



**INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO PIAUÍ -  
CAMPUS PARNAÍBA  
LICENCIATURA EM QUÍMICA**

**EDUARDO ROBERTO MACHADO SABINO**

**EXTRAÇÃO DO ÓLEO ESSENCIAL E IDENTIFICAÇÃO DE CONSTITUINTES  
QUÍMICOS VOLÁTEIS DE *Scoparia dulcis***

**PARNAÍBA – PI  
2023**

EDUARDO ROBERTO MACHADO SABINO

EXTRAÇÃO DO ÓLEO ESSENCIAL E IDENTIFICAÇÃO DE CONSTITUINTES  
QUÍMICOS VOLÁTEIS DE *Scoparia dulcis*

Trabalho de Conclusão de curso (Monografia)  
apresentado como exigência parcial para obtenção  
do diploma do curso de Licenciatura em Química  
do Instituto Federal de Educação, Ciência e  
tecnologia do Piauí. Campus Parnaíba.

Orientadora: Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Buana Carvalho de  
Almeida

---

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) de acordo com ISBD**

---

Sabino, Eduardo Roberto Machado

S116e      Extração do óleo essencial e identificação de constituintes químicos voláteis de *Scoparia dulcis* / Eduardo Roberto Machado Sabino. — 2023. 44f.: il. color.

Trabalho de Conclusão de Curso (Licenciatura em Química) – Instituto Federal do Piauí, Campus Parnaíba, 2023.

Orientadora: Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Buana Carvalho de Almeida .

1.Química. 2.Metabólitos secundários. 3.Hidrodestilação. I.Título.

CDD - 540

---

**Elaborado por Micheline Angélica Aragão Gouveia CRB 3/1244**

EDUARDO ROBERTO MACHADO SABINO

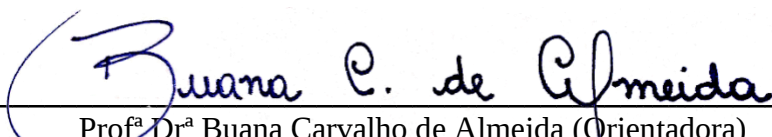
EXTRAÇÃO DO ÓLEO ESSENCIAL E IDENTIFICAÇÃO DE CONSTITUINTES  
QUÍMICOS VOLÁTEIS DE *Scoparia dulcis*

Trabalho de Conclusão de curso (Monografia)  
apresentado como exigência parcial para obtenção  
do diploma do curso de Licenciatura em Química  
do Instituto Federal de Educação, Ciência e  
tecnologia do Piauí. Campus Parnaíba.

Orientadora: Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Buana Carvalho de  
Almeida

Aprovado em: 16 / 01 / 2023

BANCA EXAMINADORA

  
Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Buana Carvalho de Almeida (Orientadora)

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí (IFPI) – Campus Parnaíba

  
Prof. Dr. Bartholomeu Araújo Barros Filho

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí (IFPI) – Campus Parnaíba

  
Prof.<sup>a</sup> Alicia Ludymilla Cardoso de Souza

Mestranda pelo programa de Pós-Graduação em Química – UFSCar

Dedico a minha família, amigos, professores e quem mais esteve ao meu lado, quem me apoiou e me fez chegar até aqui.

## AGRADECIMENTOS

Ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí - *Campus Parnaíba* pelo ambiente amistoso, acolhimento e por tudo que aprendi ao longo dos anos no curso, na qual foi essencial no meu processo de formação profissional.

Agradeço ao Laboratório de Produtos Naturais da Universidade Federal de São Carlos – UFSCar. A prof. Dra. Maria Fátima das Graças Fernandes da Silva, Alicia Ludmilla Cardoso de Souza e Luiz Guillermo Cuadrado Durango pelas análises de CG-EM.

Aos meus familiares, em especial minha mãe Roberta Jônia, meu pai, meus irmãos Rosijane, Emerson e Maria Eduarda, minha avó Nonata, meu avô Gonzaga, minhas tias, por todo apoio ajuda e incentivo, bem como aos meus amigos Wanderson Pedro e Reberth.

Aos meus amigos que convivi intensamente durante os últimos anos, que sempre estiveram do meu lado, pelo companheirismo, parceria, conselhos, ajuda e apoio incondicional demonstrado ao longo de todo o período acadêmico, por compartilharem comigo vários momentos e experiências que me permitiram crescer como pessoa.

Aos amigos e colegas de turma, Vinícius, Cibele, Ana Beatriz, Rafael, Bianca, Warley, Expedito, Fernando, Thalia, Gabriel, Rosângela, Lucas, Clara Luz, Leanderson, Manu, Walker, Raquel, Mairon, Isaías, Leomir, Letícia e Beatriz.

À Prof.<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Ana Maria Athayde Uchôa Thomaz pelas excelentes orientações nas aulas de TCC I e II, estas de suma importância para construção deste trabalho.

À professora Dr<sup>a</sup> Buana Carvalho de Almeida por ter sido minha orientadora e ter desempenhado tal função com dedicação e compromisso.

A todos os meus queridos professores e professoras do IFPI – Campus Parnaíba que compartilharam conhecimentos e experiências válidos para nós, não só como futuros profissionais, mas também como pessoas. Em especial ao Prof. Dr. Haroldo Luís de Sousa Neres, Prof. Dr. Bartolomeu Araújo, Prof.<sup>a</sup> Me. Evânia Carvalho dos Santos, Prof.<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Márcia Valéria Silva Lima e Prof.<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Janiciara Botelho.

Aos servidores do IFPI pelo excelente trabalho e acolhimento, às pessoas que convivi ao longo desses anos no curso que me trouxeram grandes ensinamentos.

A todos que contribuíram de alguma forma para a realização deste trabalho o meu muitíssimo obrigado.

“A vida não é fácil para nenhum de nós. Mas e daí? Nós devemos ter persistência e, acima de tudo, confiança em nós mesmos. Devemos acreditar que somos talentosos em alguma coisa, e que essa coisa, a qualquer custo, deve ser alcançada.”

Marie Curie

## RESUMO

A espécie *Scoparia dulcis* é endêmica da América do Sul, podendo ser encontrada na maioria dos estados brasileiros e possui uma vasta aplicabilidade biológica. É um arbusto glabro com pequenas flores brancas, comumente encontrado em terrenos baldios e campos em pousio. O presente trabalho tem como objetivo investigar a composição dos metabólitos secundários voláteis, assim como investigar as aplicações biológicas de moléculas ativas da espécie vegetal *S. dulcis*. O espécime foi coletado na cidade de Buriti dos Lopes-PI, e o óleo essencial das folhas foi extraído por hidrodestilação e analisado por Cromatografia Gasosa acoplada à Espectrometria de Massas (CG-EM). O óleo essencial foi obtido com rendimento de 0,0032% e, a partir da análise por CG-EM, foram identificados 59 constituintes com 72.88% da composição correspondente a compostos químicos voláteis, sendo os majoritários cariofileno (43,02%), humuleno (17,90%), fitol (13,47%), óxido de cariofileno (5,09%), copaeno (2,00%).

**Palavras-chaves:** Metabólitos secundários. Hidrodestilação. CG-EM.

## ABSTRACT

The species *Scoparia dulcis* is endemic to South America, can be found in most Brazilian states, and has a wide biological applicability. It is a glabrous shrub with small white flowers, commonly found in vacant lots and fallow fields. The present work aims to investigate the composition of volatile secondary metabolites, as well as to investigate the biological applications of active molecules of the plant species *S. dulcis*. The specimen was collected in the city of Buriti dos Lopes-PI, and the essential oil from the leaves was extracted by hydrodistillation and analyzed by Gas Chromatography coupled with Mass Spectrometry (GC-MS). The essential oil was obtained with a yield of 0.0032% and, from the GC-MS analysis, 59 constituents were identified with 72.88% of the composition corresponding to volatile chemical compounds, the major ones being caryophyllene (43.02%), humulene (17.90%), phytol (13.47%), caryophyllene oxide (5.09%), copaene (2.00%).

**Key-words:** Secondary metabolites. Hydrodistillation. GC-MS.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES/ QUADROS

|                                                                                            |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 1 – Estrutura foliar e floral da <i>Scoparia dulcis</i> .....                       | 14 |
| Figura 2 – Estrutura do citrionelol, Monoterpeno acíclico .....                            | 16 |
| Figura 3 – Estrutura básica de um composto fenólico, o fenol .....                         | 16 |
| Figura 4 – Estrutura de um Ácido Fenólico e um Flavonoide .....                            | 17 |
| Figura 5 – Estrutura de alcaloides conhecidos .....                                        | 18 |
| Figura 6 – Destilação por arraste a vapor .....                                            | 20 |
| Figura 7 – Esboço esquemático das propriedades terapêuticas de <i>S. dulcis</i> .....      | 21 |
| Figura 8 – Vista aérea de Buriti dos Lopes (cidade de coleta) .....                        | 23 |
| Figura 9 – Extração do OE de <i>S. dulcis</i> por hidrodestilação .....                    | 24 |
| Figura 10 – Fluxograma do procedimento experimental .....                                  | 24 |
| Figura 11 – Óleo essencial da <i>S. dulcis</i> .....                                       | 26 |
| Figura 12 – Cromatograma do OE de <i>S. dulcis</i> obtido por CG-EM .....                  | 28 |
| Figura 13 – Espectro de massas do Cariofileno .....                                        | 31 |
| Figura 14 – Espectro de massas do Humuleno .....                                           | 31 |
| Figura 15 – Espectro de massas do Fitol .....                                              | 32 |
| Figura 16 – Espectro de massas do óxido de cariofileno .....                               | 33 |
| Figura 17 – Espectro de massas do copaeno .....                                            | 34 |
| Figura 18 – Constituintes majoritários identificados nas folhas de <i>S. dulcis</i> .....  | 34 |
| Quadro 1 – Análise CG-EM da composição química do óleo essencial de <i>S. dulcis</i> ..... | 29 |

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

|       |                                                          |
|-------|----------------------------------------------------------|
| OEs   | Óleos Essenciais                                         |
| CG-EM | Cromatografia Gasosa acoplada a Espectrometria de Massas |
| CG    | Cromatografia Gasosa                                     |
| RDC   | Resolução de Diretoria Colegiada                         |
| PI    | Piauí                                                    |
| SP    | São Paulo                                                |
| OESd  | Óleo Essencial <i>Scoparia dulcis</i>                    |
| IE    | Impacto de Elétrons                                      |
| FPP   | Farnesil difosfato                                       |

## LISTA DE SIMBOLOS

|               |                           |
|---------------|---------------------------|
| %             | Porcentagem               |
| °C            | Graus Celsius             |
| $\alpha$      | Alfa                      |
| $\beta$       | Beta                      |
| $\gamma$      | Gama                      |
| m/z           | Razão massa/carga         |
| Rt            | Tempo de retenção         |
| L             | Litro                     |
| m             | Metro                     |
| mL            | Mililitro                 |
| mg/kg         | Miligramma por quilograma |
| KPa           | Quilopascal               |
| g             | gramas                    |
| mm            | milímetro                 |
| $\mu\text{m}$ | Micrômetro                |
| cm/s          | Centímetros por segundo   |
| mL/min        | Mililitro por minuto      |
| min           | Minuto                    |
| eV            | elétron volts             |

