas, enquanto em ambientes mais secos adquirem uma estrutura menor e mais estreita. (SOUSA *et al.*, 2018)

De acordo com o Sistema de Classificação de Cronquist, a posição taxonômica de *Casearia sylvestris* obedece à seguinte hierarquia:

- Divisão: Magnoliophyta (Angiospermae)
- Classe: Magnoliopsida (Dicotyledonae)
- Ordem: Violales
- Família: Flacourtiaceae
- Gênero: *Casearia*
- Espécie: *Casearia sylvestris* Swartz.

Ao comparar-se os materiais vegetais *Casearia sylvestris* coletadas e fotografadas em Araquara/SP, na Figura 18, com dados da literatura, na Figura 19, pode-se comprovar morfologicamente que as plantas coletadas estão de acordo com as informações da literatura

Figura 18: Materiais vegetais *Casearia sylvestris* coletadas no interior de São Paulo



Fonte: elaborado pelo autor

Figura 19: *Casearia sylvestris* imagens retiradas da literatura.



Fonte: (CARVALHO, 2006)

## 6.2 Obtenção dos óleos essenciais e hidrolatos da *Casearia sylvestris*.

O método de extração do óleo essencial utilizado foi o aparato Clevenger que é amplamente considerado o mais eficiente. Esse processo permite uma extração limpa, livre de solventes tóxicos e de subprocessos que poderiam resultar em perda de material ou contaminação. Ele desempenha um papel crucial na indústria de aromaterapia, na produção de fragrâncias, na fabricação de produtos cosméticos e na pesquisa científica.

O sistema permite uma extração eficiente de óleos essenciais. Ele utiliza o princípio da destilação por arraste de vapor, onde o material vegetal é aquecido em água, e o vapor resultante carrega os compostos voláteis dos óleos essenciais para cima, onde são condensados e coletados. (CLEVENGER, 1928a).

O método de extração é conhecido por produzir óleos essenciais de alta qualidade e pureza. É uma técnica suave que preserva os compostos voláteis sensíveis presentes nos óleos essenciais, garantindo que o produto mantenha suas propriedades aromáticas e terapêuticas. O extrator Clevenger permite um controle preciso da temperatura durante o processo de destilação, o que é crucial para garantir que os compostos voláteis sejam extraídos sem que sejam degradados pelo calor excessivo. Isso ajuda a preservar a integridade dos óleos essenciais e a evitar a deterioração de seus perfis aromáticos. (CLEVENGER, 1928b).

Ao usar o extrator as empresas podem padronizar seus processos de extração e garantir a consistência e a qualidade dos óleos essenciais produzidos. Isso é essencial para atender aos padrões regulatórios e às expectativas dos consumidores em relação à pureza e eficácia dos produtos. (SANTOS et al., 2004).

Durante as extrações dos materiais vegetais o aroma do óleo essencial foi perceptível em todas as extrações, entretanto, dentre as 3 extrações realizadas somente a das folhas foi possível observar óleo essencial, o qual era tão pouco que não foi possível realizar o cálculo de rendimento. Todas as extrações tiveram o hidrolato coletado e devidamente identificado.

### 6.3 Hidrolatos

O hidrolato é um subproduto gerado durante a extração de óleos essenciais. Durante a extração, o vapor de água atravessa a biomassa vegetal, carregando o óleo essencial bem como outros compostos voláteis. Dessa forma, após a condensação do vapor, ocorre a formação de duas fases uma camada de óleo essencial na superfície e abaixo uma superfície aquosa a qual contém componentes hidrossolúveis da planta, que é o chamado hidrolato. Apesar de muitas vezes ser descartado após o processo, ele também pode conter substâncias aromáticas valiosas, semelhantes às encontradas no óleo essencial. Por se tratar de um subproduto, são poucas as pesquisas realizadas com os hidrolatos, o que torna ainda mais relevante seu estudo. (Castro,2023)

### 6.4 Comparação entre os perfis cromatográficos

A composição química da *Casearia sylvestris* apresenta variações marcantes entre flores, folhas e frutos, refletindo a complexidade de seus extratos. Entre os compostos identificados, alguns se destacam por suas concentrações variáveis e papéis significativos no perfil aromático e nas propriedades dos diferentes extratos