## SUMÁRIO

|                                                                       |           |
|-----------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1 INTRODUÇÃO .....</b>                                             | <b>12</b> |
| <b>2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA .....</b>                                  | <b>13</b> |
| 2.1 CONSIDERAÇÕES TAXONÔMICAS .....                                   | 13        |
| 2.1.1 Família Plantaginaceae .....                                    | 13        |
| 2.1.2 Gênero <i>Scoparia</i> .....                                    | 13        |
| 2.1.3 Espécie <i>Scoparia dulcis</i> .....                            | 13        |
| 2.2 METABÓLITOS SECUNDÁRIOS .....                                     | 14        |
| 2.2.1 Terpenos .....                                                  | 15        |
| 2.2.2 Compostos Fenólicos .....                                       | 16        |
| 2.2.3 Alcaloides .....                                                | 17        |
| 2.3 ÓLEOS VOLÁTEIS .....                                              | 18        |
| 2.4 EXTRAÇÃO DOS ÓLEOS ESSENCIAIS .....                               | 19        |
| 2.5 ATIVIDADES BIOLÓGICAS DE <i>Scoparia dulcis</i> .....             | 20        |
| <b>3 OBJETIVOS .....</b>                                              | <b>22</b> |
| 3.1 OBJETIVO GERAL .....                                              | 22        |
| 3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS .....                                       | 22        |
| <b>4 METODOLOGIA .....</b>                                            | <b>23</b> |
| 4.1 TIPO DE PESQUISA .....                                            | 23        |
| 4.2 MATERIAIS E MÉTODOS .....                                         | 23        |
| 4.2.1 Coleta do material vegetal .....                                | 23        |
| 4.2.2 Procedimento .....                                              | 23        |
| 4.2.2.1 Extração .....                                                | 23        |
| 4.2.2.2 Identificação dos compostos voláteis .....                    | 25        |
| <b>5 RESULTADOS E DISCUSSÃO .....</b>                                 | <b>26</b> |
| 5.1 OBTENÇÃO DO ÓLEO ESSENCIAL DE <i>S. dulcis</i> .....              | 26        |
| 5.2 IDENTIFICAÇÃO DOS CONSTITUINTES DE <i>S. dulcis</i> .....         | 27        |
| 5.3 METABÓLITOS E SUAS ATIVIDADES BIOATIVAS EM <i>S. dulcis</i> ..... | 35        |
| <b>CONSIDERAÇÕES FINAIS .....</b>                                     | <b>37</b> |
| <b>REFERÊNCIAS .....</b>                                              | <b>38</b> |

## 1 INTRODUÇÃO

A extração dos óleos essenciais (OEs) de plantas tem se mostrado uma importante fonte de pesquisa tanto na área acadêmica quanto na indústria devido as suas inúmeras aplicações e utilidades, facilitando o estudo da vasta variedade de organismos vegetais e suas complexidades, o que fornece vários componentes químicos economicamente importantes (NASCIMENTO e PADRE, 2020).

Esses constituintes químicos são compostos naturais de plantas aromáticas, que conforme Machado e Júnior (2011) identifican-se por um forte odor e por conter uma grande variedade de componentes químicos. Esses constituintes são metabólitos secundários, uma manifestação da individualidade da planta, que de acordo com Bakkali et al. (2008) estão presente em diferentes partes, como folhas, flores, caules, raízes e sementes e, independentemente de sua localização na planta, sabe-se que esses metabólitos voláteis desempenham importantes funções biológicas (GONÇALVES e GUAZZELL, 2014).

Geralmente, são extraídos por métodos práticos em quantidades suficientes para sínteses químicas, em prol de aplicações comerciais e científicas (MORAES et. al., 2020). Esses constituintes naturais de acordo com Nascimento e Padre (2020) são utilizados na área farmacêutica, como, por exemplo, na aromatização de ambientes, banhos aromáticos, inalações; na indústria alimentícia e agroquímica. Bem como, vale ressaltar que o uso dos óleos essenciais varia conforme sua composição, devido a presença de constituintes ativos que possuem uma individualidade química estrutural (SANTOS, 2011).

A composição química dos óleos essenciais se difere conforme a planta em estudo, no caso da espécie *Scoparia dulcis*, de acordo Ordaz et al. (2011) encontra-se distintos constituintes com uma variedade estrutural em seu óleo, bem como Coulibaly et al. (2011) ressalta que se pode encontrar diferentes metabólitos secundários ou até mesmo metabólitos em óleos essenciais que diferem em suas atribuições. Assim, o estudo dos metabólitos secundários voláteis das espécies vegetais oferece grande embasamento para pesquisas, tornando cada vez mais interessante se entender sobre esses componentes químicos na comunidade científica (FURLAN e MOTTA, 2008).

Dessa forma, o principal objetivo deste trabalho foi extrair o óleo essencial de *Scoparia dulcis* e identificar os constituintes voláteis por Cromatografia Gasosa acoplada a Espectrometria de Massas (CG-EM). A análise dos constituintes do óleo essencial, bem como o estudo das propriedades biológicas de *S. dulcis* contribuirá para o conhecimento quimiotaxônomico e farmacológico da mesma.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

### 2.1 CONSIDERAÇÕES TAXONÔMICAS

#### 2.1.1 Família Plantaginaceae

A família Plantaginaceae possui 146 espécies em todo o Brasil, faz parte das Angiospermas (plantas com flor), e pertence à ordem Lamiales, sendo bastante diversa morfológicamente (ALBACH e OXELMAN, 2005).

A família Plantaginaceae, comumente, apresenta espécies com alterações morfológicas, o que se deve ao tipo de clima, solo e ação antrópica, além dos fenômenos reprodutivos, são arbustos terrestres/aquáticos, monoicas, ginomonoicas ou hermafroditas (HEFLER, 2002).

#### 2.1.2 Gênero *Scoparia*

*Scoparia* é um gênero botânico de plantas, principalmente, tropicais. Boa parte das espécies deste gênero são pequenas e apresentam uma coloração verde com sabor e odor indistinto e com caule liso, possuem cerca de 60 cm de altura, e muito comumente encontradas como erva daninha (MELANIA et al., 2008).

#### 2.1.3 Espécie *Scoparia dulcis*

A espécie *Scoparia dulcis* (*S. dulcis*) (FIGURA 1A) é uma erva botânica medicinal que tem sido amplamente utilizada por gerações no sul da China, Índia, Brasil, Paraguai e Nigéria (JIAND et al., 2021). Conhecida como vassourinha, erva-da-vassoura-doce, vassourinha-de-botão, tupixaba, tapixaba, tapeiçava ou tapeicaba, propaga-se por meio de sementes, é uma erva folclórica etnomedicinal usada em diversas aplicações e seus derivados representam uma alternativa frequente para o tratamento de doenças (PARI e LATHA, 2006), sendo promissora como medicamento alternativo (MURTI, et al., 2012; CHRISTI e FOGARTY, 2021).

Espécie herbácea anual que se desenvolve em todo o País, vegetando em margens de rodovias, caminhos e terrenos baldios (PAMUNUWA, 2016). Apresenta caule amplamente ramificado desde a base, com folhas simples, dispostas de forma oposta cruzada, constituída por flores pequenas (FIGURA 1B), com 4 sépalas, e possui sementes numerosas.

**Figura 1** – Estrutura foliar e floral da *Scoparia dulcis*



Fonte: Autoria própria (2022).

A – Estrutura foliar de *S. dulcis*;

B – Estrutura floral de *S. dulcis*;

Segundo Pari e Latha (2006), a espécie *S. dulcis* é um arbusto com até 1 metro de comprimento, com pequenas flores brancas e, muitas vezes, assumindo hábito rastejante (FIGURA 1 B), comumente encontrada em terrenos baldios, campos em pousio, apresentando, sobretudo, atividades biológicas. Os constituintes de óleos essenciais de *S. dulcis* são extraídos de diferentes partes da planta, no entanto a maioria dos compostos isolados são provenientes das folhas (PAMUNUWA, 2016).

## 2.2 METABÓLITOS SECUNDÁRIOS

Os metabólitos secundários são provenientes das mais diversas espécies vegetais, o que oferece fundamentos construtivos para pesquisas, tornando cada vez interessante entender sobre esses processos de síntese (FURLAN e MOTTA, 2008). Esses metabólitos tratam-se de expressões da individualidade química das espécies vegetais, e diferem de maneira qualitativa e quantitativamente, o que ressalta cada vez mais a evolução dos seus estudos (OKADA et al., 2010).

Segundo Bakkali et al. (2008) os metabólitos secundários originam do metabolismo secundário das plantas e incluem os elementos essenciais contidos em muitos órgãos vegetais, que normalmente estão concentrados nas cascas, caules, flores, folhas, frutos, raízes e sementes, e são sintetizados pelas plantas de acordo com as suas necessidades específicas à sobrevivência, que incluem as condições ambientais, as interações com outras plantas e a defesa contra micro-organismos e predadores (SAVITHARAMMA et al., 2011)

Além de conferir à planta propriedades de defesa que a protegem contra predadores, grande parte dos metabólitos secundários possuem um aroma característico, bem como, desempenham papel na polinização e auxiliam no controle da temperatura (ALVES, 2011).

Esses metabólitos são responsáveis pelas relações entre o ambiente onde a planta se encontra, possuindo assim, caráter adaptativo. Esses compostos apresentam-se como líquidos viscosos e podem ou não exalar odor (SARTORATTO et al., 2004).

De acordo com Santos (2007), os metabólitos secundários de cada espécie vegetal produzem um conjunto de substâncias químicas, com uma variedade de funções, na qual esses compostos garantem vantagens para a sobrevivência, conservação e perpetuação da espécie, em seu ecossistema. São normalmente armazenados em espaços extracelulares, entre a cutícula e a parede celular das folhas da planta e a sua biossíntese ocorre normalmente em estruturas chamadas tricomas glandulares (JAKIEMIU, 2008).

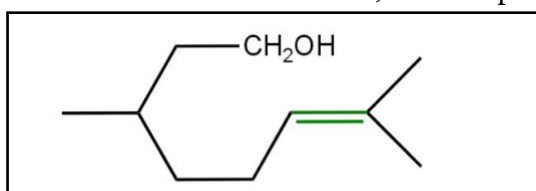
Afirma-se que os metabólitos secundários extraídos das espécies vegetais são subdivididos em algumas classes principais, tais como, terpenoides, alcaloides e compostos fenólicos. Os terpenos são sintetizados a partir do ácido mevalônico (no citoplasma) ou do piruvato e 3-fosfoglicerato (no cloroplasto), os compostos fenólicos são derivados do ácido chiquímico ou ácido mevalônico e os alcaloides de aminoácidos aromáticos e alifáticos, os quais são originados do ácido chiquímico (BARRETO et al., 2020). Terpenoides, alcaloides e compostos fenólicos podem apresentar potencial farmacológico relevante para estudos e pesquisas (VIZZOTTO, KROLOW e WEBER, 2010).