Figura 20. Comparação entre os perfis cromatográficos

Figura 1. Cromatograma obtido do Hidrolato das flores de *Casearia Sylvestris*

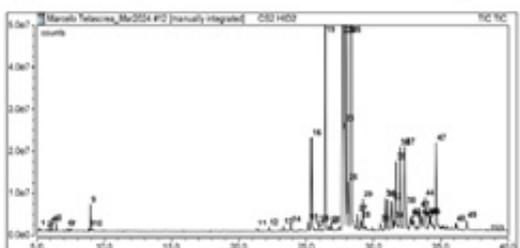


Figura 2. Cromatograma obtido do Hidrolato das folhas de *Casearia Sylvestris*

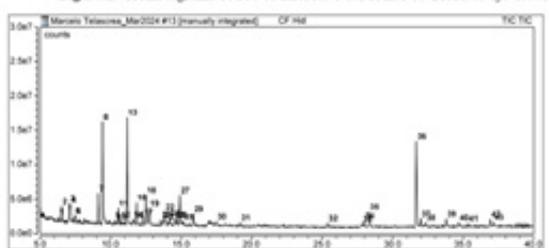


Figura 3. Cromatograma obtido do Óleo essencial das folhas de *Casearia Sylvestris*

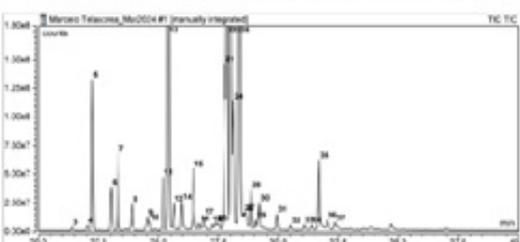
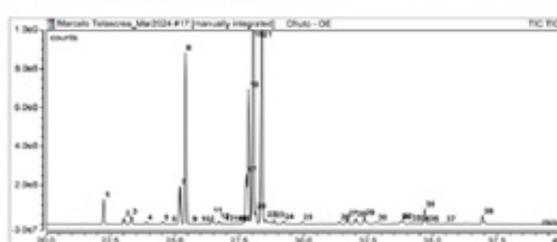


Figura 4. Cromatograma do hidrolato dos frutos de *Casearia Sylvestris*



## 6.5 Principais componentes identificados

Entre os compostos identificados, destacam-se o biciclogermacreno, o spathulenol, o  $\gamma$ -himachaleno e o germacreno D, tanto pela sua representatividade nas amostras quanto pela presença em diferentes partes da planta. O biciclogermacreno apresenta concentrações significativas de 45,10% nas flores, 40,90% no óleo essencial das folhas e 23,80% nos frutos. O spathulenol é mais abundante no hidrolato das folhas, com 15,99%, mas ocorre em menor quantidade no óleo essencial das folhas (0,96%). O  $\gamma$ -himachaleno se encontra em proporções notáveis, com 9,81% no óleo essencial das folhas e 11,11% nos frutos. Já o germacreno D aparece em 20,06% no hidrolato das flores, 2,02% no óleo essencial das folhas e 4,86% nos frutos, indicando sua presença disseminada por diferentes partes da planta. Conforme ilustra a tabela a seguir:

Tabela 5 - Principais componentes encontrados

Composto	Flores (%)	Hidrolato das Folhas (%)	Óleo Essencial das Folhas (%)	Hidrolato dos Frutos (%)
Biciclogermacreno	45,1	-	40,9	23,8
Spathulenol	-	15,99	0,96	-
$\gamma$ -Himachaleno	-	-	9,81	11,11
Germacreno D	20,06	-	2,02	4,86

O biciclogermacreno é um sesquiterpeno que tem se destacado por suas notáveis propriedades bioativas, sendo identificado em concentrações significativas nos óleos essenciais de *Beilschmiedia tonkinensis* e *Lindera gracilipes*. Estudos revelaram sua potente atividade citotóxica contra células cancerosas, com IC50 variando entre 20,6 e 44,12  $\mu\text{g}/\text{mL}$ , e uma forte ação antimicrobiana, inibindo *Pseudomonas aeruginosa* e *Aspergillus niger*. Além disso, análises de docking molecular indicam uma interação promissora com a proteína p38 $\alpha$  MAPK, sugerindo seu potencial na modulação de processos patológicos. Recentemente, o biciclogermacreno também demonstrou excelente atividade larvicida contra larvas de *A. subpictus*, *A. albopictus* e *C. tritaeniorhynchus* quando extraído de *H. sprengeianum*, com impactos mínimos sobre organismos aquáticos não-alvo. Essas propriedades destacam o biciclogermacreno como um candidato promissor para o desenvolvimento de novos larvicidas naturais. No entanto, para aprimorar sua eficácia e estabilidade e reduzir custos, são necessários estudos adicionais sobre seus efeitos subletais e a encapsulação do composto. (Huan, 2024; Govindarajan, 2016).