A seguir, serão detalhados de forma breve alguns relevantes grupos de substâncias químicas do metabolismo secundário das espécies vegetais.

### **2.2.1 Terpenos**

De acordo com a literatura, os óleos essenciais possuem como constituintes majoritários terpenos ou seus derivados com reconhecida atividade antimicrobiana (MARTINO et al., 2014). Esses componentes químicos compõem um extenso grupo de moléculas orgânicas produzidas como metabólitos secundários das espécies vegetais, para evitar injúrias promovidas por agentes externos (CORREIA et al., 2008).

Os terpenos podem ser definidos geralmente como “alcenos naturais”, ou seja, compostos químicos que possuem uma dupla ligação carbono-carbono, caracterizado como um hidrocarboneto insaturado (FIGURA 2) (SUN, 2015). No geral, um terpeno contendo oxigênio é delineado como terpenoide, desnaturado pela oxidação, e podendo apresentar distintas funções químicas, das quais podem ser citadas: ácidos, álcoois, aldeídos, cetonas, éteres, fenois ou epóxidos terpênicos (MCMURRY, 2011).

**Figura 2** – Estrutura do citronelol, monoterpreno acíclico

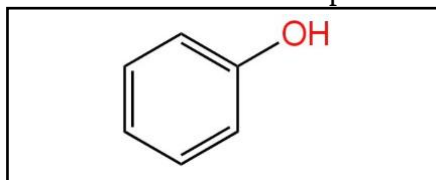
Fonte: Adaptado de Felipe e Bicas (2017).

Os monoterpenos são os principais componentes dos óleos voláteis, por conta de seu baixo peso molecular (SILVA, 2008). Segundo Martins (2012) os terpenos, de um modo geral, são derivados do 2-metil-1,3-butadieno, denominado isopreno (C5), podendo ser classificados conforme a quantidade de carbonos que possuem em sua estrutura, como se segue: monoterpenos (C10), sesquiterpenos (C15), diterpenos (C20), triterpenos (C30) e tetraterpenos (C40).

### 2.2.2 Compostos fenólicos

Condizente com os estudos de Dutra (2009), os compostos fenólicos são cruciais para o desenvolvimento das plantas, sendo vitais na própria conquista do ambiente terrestre dos organismos vegetais. Além disso, segundo Ângelo e Jorge (2007), essa classe de metabólitos secundários atua como agente antipatogênico, auxiliam na pigmentação, são responsáveis pela estabilidade oxidativa e pelo aroma das plantas.

Esses compostos encontram-se largamente propagados no reino vegetal, distribuídos por todas as plantas de forma diversificada (LIN et al., 2016). Quimicamente, são definidos como substâncias que apresentam anel aromático (anel benzênico) com um ou mais substituintes hidroxila (-OH) (FIGURA 3), são versáteis por possuírem estrutura alterável englobando desde moléculas simples até as com alto grau de polimerização (WHITE et al., 2010).

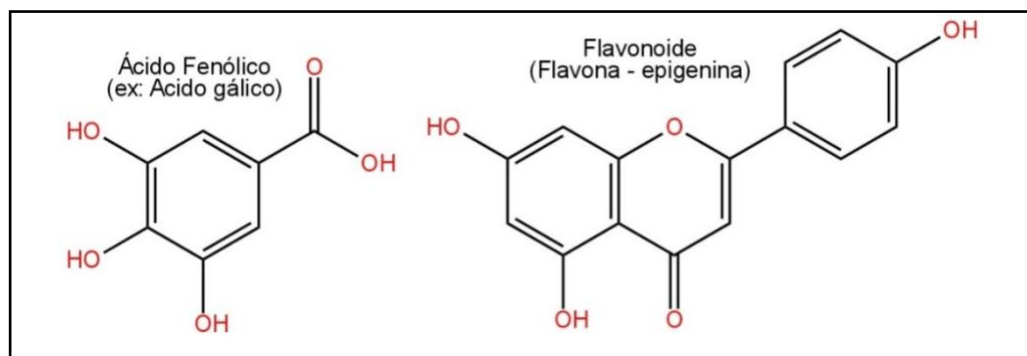
**Figura 3** – Estrutura básica de um composto fenólico, o fenol

Fonte: Adaptado de Ângelo e Jorge (2007).

Os polifenóis são geralmente originados a partir das diversas formas de combinações das variedades de estruturas dos compostos fenólicos, e são classificados de acordo com a constituição de suas cadeias carbônicas, das quais podemos citar os ácidos fenólicos e flavonoides (FIGURA 4) (ANGELO e JORGE, 2007).

Segundo Crozier e colaboradores (2009), os compostos fenólicos podem ser divididos em dois grupos: flavonoides e não-flavonoides. Nos estudos de Meregalli et al., (2020) flavonoides são polifenóis cuja estrutura básica compreende dois anéis aromáticos unidos por três carbonos C6—C3—C6, são os mais numerosos do reino vegetal e estão presentes em maior proporção nas folhas e na casca das frutas. Já os ácidos fenólicos são os principais compostos fenólicos não-flavonoides (DUTRA, 2009).

**Figura 4** – Estrutura de um ácido fenólico e um flavonoide



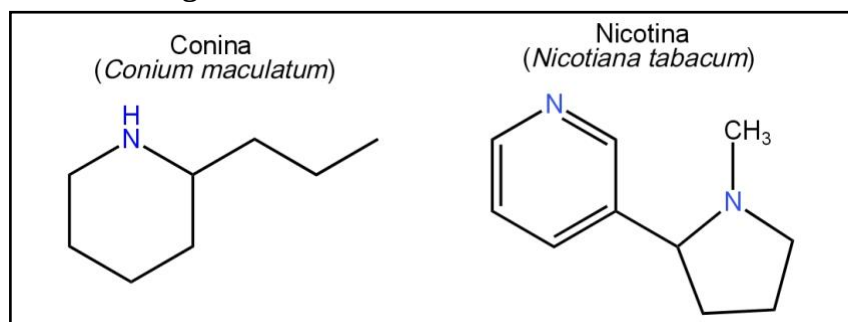
Fonte: Adaptado de Ângelo e Jorge (2007).

### 2.2.3 Alcaloides

De acordo com Castro et al., (2004) os alcaloides são uma classe de metabólitos secundários definidos pela presença de substâncias que possuem acentuado efeito no sistema nervoso, sendo muitos deles largamente utilizadas como venenos ou alucinógenos. Segundo Roberts et al (2010) os alcaloides são derivados de aminoácidos aromáticos (triptofano, tirosina), os quais são derivados do ácido chiquímico, e também de aminoácidos alifáticos (ornitina, lisina).

Condizente ao autor Peres (2004) nas histórias da antiguidade, o uso dessa classe de metabólitos secundários foi bastante conhecida como plantas da “sombra da noite”, ou seja plantas com aplicações tóxicas e perigosas devido os efeitos alucinógenos, na qual o caso mais famoso descrito na literatura foi a execução do filósofo grego Sócrates, que foi condenado a ingerir espécie vegetal *Conium maculatum*, uma fonte do alcaloide coniina (FIGURA 5).

Os alcaloides são compostos cíclicos que possuem pelo menos um átomo de nitrogênio presente em seu anel (FIGURA 5) (ROBERTS et al., 2010). Esses metabólitos secundários são insolúveis em água e solúveis em éter, possuem aplicação anestésica, hipertensiva, hipotensiva, e são marcados pela existência de compostos químicos que possuem ação no sistema nervoso central e potencial vermífida (BESSA et al., 2013).

**Figura 5 – Estrutura de alcaloides conhecidos**

Fonte: Adaptado de Corrêa (2019).

Os alcaloides são compostos heterogêneos, definidos normalmente pela presença de carbono, hidrogênio e nitrogênio, além de possuir propriedade defensiva natural (ISAH, 2019). Graças à grande diversidade estrutural dos alcaloides, várias rotas biossintéticas podem originar tais metabólitos pelas reações de descarboxilação de aminoácidos (SIMÕES et al., 2017).

### 2.3 ÓLEOS VOLÁTEIS

O Brasil, por ser considerado como um dos países mega diversos do planeta apresenta uma extensa diversidade biológica vegetal (BRACK et al., 2020), com diversas aplicações e utilidades para pesquisas, especialmente com uma imensa variedade de plantas que permitem a identificação de inúmeras substâncias biologicamente ativas (FURLAN e MOTTA, 2008). Devido à enorme biodiversidade, o Brasil apresenta uma ampla gama de compostos naturais voláteis, sugerindo que a obtenção de óleos essenciais não é só apenas possível, como também cientificamente rica devido à variedade de espécies vegetais (BIZZO et al., 2009).

Conforme a Resolução - RDC nº 2, de 15 de janeiro de 2007, os óleos essenciais são definidos como um tipo de aromatizante natural.

“São produtos voláteis de origem vegetal obtidos por processo físico (destilação por arraste com vapor de água, destilação a pressão reduzida ou outro método adequado). Podem se apresentar isoladamente ou misturados entre si, retificados, desterpenados ou concentrados. Entende-se por retificados, os produtos que tenham sido submetidos a um processo de destilação fracionada para concentrar determinados componentes; por concentrados, os que tenham sido parcialmente desterpenados; por desterpenados, aqueles dos quais tenha sido retirada a quase totalidade dos terpenos” (BRASIL, 2007).

Do ponto de vista científico, segundo Steffens (2010) a palavra “volátil” relaciona-se à rápida velocidade com que esses constituintes químicos mudam de estado, em razão de serem minúsculos componentes orgânicos se modificam ligeiramente do estado sólido ou líquido para o gasoso quando colocadas em temperatura ambiente. Na qual por meio de novas

sínteses químicas, os óleos essenciais extraídos são utilizados como novos materiais, para uso clínico, tecnológico, científico e em aplicações comerciais (SILVEIRA, et al., 2012).

Consideram-se os óleos voláteis como constituintes ativos que possuem uma individualidade química que os diferem, e obtidos por diferentes métodos extrativos, tornando sua relevância de fato verídica, em razão da sua ampla utilização em diversas áreas industriais e intensa composição de constituintes químicos (SANTOS, 2011, p.28).

## 2.4 EXTRAÇÃO DOS ÓLEOS ESSENCIAIS

Segundo Azambuja (2009) a indústria dos OEs (Óleos Essenciais) no Brasil, iniciou-se em meados de 1925, quando começou a extração do óleo essencial pau de rosa, no entanto só no final da década de 30 é que a indústria passou a extrair outras variedades de espécies vegetais. Os óleos essenciais quando são extraídos são incolores ou apresentam uma coloração ligeiramente amarelada, e normalmente são instáveis na presença de luz, ar e calor (VITTI e BRITO, 2003).