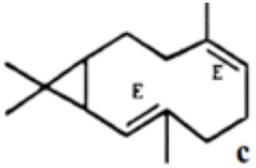
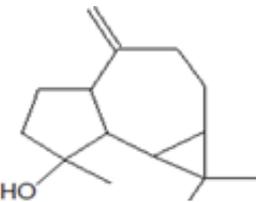
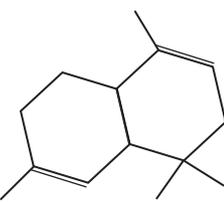
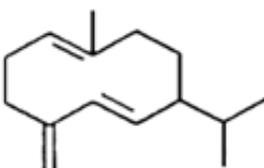
O Spathulenol é um sesquiterpeno com diversas atividades biológicas. Em um estudo recente, o espatuleno (spathulenol) demonstrou atividade anti-micobacteriana significativa contra *M. tuberculosis*, com um MIC50 de  $36,9 \pm 1,5 \mu\text{g}/\text{mL}$  e sem citotoxicidade em macrófagos RAW 264.7, sugerindo boa segurança para uso terapêutico. Esses resultados destacam o espatuleno como um candidato promissor para novos tratamentos contra tuberculose, especialmente cepas resistentes. Além disso, em outra pesquisa, o espatuleno foi identificado como responsável pelos efeitos anestésicos e sedativos do óleo essencial de *Piper guineense*. A fração com es-

patuleno apresentou um potencial anestésico significativo, reduzindo o tempo para alcançar o estágio anestésico desejado.. (Costa, 2021; Benovit, 2015)

Em pesquisas anteriores, o germacreno D, um sesquiterpeno encontrado no óleo essencial de *Piper arboreum*, demonstrou uma notável atividade mosquitocida contra várias espécies de mosquitos, incluindo *Culex quinquefasciatus*, *Anopheles gambiae* e *Aedes aegypti*. Este composto se destacou devido à sua alta concentração no *Piper arboreum*, que é três vezes maior em comparação com a encontrada em *Chloroxylon swietenia*. A alta porcentagem de germacreno D no *Piper arboreum* pode estar diretamente relacionada à sua eficácia larvicida contra *A. aegypti*.(Montanari, 2011).

O  $\gamma$ -Himachaleno é um sesquiterpeno, um tipo de composto orgânico derivado de três unidades de isopreno ( $C_5H_8$ ), totalizando 15 átomos de carbono e 24 átomos de hidrogênio. Sua estrutura é caracterizada por um anel ciclopentano fundido a um anel ciclopropano, formando uma configuração cíclica distinta. Embora o  $\gamma$ -Himachaleno seja frequentemente encontrado em óleos essenciais de várias plantas, há uma escassez de estudos detalhados sobre suas propriedades biológicas e atividades específicas. Na tabela a seguir encontram-se as estruturas químicas dos 4 principais componentes citados anteriormente:

Tabela 6. Estrutura dos principais componentes

Compostos	Estrutura química
Biciclogermacreno	
Spathulenol	
$\gamma$ -Himachaleno	
Germacreno D	

## 6.6 Compostos não identificados

A análise comparativa dos cromatogramas das amostras de hidrolatos e do óleo essencial de *Casearia sylvestris* revelou padrões interessantes em picos com índices de retenção linear (IRL) semelhantes, indicando a presença de compostos não identificados que podem ser semelhantes ou idênticos.

Os picos não identificados foram observados com as seguintes concentrações nas amostras analisadas:

Tabela 7. Picos não identificados

IRL	Hidrolato de Folhas (%)	Óleo Essencial das Folhas (%)	Hidrolato do Fruto (%)
1430	15,75	0,57	11,11
1490	0,33	40,9	23,8
1500	4,1	0,06	0,77
1644	1,66	1,48	0,77

Dado que esses picos correspondem a compostos não identificados e apresentam variações significativas nas concentrações, recomenda-se que futuras análises utilizem técnicas cromatográficas avançadas, como cromatografia bidimensional (2D) e/ou cromatografia quiral, para uma identificação mais precisa dos compostos. Além disso, para os picos com altas concentrações que não foram identificados nesta análise, é sugerido o uso de técnicas adicionais de separação seguidas de ressonância magnética nuclear (RMN). Essas abordagens permitirão uma análise mais detalhada e confiável, possibilitando uma identificação completa e precisa dos compostos presentes nas amostras.

## 6.7 Semelhança entre os cromatogramas do Hidrolato do fruto e dos Óleos Essencial das folhas

A comparação entre os cromatogramas dos óleos essenciais e dos hidrolatos revelou uma grande semelhança entre o óleo essencial das folhas e o hidrolato do fruto. Ambos compartilham pelo menos 20 componentes identificados incluindo  $\alpha$ -longipinene,  $\alpha$ -ylangene,  $\beta$ -selinene, (E)-caryophyllene,  $\beta$ -copaene, aromadendrene, (E)- $\beta$ -farnesene,  $\alpha$ -humulene, 9-epi-(E)-caryophyllene, selina-4,11-diene,  $\gamma$ -gurjunene, germacrene D,  $\gamma$ -himachalene,  $\beta$ -selinene, biciclogermacrene,  $\beta$ -himachalene, germacrene A,  $\delta$ -cadinene,  $\gamma$ -vetivenene, e spathulenol. Esses componentes representam 49,1% da composição do hidrolato do fruto e 62,81% da composição do óleo essencial das folhas. Entre os principais componentes comuns, destacam-se:

- Germacrene D: 2,02% (hidrolato do fruto) e 4,86% (óleo essencial das folhas)

- $\alpha$ -longipinene: 2,04% (hidrolato do fruto) e 2,14% (óleo essencial das folhas)
- $\gamma$ -himachalene: 9,81% (hidrolato do fruto) e 11,11% (óleo essencial das folhas)
- Bicyclogermacrene: 23,8% (hidrolato do fruto) e 40,9% (óleo essencial das folhas)

Essas comparações destacam a complexidade da composição química da *Casearia sylvestris*. Compostos como bicyclogermacrene e  $\gamma$ -himachalene são proeminentes em várias partes da planta, indicando sua importância para o aroma e propriedades gerais. Em contraste, compostos como limoneno e  $\beta$ -copaene mostram variações significativas em concentração, refletindo a necessidade de considerar a parte da planta e o tipo de extração para uma avaliação completa de suas características químicas. Esses dados fornecem uma visão detalhada da variabilidade química dentro da planta e podem guiar futuras pesquisas sobre as propriedades e usos potenciais dos compostos identificados

## 7. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Esta iniciação científica visou investigar os óleos essenciais e hidrolatos de *Casearia sylvestris* utilizando Cromatografia Gasosa (CG) e Espectrometria de Massa (EM), com o intuito de identificar os principais compostos e comparar seus perfis. Os objetivos estabelecidos foram alcançados, proporcionando uma compreensão detalhada da composição química das amostras analisadas.

A análise cromatográfica revelou a presença de compostos significativos como bicyclogermacrene, spathulenol,  $\gamma$ -himachaleno e germacrene D em diferentes partes da planta. A comparação entre os perfis dos óleos essenciais e dos hidrolatos evidenciou variações na composição química, refletindo a complexidade dos extratos de *Casearia sylvestris*. Destacou-se a presença de compostos com potencial bioativo, o que sublinha a importância dos hidrolatos, frequentemente subestimados, como fontes de substâncias aromáticas valiosas.

Apesar dos avanços alcançados, a análise também revelou a existência de picos não identificados nos cromatogramas. A falta de uma base de dados específica e de técnicas analíticas avançadas limitou a identificação completa desses compostos. Recomenda-se a utilização de cromatografia bidimensional (2D) e cromatografia quiral para uma separação e identificação mais precisa dos compostos não identificados. Adicionalmente, para os picos de altas concentrações que permanecem não identificados, a aplicação de técnicas adicionais de separação e ressonância magnética nuclear (RMN) é crucial para obter uma caracterização detalhada e confiável.

Este estudo demonstra a importância de uma abordagem analítica robusta para explorar a riqueza química dos hidrolatos e óleos essenciais. A compreensão detalhada dos compostos presentes não só amplia o conhecimento sobre *Casearia sylvestris*, mas também abre novas

possibilidades para aplicações terapêuticas e industriais desses extratos. As recomendações para futuras análises visam superar as limitações encontradas e avançar na identificação e caracterização de novos compostos, contribuindo assim para a valorização e o uso potencial dessas substâncias na ciência e na indústria.