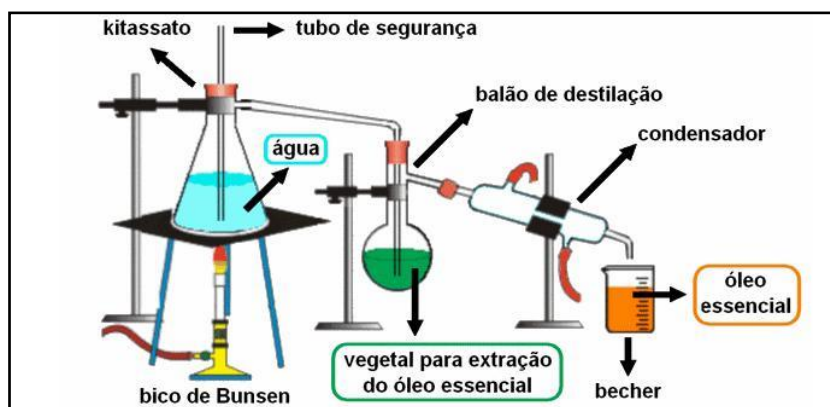
Segundo Vieira e Agostini-Costa (2007), vários estudos foram realizados no nordeste brasileiro, resultando em várias iniciativas bem-sucedidas utilizando produtos de plantas locais, que foram extraídos e utilizados na medicina local e na indústria.

As principais características de um óleo essencial são suas atividades antimicrobianas e antioxidantes, como também sua fragrância (BANDONI, 2008), que segundo Navarrete et al. (2011), faz com que seja largamente utilizado em indústrias de perfume, de aditivos naturais para aromatizar alimentos, por conter estruturas fenólicas que o tornam também ativo contra microrganismos.

Sendo assim, os óleos essenciais de plantas aromáticas atuam de forma muito variada, e podem ser obtidos por vários métodos de extração (SARTOR, 2009), tais como a hidrodestilação, destilação a vapor, extração por solventes orgânicos e extração com fluido supercrítico (OKOH et al., 2010). Devido a variedade de métodos existentes, tem-se um vasto número de escolhas que dependem da qualidade e tipo da amostra, bem como da infraestrutura laboratorial disponível (SIMÕES et al., 2003).

Tem-se então muitas técnicas de extração, no entanto o processo mais utilizado para obter extratos voláteis a partir de espécies vegetais aromáticas é a destilação por arraste a vapor (FIGURA 6), pois é um método eficaz e de menor custo (TRANCOSO et al., 2013).

**Figura 6 – Destilação por arraste a vapor**



Fonte: Trancoso et al., (2013)

Outro método eficaz na obtenção do óleo essencial de um espécime vegetal trata-se da hidrodestilação que é um método baseado na separação de componentes devido à diferença da pressão de vapor (SILVA et al., 2005), e que segundo Biasi e Deschamps 2009,

“O termo hidrodestilação pode ser empregado para três diferentes métodos: hidrodestilação com água, hidrodestilação com água e vapor e hidrodestilação por vapor. Na hidrodestilação com água, o material vegetal fica em contato com a água que é aquecida com diferentes fontes de calor. Na hidrodestilação com água e vapor, o material vegetal é colocado em um cesto metálico perfurado que por sua vez é mantido acima da lâmina de água. O vapor de baixa pressão produzido pelo aquecimento da água entra contato com o tecido vegetal, não havendo, portanto, contato deste diretamente com a água. A hidrodestilação por vapor é o método mais difundido. Neste método o material vegetal também entra em contato com o vapor, porém, este é produzido em separado e transferido normalmente em pressão superior a atmosférica, para a estrutura de destilação. Atualmente estes termos tem sido substituídos por hidrodestilação, no caso de utilização de água, e arraste por vapor para extrações utilizando água e vapor ou apenas vapor “

Dependendo do método, a composição do óleo pode variar significativamente na sua caracterização (CASSEL e BEDINOT, 2011). A caracterização química dos componentes pode ser realizada normalmente através da Gromatografia Gasosa acoplada a Espectrometria de Massas (GOMES, MATA e RODRIGUES, 2007).

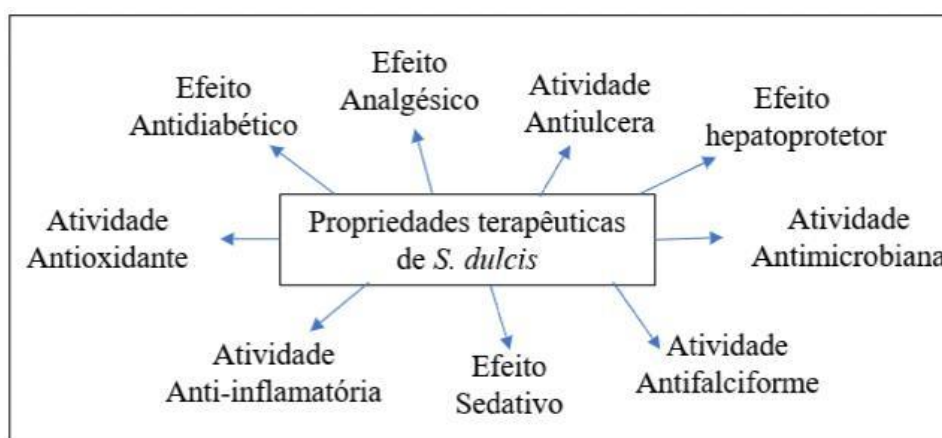
## 2.5 ATIVIDADES BIOLÓGICAS DE *Scoparia dulcis*

De acordo com Coulibaly et al. (2011) *S. dulcis* possui um grande número de propriedades e dentre elas podem ser citadas atividades anti-inflamatória, antioxidante, antidiabética, analgésica, antiúlcera, hepatoprotetora, antimicrobiana, antifalciforme e sedativa (FIGURA 7). Essas atividades farmacológicas necessitam ser mais estudadas, na perspectiva

de que frações isoladas da espécie vegetal *S. dulcis* apresentaram propriedades que permitirão aos pesquisadores, por sua vez, buscar princípios ativos para a aplicações biológicas diversas (PAMUNUWA et al., 2016).

Segundo Jiang et al. (2021) em uma revisão sobre a fitoquímica e farmacologia da erva *Scoparia dulcis* L. para o potencial tratamento da síndrome metabólica o autor ressalta sobre os extratos de *S. dulcis* que possuem acentuado efeito de redução do nível de glicose no sangue em jejum, aumentando o nível de insulina plasmática e estimulando a secreção de insulina para tratar diabetes.

**Figura 7** – Esboço esquemático das propriedades terapêuticas de *S. dulcis*



Fonte: Adaptado de Pamunuwa et al., (2016).

Os constituintes bioativos isolados incluem terpenoides, terpenos, taninos, saponinas (MURTI, 2012). Conforme a literatura, em estudos de Zulfiker e colaboradores (2010) as ações biológicas da *S. dulcis* incluem aplicações em problemas estomacais, hipertensão, diabetes, bronquite, além de ter propriedades analgésica e anti-pirética, a atividade antidiabética desta planta deve-se à existência de diterpenos, triterpenos e flavonoides, que estão presentes na parte aérea da planta (CHRISTI e FOGARTY, 2021).

Segundo estudos *Scoparia dulcis* é utilizada para o tratamento da síndrome metabólica (JIANG et al. 2021), o mesmo ressalta que essa espécie vegetal oferece um novo potencial para a medicina clínica devido às suas inúmeras propriedades terapêuticas e pode ser promovida como terapia complementar ou alternativa para pacientes com condições crônicas.

### 3 OBJETIVOS

#### 3.1 OBJETIVO GERAL

Extrair o óleo essencial das folhas de *Scoparia dulcis* e analisar os constituintes voláteis por CG-EM.

#### 3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Coletar *in natura* as folhas de *Scoparia dulcis* (vassourinha) na cidade de Buriti dos Lopes-PI;
- Extrair o óleo essencial das folhas de *Scoparia dulcis* por hidrodestilação;
- Identificar os constituintes voláteis do óleo essencial por CG-EM;
- Contribuir para o conhecimento químico da flora do Estado do Piauí.

## 4 METODOLOGIA

### 4.1 TIPO DE PESQUISA

A presente pesquisa, segundo Gil (2017), configura-se como experimental e explicativa, pois ambas as pesquisas consistem em uma investigação para se determinar um objetivo de estudo, de forma a identificar certos fatores que afetam ou contribuem para o conhecimento por meio da observação, bem como a pesquisa experimental é a que mais se aproxima do conhecimento científico.

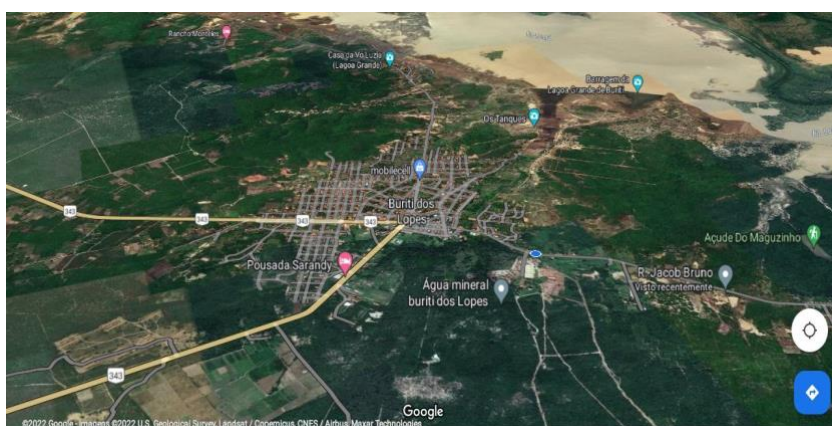
### 4.2 MATERIAIS E MÉTODOS

#### 4.2.1 Coleta do material vegetal

As folhas de *S. dulcis* foram coletadas no mês de agosto pela manhã por volta das 9:00 horas, na região da cidade de Buriti dos Lopes – PI, (FIGURA 8) conforme as seguintes coordenadas geográficas Latitude Sul: 3° 10' 46'', Longitude Oeste: 41° 52' 12''.

A excitada encontra-se preservado no herbário da Universidade Federal do Delta do Parnaíba (UFDPAR) com o número de tombo científico 7274, para referências futuras e identificação inequívoca da espécie.

**Figura 8** – Vista aérea de Buriti dos Lopes (cidade de coleta)



Fonte: Google Maps, 2022.

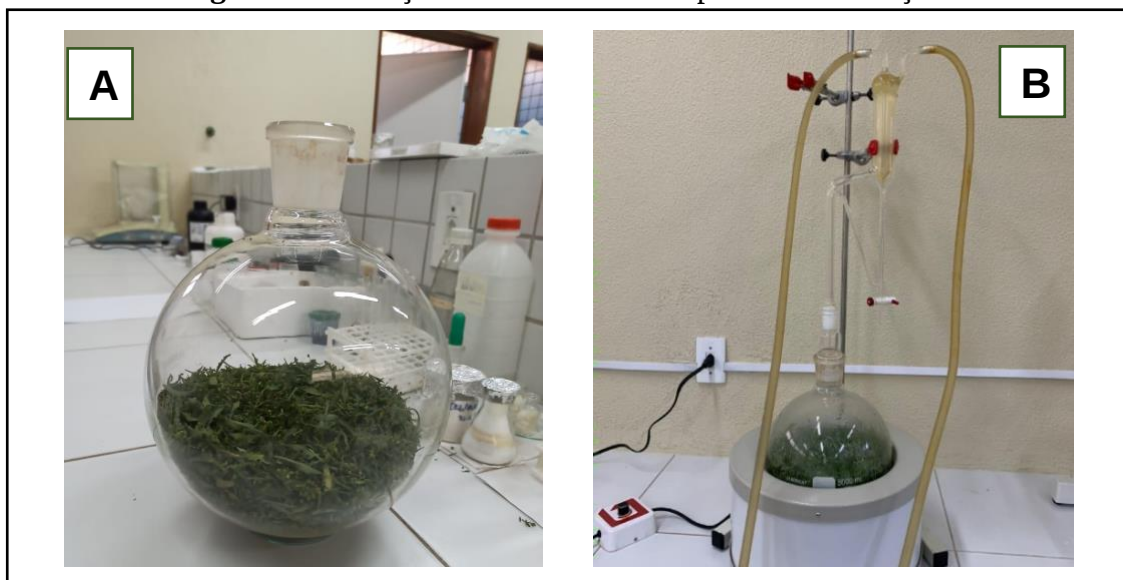
#### 4.2.2 Procedimento

##### 4.2.2.1 Extração

A extração foi realizada no Laboratório de Química Orgânica do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí (IFPI) – Campus Parnaíba, por meio da técnica de

hidrodestilação em aparelho doseador tipo Clevenger. A princípio, 619,35 g de folhas de *S. dulcis* foram ao balão de fundo redondo (5000 mL) (FIGURA 9A). As folhas foram cobertas com água destilada, fixado o balão de fundo redondo na manta aquecedora, e o balão conectado a um condensador através de um doseador tipo Clevenger (FIGURA 9B), iniciando-se, desta forma, o processo de hidrodestilação.

**Figura 9** – Extração do OE de *S. dulcis* por hidrodestilação



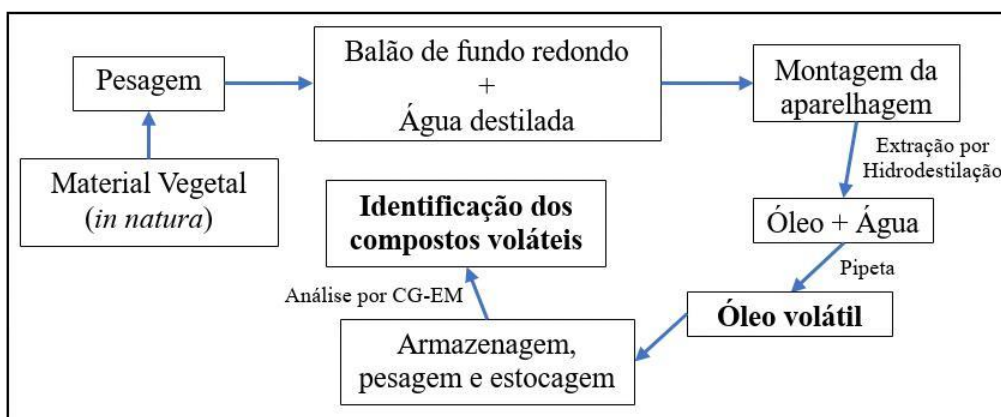
Fonte: Autoria própria, (2022).

A – Balão de fundo redondo contendo as folhas de *S. dulcis*;

B – Balão conectado ao condensador;

O processo iniciou a 100 °C, reduzindo-se posteriormente a temperatura, permanecendo, desta forma por 2 horas. Ao final, o óleo volátil foi coletado com o auxílio de uma pipeta, armazenado em um frasco de vidro, protegido da luz com papel alumínio, identificado e estocado a uma geladeira. Abaixo o fluxograma de todo o procedimento experimental (FIGURA 10).

**Figura 10** – Fluxograma do procedimento experimental



Fonte: Autoria própria (2022).

#### 4.2.2.2 Identificação dos metabólitos secundários voláteis

Para identificação dos constituintes voláteis de *S. dulcis*, o óleo extraído foi encaminhado para o Laboratório de Produtos Naturais da UFSCar em São Carlos – SP para análise por Cromatografia Gasosa acoplada a Espectrometria de Massas (CG-EM). Foi utilizado um espectrômetro Shimadzu GCMS-TQ Series GC-2010 equipado com uma coluna capilar (DB-5 Supelco, 30  $\mu\text{m} \times 0,25 \mu\text{m id} \times 0,25 \mu\text{m}$  de espessura de filme).

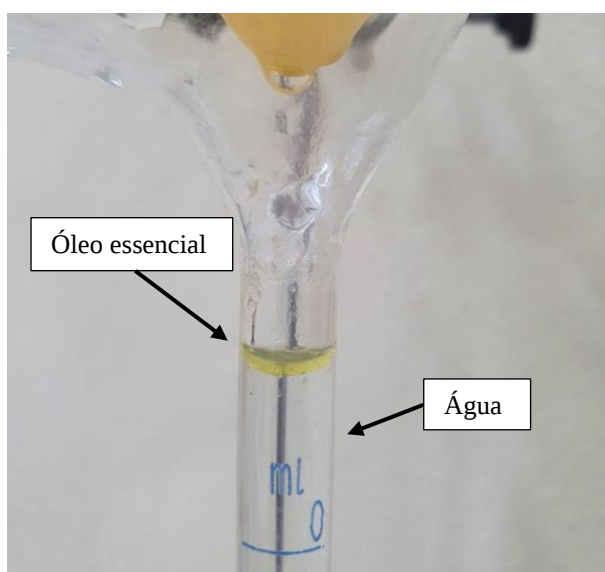
As condições utilizadas para CG-EM foram: injeção de amostra de 1,0  $\mu\text{L}$ , gás de arraste hélio com vazão de 1.0  $\text{mL min}^{-1}$ , modo split (1:30), temperatura de entrada 290°C, fonte de íons a 290°C e transferência de linha a 250°C. O detector seletivo de massa foi ajustado para 70 eV e uma faixa de massa de 45 a 500 amu. A temperatura do forno foi programada de 40°C (0 min) a 250°C em um gradiente de 6°C  $\text{min}^{-1}$ , e o tempo total de análise de 56.67 min. A identificação dos compostos foi realizada utilizando a biblioteca NIST 17s.lib com base no pareamento de espectros MS/MS, sendo comparados com dados da literatura para estabelecer uma correlação de similaridade (Score).

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 5.1 OBTENÇÃO DO ÓLEO ESSENCIAL DE *S. dulcis*

Sob aquecimento constante, os vapores da mistura de OE e água condensam e o destilado é separado em duas camadas imiscíveis (FIGURA 11). A água é direcionada para parte inferior e é recirculada para o balão contendo as folhas, enquanto o óleo volátil é acumulado na parte superior devido à baixa densidade, o que favoreceu ser coletado separadamente.

**Figura 11** – Óleo essencial da *S. dulcis*



Fonte: Autoria própria, 2022.

O OE de *S. dulcis* (0.02 g) (FIGURA 11) apresentou coloração amarelo-clara e odor forte.

O rendimento do OE, segundo Castelo et al. (2010) pode ser calculado conforme a Equação 1. Para o OE das folhas de *S. dulcis* o rendimento obtido foi de 0,0032%.

$$\text{Equação 1: } \% = (M2 / M1) \times 100$$

Onde:

% = Rendimento do OE em porcentagem

M2 = Massa do óleo essencial extraído (g)

M1 = Massa das folhas utilizada na extração (g)

Efetuada o cálculo temos que:

$$\% = (M2 / M1) \times 100$$

$$\% = (0,02 \text{ g} / 619,35 \text{ g}) \times 100$$

$$\% = 0,0032$$

O rendimento obtido foi considerado muito baixo, uma vez que Ordaz et al. (2011) relataram rendimento de 0,016% para o óleo essencial das folhas de *S. dulcis*, valor cinco vezes maior do que o obtido no presente trabalho. No entanto, vale ressaltar possíveis fatores que poderiam ter interferido na obtenção do óleo essencial, fatores endógenos tais como, fungos e micro-organismos, que segundo Simões et al (2010) alteram tanto o rendimento como a composição química de óleos essenciais.

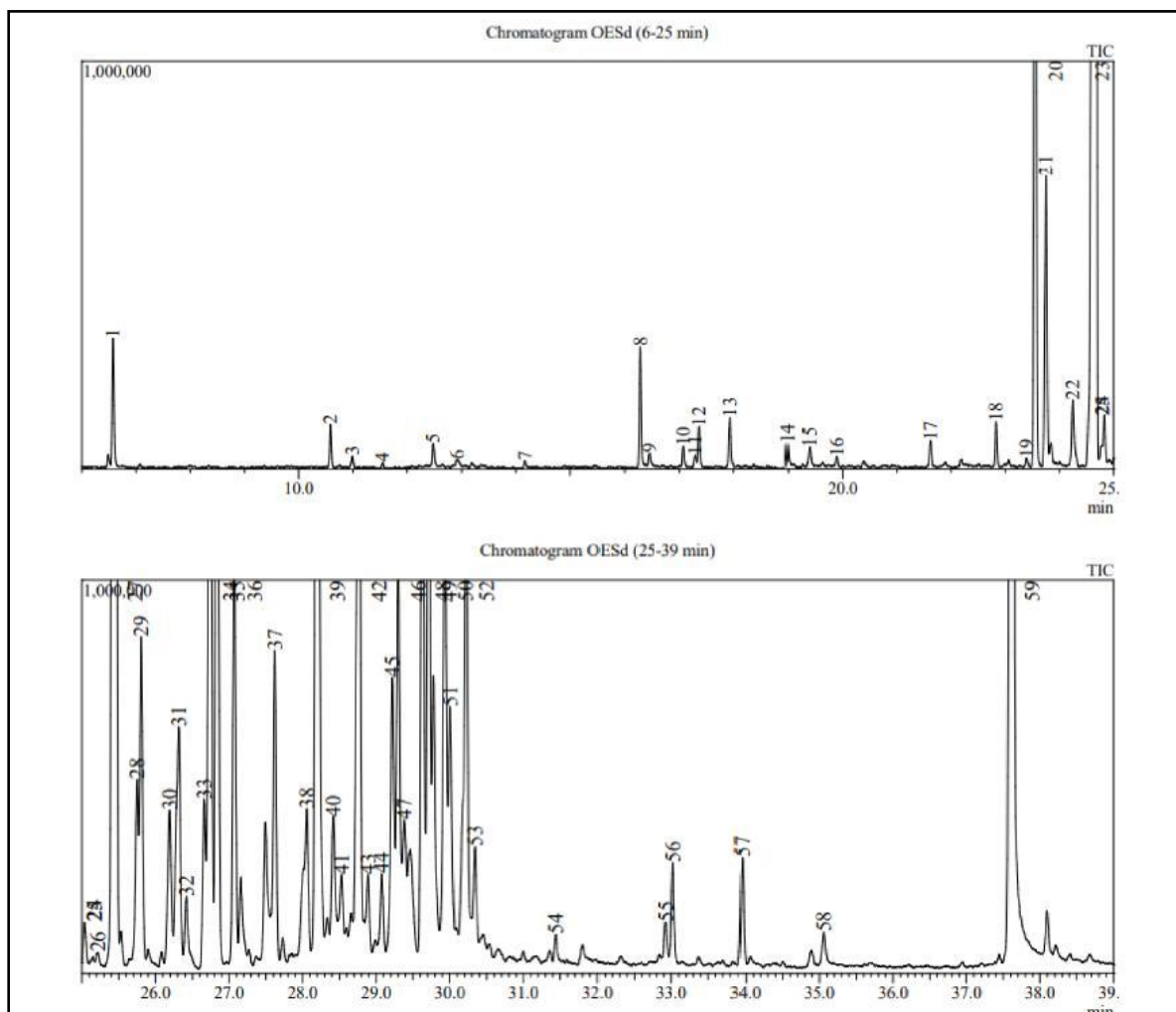
Além de fatores logísticos, como os cuidados com o armazenamento e a secagem das folhas após a coleta. Foram levados também em consideração, fatores ambientais, como a intensidade da radiação solar, as folhas sujeitas à ação de fungos e micro-organismos que poderiam danificar as glândulas oleíferas presentes na superfície das folhas coletadas, e a localização geográfica (SILVA et al., 2003). Aspectos que por consequência poderiam interferir para o baixo rendimento do OE de *Scoparia dulcis*.