Em suma, os objetivos da pesquisa foram concluídos com sucesso, destacando a relevância dos estudos aprofundados sobre a composição química dos extratos de plantas e a necessidade de técnicas analíticas avançadas para uma identificação completa. Este trabalho proporciona uma base sólida para futuras pesquisas e explorações dos compostos bioativos de *Casearia sylvestris*.

## 8. DISPENSA DE APRESENTAÇÃO AO CEP OU CEUA

A carta de dispensa de apresentação ao CEP OU CEUA foi preenchida e encontra-se no ANEXO I do projeto.

## REFERÊNCIAS

ADAMS, Robert P. Identification of essential oils by ion trap mass spectroscopy. Academic press, 2012.

ADAMS, R. P.; Identification of Essential Oil by Ion Trap Mass Spectroscopy, Academic Press: San Diego, 1995.

ALCÂNTARA, Joelma Moreira et al. Composição química e potencial biológico dos óleos essenciais de annonaceae dos campi INPA e UFAM. 2015.

ALMEIDA, M. P. et al. Explorando a química e a atividade antifúngica de óleos essenciais: Uma proposta de projeto para a Educação Básica. *Latin American Journal of Science Education*, v. 2, p. 22059, 2015

BALLABENI, V. et al. Novel antiplatelet and antithrombotic activities of essential oil from Lavandula hybrida Reverchon "grosso". *Phytomedicine*, v. 11, n. 7-8, p. 596-601, 2004.

BAKKALI, Fadil et al. Biological effects of essential oils—a review. *Food and chemical toxicology*, v. 46, n. 2, p. 446-475, 2008.

BICCHI, Carlo et al. Direct resistively heated column gas chromatography (Ultrafast module-GC) for high-speed analysis of essential oils of differing complexities. *Journal of Chromatography A*, v. 1024, n. 1-2, p. 195-207, 2004.

BORGES, Janaina de Santana. Análise comparativa do proteoma e metaboloma de raízes de dois clones de E. grandis x E. camaldulensis, sendo um tolerante e um susceptível a condições de estresse hídrico. 2013. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

BRASIL. FARMACOPEIA BRASILEIRA, volume 2 / Agência Nacional de Vigilância Sanitária. Brasília: Anvisa, 694-698, 2v/il., 2010.

BURT, Sara. Essential oils: their antibacterial properties and potential applications in foods—a review. *International journal of food microbiology*, v. 94, n. 3, p. 223-253, 2004.

BUSATO, Nathália Viégas et al. Estratégias de modelagem da extração de óleos essenciais por hidrodestilação e destilação a vapor. *Ciência Rural*, v. 44, n. 9, p. 1574-1582, 2014.

CABRAL, D. J. L. et al. Levantamento etnobotânico de plantas medicinais em área de restinga no município de Maricá, RJ, Brasil. *Acta Botânica Brasilica*, v. 25, n. 3, p. 696-709, 2011.

CARVALHO, P. E. R. Cafezeiro-do-mato: Casearia sylvestris. In: CARVALHO, P. E. R. Espécies arbóreas brasileiras. Brasília, DF: Embrapa Informação Tecnológica; Colombo: Embrapa Florestas, 2006. v. 2. p. 115-124. (Coleção espécies arbóreas brasileiras, v. 2).

CLEVINGER, J. F. Apparatus for the determination of volatile oil. *The Journal of the American Pharmaceutical Association* (1912), v. 17, n. 4, p. 345-349, 1928a.

CLEVINGER, J. F. Report on (the analysis of) fluidextract of ginger. *Assoc Off Agric Chem J*, v. 17, p. 346-349, 1928b..

CRAMERS, Carel A. et al. High-speed gas chromatography: an overview of various concepts. *Journal of chromatography A*, v. 856, n. 1-2, p. 315-329, 1999.

DAVID, Frank et al. Instrumentation and applications of fast high-resolution capillary gas chromatography. *Journal of Chromatography A*, v. 842, n. 1-2, p. 309-319, 1999.

DE ALMEIDA, Jhenyfer Caroliny; DE ALMEIDA, Priscilla Prates; GHERARDI, Sandra Regina Marcolino. Potencial antimicrobiano de óleos essenciais: uma revisão de literatura de 2005 a 2018. *Nutr. Time*, v. 17, n. 01, p. 8623-8633, 2020.