## 5.2 IDENTIFICAÇÃO DOS CONSTITUINTES VOLÁTEIS DE *S. dulcis*

A identificação dos constituintes voláteis foi feita por Cromatografia Gasosa acoplada a Espectrometria de Massas (CG-EM) com método de ionização por Impacto de Elétrons (EI). Técnica que segundo Silvestrini, Webster e Kiemle (2012) tem como princípio básico a geração de íons para análise química e identificação, nela as moléculas da amostra são vaporizadas e submetidas a um feixe de elétrons de alta energia, normalmente 70 eV, para assim serem ionizadas e detectadas.

Após a análise por CG-EM na amostra do óleo essencial de *S. dulcis* foram detectados e identificados um total de 59 constituintes químicos, sendo 72.88% da composição correspondente a compostos químicos voláteis (QUADRO 1). O cromatograma abaixo (Figura 12) evidencia aproximadamente 59 bandas referentes aos compostos identificados na espécie em estudo.

**Figura 12** – Cromatograma do OE de *S. dulcis* obtido por CG-EM



Fonte: Pesquisa direta, (2022).

Dentre os constituintes identificados, o cariofileno (banda 23) foi o composto majoritário, com 43,02%, seguido de humuleno (banda 27), fitol (banda 59), óxido de cariofileno (banda 39) e copaeno (banda 20) com percentual de 17,90; 13,43; 5,09; 2,00% respectivamente. Os constituintes indenticados são compatíveis com dados da literatura para o OE das folhas de *S. dulcis* (ORDAZ et al., 2011).

**Quadro 1** – Análise CG-EM da composição química do óleo essencial de *S. dulcis*  
(Continua)

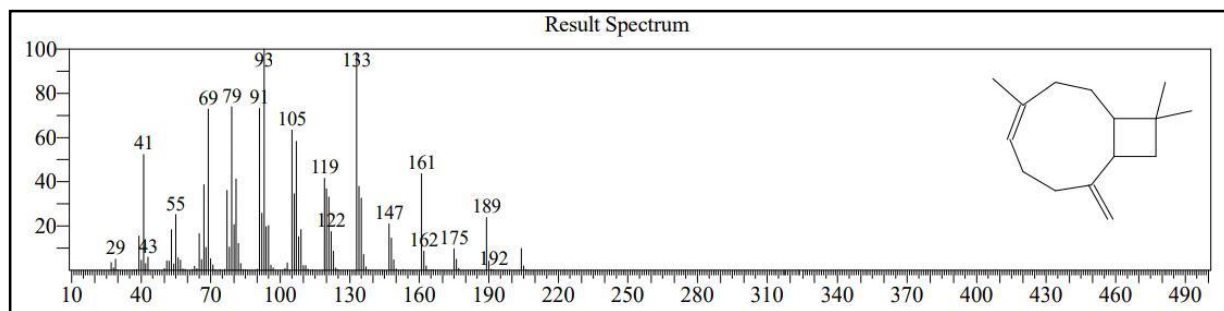
| Banda | Rt (min) | Nome                                                                                                  | Area (%) | Formula                                        | Similarity* |
|-------|----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|------------------------------------------------|-------------|
| 1     | 6.573    | 4-Penten-2-ol                                                                                         | 0.22     | C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O               | 94          |
| 2     | 10.586   | Triciclo[2.2.1.0(2,6)]heptano, 1,7,7-trimetil-                                                        | 0.07     | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | 94          |
| 3     | 10.989   | $\alpha$ -Pineno                                                                                      | 0.02     | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | 94          |
| 4     | 11.547   | Camfeno                                                                                               | 0.01     | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | 90          |
| 5     | 12.482   | $\beta$ -Pineno                                                                                       | 0.04     | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | 92          |
| 6     | 12.918   | 3-Ciclohexen-1-ol, 1-metil-                                                                           | 0.02     | C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> O               | 72          |
| 7     | 14.171   | Limoneno                                                                                              | 0.02     | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | 81          |
| 8     | 16.284   | Linalool                                                                                              | 0.21     | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O              | 93          |
| 9     | 16.456   | Nonanal                                                                                               | 0.02     | C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O               | 92          |
| 10    | 17.079   | Oxirano, octilo                                                                                       | 0.03     | C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O              | 82          |
| 11    | 17.296   | 2-heptanol, 5-etil-                                                                                   | 0.02     | C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> O               | 85          |
| 12    | 17.370   | Ácido ciclopentanocarboxílico, éster decílico                                                         | 0.07     | C <sub>16</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub> | 80          |
| 13    | 17.939   | Ácido hexanóico, 2,4-dimetil-, éster metílico, (2DL,4L)-                                              | 0.09     | C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>  | 92          |
| 14    | 18.985   | $\alpha$ -Terpineol                                                                                   | 0.05     | C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O              | 92          |
| 15    | 19.397   | 1,2-Ciclohexanodiol, 1-(1-metiletil)-, cis-                                                           | 0.04     | C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>  | 82          |
| 16    | 19.890   | Biciclo[2.2.1]hept-2-eno, 1,7,7-trimetil-                                                             | 0.02     | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>                | 87          |
| 17    | 21.622   | Tridecano                                                                                             | 0.04     | C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>                | 95          |
| 18    | 22.832   | $\alpha$ -Cubebeno                                                                                    | 0.08     | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 92          |
| 19    | 23.399   | Ylangene                                                                                              | 0.02     | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 87          |
| 20    | 23.555   | <b>Copaene</b>                                                                                        | 2.00     | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 94          |
| 21    | 23.750   | Biciclo[5.2.0]nonano, 4-metileno-2,8,8-trimetil-2-vinil-                                              | 0.55     | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 84          |
| 22    | 24.250   | $\alpha$ -longipineno                                                                                 | 0.15     | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 89          |
| 23    | 24.663   | <b>Cariofileno</b>                                                                                    | 43.02    | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 96          |
| 24    | 24.831   | Germacreno D                                                                                          | 0.08     | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 88          |
| 25    | 25.037   | Aromandendreno                                                                                        | 0.09     | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 94          |
| 26    | 25.215   | cis- $\beta$ -fameseno                                                                                | 0.03     | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 84          |
| 27    | 25.448   | <b>Humuleno</b>                                                                                       | 17.90    | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 94          |
| 28    | 25.750   | cis-Muurolo-3,5-dieno                                                                                 | 0.31     | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 87          |
| 29    | 25.804   | $\gamma$ -Muuroleno                                                                                   | 0.53     | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 93          |
| 30    | 26.191   | Azuleno, 1,2,3,5,6,7,8,8a-octahidro-1,4-dimetil-7-(1-metiletenil)-, [1S-(1.alfa.,7.alfa.,8a.beta. )]- | 0.35     | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 91          |
| 31    | 26.316   | $\alpha$ -Muuroleno                                                                                   | 0.60     | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 92          |
| 32    | 26.419   | cis-p-mentha1(7),8-dien-2-ol                                                                          | 0.11     | C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O              | 78          |
| 33    | 26.660   | (1S,4aR,8aS)-1-Isopropil-7-metil-4-metileno-1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahidronaftaleno                      | 0.31     | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 93          |
| 34    | 26.741   | Nafthaleno, 1,2,3,5,6,8a-hexahidro-4,7-dimetil-1-(1-metiletil)-, (1S-cis)-                            | 1.95     | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 92          |