DE OLIVEIRA JÚNIOR, Luiz Fernando Ganassali et al. Chemical profile and potential antifungal of essential oil *Schinus terebinthifolius* and its by-products. *Research, Society and Development*, v. 9, n. 11, p. e91491110623-e91491110623, 2020.

DE MORAIS, Lilia Aparecida Salgado. Influência dos fatores abióticos na composição química dos óleos essenciais. In: Embrapa Meio Ambiente-Artigo em anais de congresso (ALICE). Horticultura Brasileira, Brasília, DF, v. 27, n. 2, p. S3299-S3302, ago. 2009. CD-ROM. Suplemento. Trabalho apresentado no 49. Congresso Brasileiro de Olericultura, Águas de Lindóia, SP., 2009.

DE OLIVEIRA ARAÚJO, Lidiane et al. O uso de óleos essenciais na Odontologia. *Revista de Odontologia Contemporânea*, v. 5, n. 1, p. 69-78.2021

DE SOUSA, Rodrigo Ferreira; DE SOUSA, Joama Alves. Metabólicos secundários associados a estresse hídrico e suas funções nos tecidos vegetais. *Revista Brasileira de Gestão Ambiental*, v. 11, n. 1, p. 01-08, 2017.

EDRIS, Amr E. Pharmaceutical and therapeutic potentials of essential oils and their individual volatile constituents: a review. *Phytotherapy Research: An International Journal Devoted to Pharmacological and Toxicological Evaluation of Natural Product Derivatives*, v. 21, n. 4, p. 308-323, 2007.

FANIN, Mauricio et al. Métodos alternativos no tratamento de infecções causadas por *Staphylococcus aureus*. *Medicina Veterinária (UFRPE)*, v. 14, n. 1, p. 24-32, 2020.

HERRES, W.. HRGC-FTIR: Capillary Gas Chromatography-Fourier Transform Infrared Spectroscopy. Theory and Applications. Huethig: Heidelberg, Germany, 1987.

INTERNATIONAL ORGANIZATION FOR STANDARDIZATION. *Vocabulary of Natural Materials: ISO/D159235.2*; 2013.

KERBAUY, G. B. *Fisiologia Vegetal*. Rio de Janeiro: Editora Guanabara Koogan S.A., 2004. 470p

LIMA, T. C. et al. Folhas de *Casearia sylvestris* (Flacourtiaceae): aspectos morfo-anatômicos e micromorfologia da epiderme. *Revista Brasileira de Farmacognosia*, v. 22, n. 3, p. 495-502, 2012.

MARRIOTT, Philip J.; SHELLIE, Robert; CORNWELL, Charles. Gas chromatographic technologies for the analysis of essential oils. *Journal of Chromatography A*, v. 936, n. 1-2, p. 1-22, 2001.

MCLAFFERTY, Fred W.; STAUFFER, Douglas B. *The Wiley/NBS registry of mass spectral data*. New York: Wiley, 1989.

MENDES, S. S. et al. Evaluation of the analgesic and anti-inflammatory effects of the essential oil of *Lippia gracilis* leaves. *Journal of Ethnopharmacology*, v. 129, n. 3, p. 391-397, 2010.

MIRANDA, Cíntia Alvarenga Santos Fraga et al. Óleos essenciais de folhas de diversas espécies: propriedades antioxidantes e antibacterianas no crescimento espécies patogênicas. *Revista Ciência Agronômica*, v. 47, p. 213-220, 2016.

NERIO, Luz Stella; OLIVERO-VERBEL, Jesus; STASHENKO, Elena. Repellent activity of essential oils: a review. *Bioresource technology*, v. 101, n. 1, p. 372-378, 2010.

PEREIRA, R. C., et al. "Casearia sylvestris extracts modulate the production of IL-1beta, TNF-alpha, IL-10, and IL-17A cytokines by human immune cells." *Journal of Immunology Research* 2019.

PICHERSKY, Eran; GERSHENZON, Jonathan. The formation and function of plant volatiles: perfumes for pollinator attraction and defense. *Current opinion in plant biology*, v. 5, n. 3, p. 237-243, 2002.

PROOT, M.; SANDRA, P. High speed capillary GC on 10 m x 100 µm id FSOT Columns. *Journal of High Resolution Chromatography*, v. 9, n. 11, p. 618-623, 1986.