**Quadro 1** – Análise CG-EM da composição química do óleo essencial de *S. dulcis* (Conclusão)

|    |        |                                                                                            |       |                                                |    |
|----|--------|--------------------------------------------------------------------------------------------|-------|------------------------------------------------|----|
| 35 | 26.835 | cis-Calameneno                                                                             | 1.76  | C <sub>15</sub> H <sub>22</sub>                | 93 |
| 36 | 27.071 | cis-Cadina-1,4-dieno                                                                       | 0.85  | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 94 |
| 37 | 27.622 | trans-Biciclo[4.1.0]heptano,-3-ciclopropil,-7-hidroximetil                                 | 0.61  | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O              | 82 |
| 38 | 28.056 | 1H-Cicloprop[e]azulen-7-ol, decahidro-1,1,7-trimetil-4-metilene-, [1ar-(1α,4α,7β,7aβ,7bα)] | 0.29  | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O              | 91 |
| 39 | 28.199 | <b>Óxido de cariofileno</b>                                                                | 5.09  | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O              | 93 |
| 40 | 28.417 | 3,7-ciclodecadien-1-ona, 10-(1-metiletenil)-, (E,E)-                                       | 0.25  | C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> O              | 87 |
| 41 | 28.528 | Humulene epoxide I                                                                         | 0.11  | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O              | 90 |
| 42 | 28.764 | (1R,3E,7E,11R)-1,5,5,8-Tetrametil-12-oxabicyclo[9.1.0]dodeca-3,7-dieno                     | 1.46  | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O              | 91 |
| 43 | 28.889 | Epóxido de cis-(Z)-α-bisaboleno                                                            | 0.14  | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O              | 84 |
| 44 | 29.076 | 4a(2H)-Naftalenol, 1,3,4,5,6,8a-hexahidro-4,7-dimetil-1-(1-metiletil)-, (1S,4R,4aS,8aR)-   | 0.15  | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O              | 86 |
| 45 | 29.221 | Humulenol-II                                                                               | 0.53  | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O              | 87 |
| 46 | 29.300 | 11,11-Dimetil-4,8-dimetilenobicyclo[7.2.0]undecan-3-ol                                     | 0.52  | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O              | 89 |
| 47 | 29.385 | Cubenol                                                                                    | 0.08  | C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O              | 84 |
| 48 | 29.630 | 1,8,11-Heptadecatrieno, (Z,Z)-                                                             | 1.56  | C <sub>17</sub> H <sub>30</sub>                | 93 |
| 49 | 29.716 | 1,8,11,14-Heptadecatetraeno, (Z,Z,Z)-                                                      | 1.22  | C <sub>17</sub> H <sub>28</sub>                | 92 |
| 50 | 29.935 | Eudesma-4(15),7-dien-1β-ol                                                                 | 1.00  | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O              | 86 |
| 51 | 30.006 | (1R,2R,4S,6S,7S,8S)-8-Isopropil-1-metil-3-metilentriciclo[4.4.0.02,7]decan-4-ol            | 0.40  | C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>                | 86 |
| 52 | 30.221 | E-14-Hexadecenal                                                                           | 0.79  | C <sub>16</sub> H <sub>30</sub> O              | 94 |
| 53 | 30.340 | Dodeca-1,6-dien-12-ol, 6,10-dimetil-                                                       | 0.17  | C <sub>14</sub> H <sub>26</sub> O              | 90 |
| 54 | 31.441 | 1-Tetradeceno                                                                              | 0.04  | C <sub>14</sub> H <sub>28</sub>                | 91 |
| 55 | 32.923 | neofitadieno                                                                               | 0.06  | C <sub>20</sub> H <sub>38</sub>                | 92 |
| 56 | 33.018 | 6,10,14-trimetilpentadecan-2-ona                                                           | 0.17  | C <sub>18</sub> H <sub>36</sub> O              | 93 |
| 57 | 33.956 | E-15-Heptadecenal                                                                          | 0.19  | C <sub>17</sub> H <sub>32</sub> O              | 97 |
| 58 | 35.057 | Ácido n-hexadecanoico                                                                      | 0.06  | C <sub>16</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub> | 89 |
| 59 | 37.615 | <b>Fitol</b>                                                                               | 13.43 | C <sub>20</sub> H <sub>40</sub> O              | 97 |

Fonte: Pesquisa direta, (2022).

O cariofileno (banda 23) foi o constituinte majoritário (FIGURA 13) com tempo de retenção (Rt) de respectivamente 24,663 min, e segundo Oliveira-Junior et al. (2019) é bastante abundante nas espécies vegetais. É um sesquiterpenoide, na qual é formado a partir do farnesil difosfato (FPP), originando o cátion humulílico e, em seguida o cátion cariofilílico (SILVA, 2006). É um composto encontrado em várias espécies vegetais, principalmente nos óleos voláteis, que apresenta estrutura química bem elucidada e conta com várias atividades biológicas já descritas na literatura.

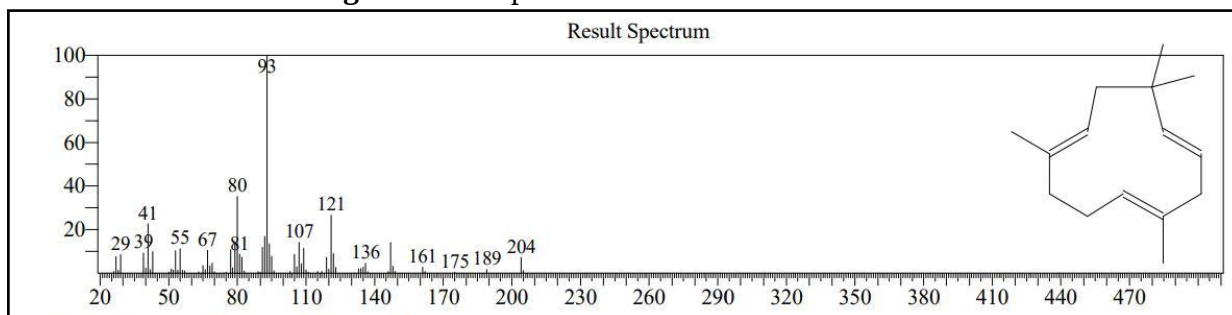
**Figura 13** – Espectro de massas do Cariofileno

Fonte: Pesquisa direta, (2022).

O constituinte identificado em *S. dulcis* como cariofileno apresentou um pico íon molecular  $m/z$  204 o que corresponde a sua fórmula  $C_{15}H_{24}$ , que a princípio ocorre a eliminação de um grupamento metila  $[M - 15]$  formando o fragmento  $m/z$  189, composto com carbocátion, que a partir deste carbocátion ocorrem outras fragmentações consecutivas na molécula.

O constituinte identificado apresenta um pico com base intensa em  $m/z$  93, que é resultante do íon  $C_7H_9^+$  que indica um anel benzênico com cadeia lateral alquila podendo sofrer ramificações no carbono e o seu substituinte maior pode ser eliminado mais rapidamente, ademais picos de intensidades distintas em  $m/z$ : 133, 79, 69, 41, referem-se a fragmentações que ocorrem com o rompimento de ligações e eliminação de moléculas neutras. Pico  $m/z$  69, geralmente em hidrocarbonetos cíclicos aromáticos é evidenciado pela presença do íon  $C_5H_9^+$ , e o pico  $m/z$  41 é relacionado ao fragmento do íon  $C_3H_5^+$ .

No cromatograma da Figura 12, descrita anteriormente, a banda 27 foi identificado como sendo o humuleno (FIGURA 14) um isômero do cariofileno. Esse hidrocarboneto apresenta o pico do íon molecular  $m/z$  204, ou seja, o pico de maior massa o que corresponde a uma fórmula elementar de  $C_{15}H_{24}$ , que a princípio ocorre a eliminação de um grupamento metila formando o fragmento  $m/z$  189, o que forma um composto com carbocátion que posteriormente sofre novas fragmentações com a eliminação de radicais e moléculas neutras.

**Figura 14** – Espectro de massas do Humuleno

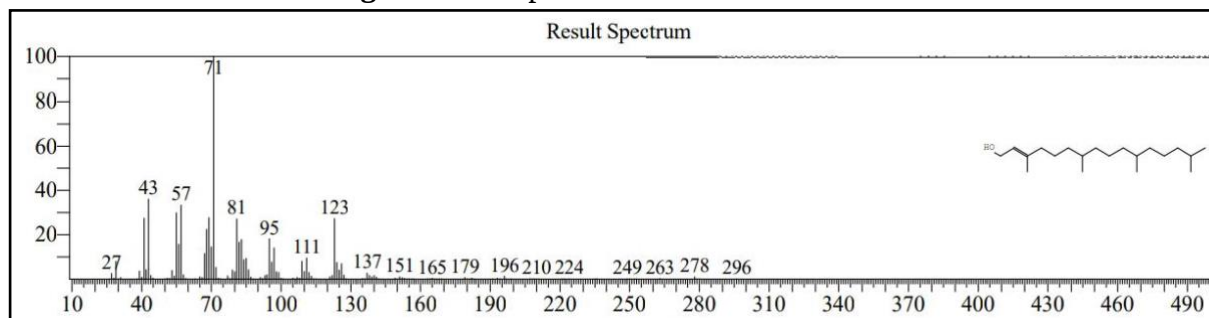
Fonte: Pesquisa direta, (2022).

O humuleno possui um pico base característico em  $m/z$  93 devido a presença de um grupamento com insaturações conjugadas, bem como apresentou distintas intensidades em  $m/z$ :

121, 80 e 41. O pico em  $m/z$  41 é atribuído ao fragmento  $C_3H_5^+$  formado durante a clivagem da ligação carbono-carbono, acompanhado de perda de hidrogênio (RABÊLO, 2010).

A banda 59 do cromatograma da Figura 12, descrita anteriormente, com um tempo de retenção de respectivamente 37,615 min foi atribuído ao fitol (FIGURA 15), um terpenoide muito frequente em extratos de plantas. Este diterpeno está presente em todos vegetais que apresentam clorofila, pois é um constituinte na molécula de clorofila (NEO, 2017).

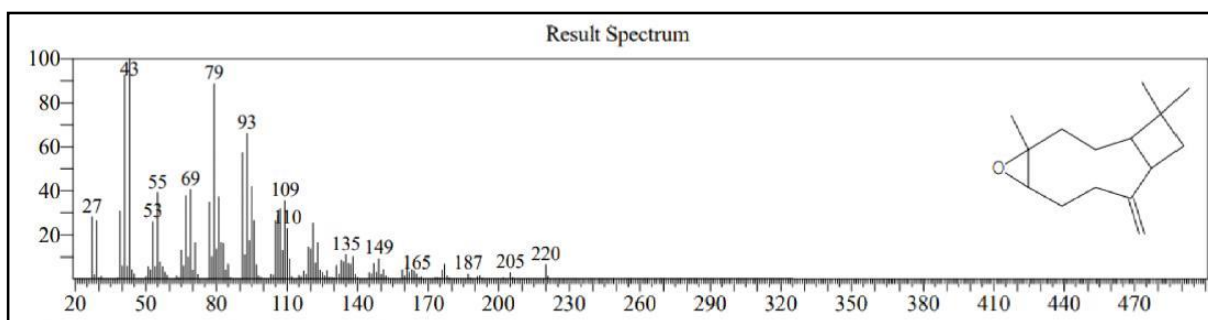
**Figura 15** – Espectro de massas do fitol



Fonte: Pesquisa direta, (2022).

Possui um pico do íon molecular  $m/z$  296, o que condiz a sua fórmula  $C_{20}H_{40}O$ , o pico do íon molecular tem baixa intensidade por se tratar de um álcool, e normalmente eles possuem uma intensidade do íon molecular quase ausente, efeito que se deve ao processo de desidratação que ocorre. Previamente, o íon molecular do fitol perde uma molécula de água [ $M - 18$ ] formando por sua vez o íon  $m/z$  278, o que conseqüentemente forma um composto contendo um carbocátion, que posteriormente sofre sucessivas fragmentações, bem como a perda do grupo metila [ $M - 15$ ] formando o pico  $m/z$  263, e posteriormente íons característicos de  $m/z$ : 123, 81, 71, 57 e 43, com fragmentações conforme a possível clivagem na molécula em diferentes pontos, sendo o  $m/z$  71 o pico base, ou seja, o pico que caracteriza o composto, o mais estável.

Dentre os compostos majoritários encontrados em *S.dulcis* de acordo com os dados obtidos do equipamento de análise utilizado, alguns constituintes possuíam características estruturais semelhantes, e dentre os compostos sugeridos a banda 39 (FIGURA 12) foi atribuída ao óxido de cariofileno (FIGURA 16), um sesquiterpeno cíclico.