REIS, Érika Soares et al. Content and chemical composition of the essential oil of *Melissa officinalis* L. in vitro under the influence of the culture medium. *Acta Scientiarum. Agronomy*, v. 31, p. 331-335, 2009.

REZENDE, A. A. et al. Composição química e atividade biológica de *Casearia sylvestris*. *Revista Brasileira de Farmacognosia*, v. 21, n. 4, p. 721-728, 2011.

RUBIOLO, Patrizia et al. Essential oils and volatiles: sample preparation and analysis. A review. *Flavour and fragrance journal*, v. 25, n. 5, p. 282-290, 2010.

SALLEH, Wan Mohd Nuzul Hakimi et al. Essential oil compositions of Malaysian Lauraceae: A mini review. *Pharmaceutical Sciences*, v. 22, n. 1, p. 60-67, 2016.

SANTOS, André Luis dos et al. *Staphylococcus aureus*: visitando uma cepa de importância hospitalar. *Jornal Brasileiro de Patologia e Medicina Laboratorial*, v. 43, n. 6, p. 413-423, 2007.

SANTOS, A. R. S., et al. "Anti-inflammatory and antinociceptive activities of *Casearia sylvestris*." *Journal of Ethnopharmacology* 108.2 (2006)

SHARIFI-RAD, Javad et al. Biological activities of essential oils: From plant chemoecology to traditional healing systems. *Molecules*, v. 22, n. 1, p. 70, 2017.

SILVA, E. M. et al. Pollination and reproductive biology of *Casearia sylvestris* (Salicaceae). *Acta Botânica Brasilica*, v. 33, n. 1, p. 135-145, 2019

SILVA, Marcela Cristina. Óleos essenciais: caracterização, aplicações e métodos de extração. 2018.

SIMIĆ, A. et al. The chemical composition of some Lauraceae essential oils and their antifungal activities. *Phytotherapy Research: An International Journal Devoted to Pharmacological and Toxicological Evaluation of Natural Product Derivatives*, v. 18, n. 9, p. 713-717, 2004.

SIMÕES, Cláudia Maria Oliveira et al. *Farmacognosia: do produto natural ao medicamento*. Art-med Editora, 2016.

SHARIFI-RAD, Javad et al. Biological activities of essential oils: From plant chemoecology to traditional healing systems. *Molecules*, v. 22, n. 1, p. 70, 2017.

SOUSA, L. A. et al. Ecofisiologia de *Casearia sylvestris* Swartz em diferentes ambientes do Cerrado. *Revista Brasileira de Biociências*, v. 16, n. 2, p. 50-57, 2018

TELASCREA, m., aráujo, c. C. D., cavalheiro, a. J., marques, m. O., facanali, r., & de moraes, p. L. Essential oils from leaves of *Cryptocarya* spp from the atlantic rain forest. *Química Nova*, 31(3), 503-507 2008.,

VAN DEN DOOL, h. A generalization of the retention index system including linear temperature programmed gas-liquid partition chromatography. *J. Chromatogr. A*, v. 11, p. 463-471, 1963.

VAN DE BRAAK, s. A. A. J.; leijten, g. C. J. J. Essential oils and oleoresins: a survey in the netherlands and other major markets in the european Union. CBI, Centre for the Promotion of Imports from Developing Countries, Rotterdam, v. 116, 1999.

VIZZOTTO, Márcia; KROLOW, A. C. R.; WEBER, Gisele Eva Bruch. Metabólitos secundários encontrados em plantas e sua importância. Embrapa Clima Temperado-Documents (INFOTECA-E), 2010.

WANNES, Wissem Aidi et al. Antioxidant activities of the essential oils and methanol extracts from myrtle (*Myrtus communis* var. *italica* L.) leaf, stem and flower. *Food and chemical toxicology*, v. 48, n. 5, p. 1362-1370, 2010.

WAR, Abdul Rashid et al. Herbivore induced plant volatiles: their role in plant defense for pest management. *Plant Signaling & Behavior*, v. 6, n. 12, p. 1973-1978, 2011.

WAR, Abdul Rashid et al. Mechanisms of plant defense against insect herbivores. *Plant signaling & behavior*, v. 7, n. 10, p. 1306-1320, 2012.

WIGGERS, Ivonei; STANGE, Carlos Eduardo Bittencourt. Manual de instruções para coleta, identificação e herborização de material botânico. Programa de Desenvolvimento Educacional-SEED-PR UNICENTRO, 45p, 2008