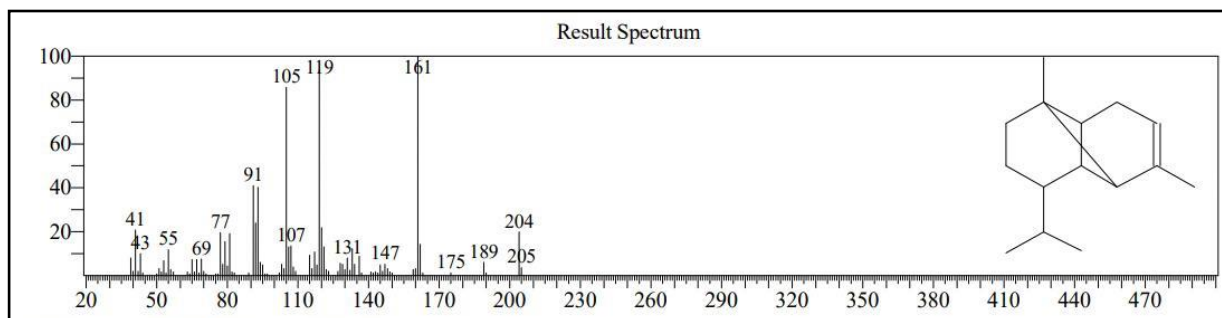
**Figura 16** – Espectro de massas do óxido de cariofileno

Fonte: Pesquisa direta, (2022).

O óxido de cariofileno apresenta pico de íon molecular em  $m/z$  220 o que representa sua fórmula  $C_{15}H_{24}O$ . A princípio ocorre a eliminação de um grupamento metila  $[M - 15]$  na forma de radical, assim formando o fragmento  $m/z$  205, composto com carbocátion terciário, a partir deste surgem novas fragmentações na molécula, seguidas de rearranjos e eliminações de partículas neutras.

O espectro do óxido de cariofileno possui fragmentos com boas intensidades em  $m/z$  109, 79 e 93, o pico em  $m/z$  93 foi derivado da formação do íon  $m/z$  135 e da perda de um radical propeno ( $m/z$  43) mais um hidrogênio (DELGADO, MENDES-CALLEJAS e CELIS, 2021). O íon diagnóstico  $m/z$  109 é formado a partir do rompimento da ligação entre os átomos de carbono da estrutura e pela eliminação de uma molécula neutra com  $m/z$  96  $[205 - 96]$ , bem como o fragmento  $m/z$  109 sofre a eliminação de uma molécula de butadieno com  $m/z$  54 e forma um fragmento com pico em  $m/z$  55 que condiz com a estrutura de um íon isobuteno ( $C_4H_8^+$ ). O pico base  $m/z$  43 do óxido de cariofileno pode ser atribuído pelo rompimento de ligações na estrutura e a eliminação de um fragmento na forma de uma molécula neutra.

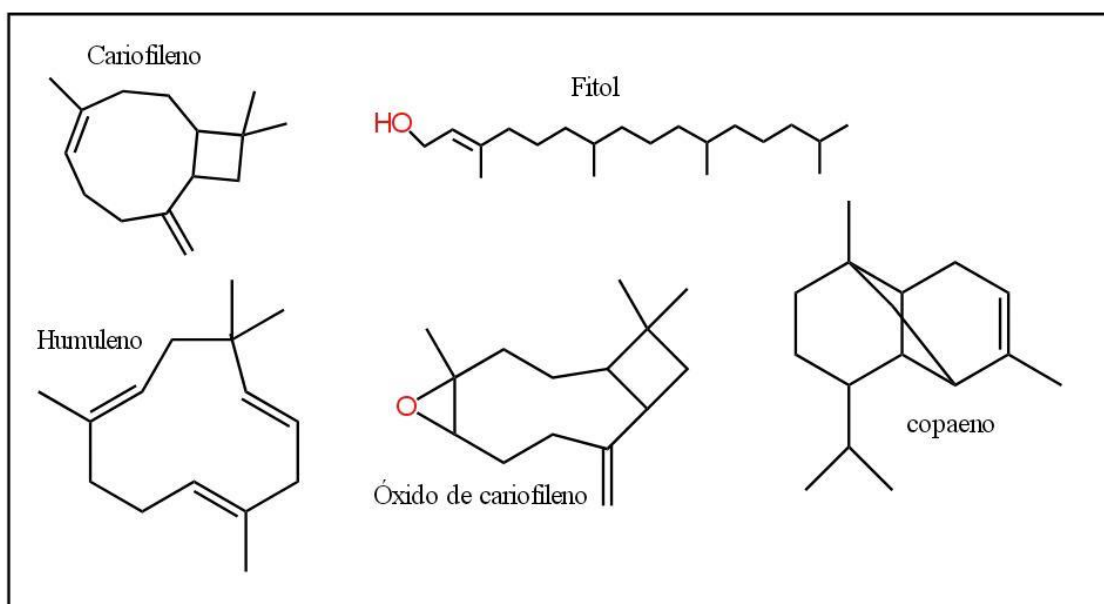
A banda 20 do cromatograma ilustrado na Figura 12, foi identificado como sendo o copaeno de fórmula  $C_{15}H_{24}$  (FIGURA 17), um isômero do cariofileno. Esse hidrocarboneto, especificamente um sesquiterpeno, apresenta o pico do íon molecular  $m/z$  204 e isótopo  $m/z$  205  $[M + 1]$ , previamente ocorre a eliminação de um grupamento radical metila  $[M - 15]$  formando o fragmento  $m/z$  189, composto que contém um carbocátion, e a partir deste composto surgem outras fragmentações com picos característicos com  $m/z$  161, 119 e 105.

**Figura 17** - Espectro de massas do copaeno

Fonte: Autoria própria, (2022).

Seu pico base é em  $m/z$  161 [M - 43] o qual é referente ao íon  $C_3H_7^+$  com o pico de fragmentação  $m/z$  119 [161 - 42] que se referente ao íon  $C_3H_6^+$ . Geralmente picos intensos em hidrocarbonetos aromáticos com  $m/z$  105 se dá pela presença de íons  $C_8H_9^+$  (SILVERSTEIN, WEBSTER e KIEMLE, 2012).

Os constituintes químicos identificados pela técnica de CG-EM apresentam uma considerável variedade estrutural, destacando-se terpenos e outros alifáticos, sendo encontrados com cadeias carbônicas aromáticas, cíclicas e ramificadas. Os compostos majoritários identificados pertencem a classe dos terpenos, o que é condizente aos estudos de Martinho et al. (2014) que ressaltara nos óleos essenciais como constituintes majoritários terpenos e seus derivados. E dentre eles contidos em *S. dulcis* os sesquiterpenos são os mais abundantes, bem como alguns deles definem atividades biológicas de *S. dulcis* conforme a literatura. Abaixo na figura 18 é dada a ilustração das estruturas dos compostos majoritários identificados no óleo volátil das folhas de *Scoparia dulcis*.

**Figura 18** – Constituintes majoritários identificados nas folhas de *S. dulcis*

Fonte: Autoria própria, (2022).

### 5.3 METABÓLITOS E SUAS ATIVIDADES BIOATIVAS EM *S. dulcis*

Segundo Christi e Fogarty (2021) *S. dulcis* possui muitas propriedades medicinais, sendo o seu uso difundido como terapia alternativa e complementar, com propriedades antidiabética, antioxidante. A análise química de *S. dulcis* identificou vários constituintes químicos com ações biológicas relacionadas ao tratamento de problemas estomacais, hipertensão, diabetes, bronquite, possuindo atividade antipirética, atividade antidiabética, além de ter propriedades analgésicas (ZULFIKER et al., 2010).

Dentre os terpenos encontrados em *S. dulcis* destacam-se o cariofileno, no qual representa 43,02% do óleo volátil. O cariofileno ou  $\beta$ -cariofileno, é um sesquiterpeno bicíclico natural (VIVEIROS et al., 2022), presente como um importante componente de muitos óleos essenciais e precursor para outros constituintes químicos, na literatura é considerado como um dos principais componentes ativos presentes nas espécies vegetais, para Viveiros et al. (2022) o cariofileno possui considerável atividade anti-inflamatória.

A espécie botânica *S. dulcis* apresenta propriedades anti-inflamatórias, antioxidantes e antimicrobiana (JIANG et al., 2021). O cariofileno e seus derivados mesmo com uma estrutura volumosa, possui fluidez e penetra facilmente nas membranas celulares, o que determina sua biodisponibilidade e uma variedade de propriedades biológicas, tais como anti-inflamatória, sedativa e antioxidante, segundo a literatura (GYRDYMOVA, YULIA e RUBTSOVA, 2021). A atividade anti-inflamatória e antibacteriana dos óleos essenciais está associada com a lipofilicidade dos seus compostos químicos, já que podem facilmente difundir através da membrana celular, e esta é uma importante vantagem no que diz respeito à interação com alvos intracelulares (VIEIRA et al., 2017). Logo a presença do cariofileno explica a boa ação anti-inflamatória e antibacteriana de *S. dulcis*.

Em estudos de Zulfiker et al. (2010), as ações biológicas da *S. dulcis* incluem aplicações em problemas relacionados a diabetes. A atividade antidiabética está relacionada aos terpenos, especificamente carotenoides, que segundo Christi e Fogarty (2021) estão presentes na parte aérea da planta, bem como, em razão da capacidade antioxidante dos carotenoides apresenta um papel fundamental na prevenção de doenças associadas ao estresse oxidativo, tais como doenças neurodegenerativas, problemas estomacais, diabetes e o envelhecimento precoce (JIANG et al., 2021).

Os demais terpenos majoritários identificados no óleo essencial de *S. dulcis*, humuleno (17.90%), fitol (13.43%), óxido de cariofileno (5.09%) e copaeno (2%), possuem propriedades anti-inflamatória, analgésica, hepatoprotetora e antimicrobiana. O humuleno na literatura é

conhecido pelo seu potencial anti-inflamatório (TIN et al., 2019), já o copaeno pelo aumento da atividade antioxidante no corpo humano, o que permite também que exerça efeito hepatoprotetor (NOGUEIRA, NOVAES e SANCHEZ, 2012).

O óxido de cariofileno destaca-se pelo efeito analgésico e antioxidante (GYRDYMOVA, YULIA e RUBTSOVA, 2021). Já o terpenoide fitol, um diterpeno membro do grupo dos alcoóis alifáticos insaturados de cadeia ramificada longa (NEO, 2017), possui forte atividade antioxidante atribuída à presença do grupo hidroxila presente em sua molécula (CARVALHO et al., 2019). Os constituintes associados à capacidade antioxidante são capazes de absorver radicais livres e assim, inibir a cadeia de iniciação ou até mesmo interromper a cadeia de propagação das reações oxidativas no organismo humano (JIAO et al., 2018). Sendo assim, humuleno, fitol, copaeno e o óxido de cariofileno conforme suas estruturas químicas apresentam propriedades bioativas terapêuticas que são condizentes as relatadas para *S. dulcis*.

Muitas pesquisas têm evidenciado as ações benéficas dos metabólitos secundários, mas vale destacar que as substâncias majoritárias encontradas nem sempre são os componentes responsáveis pelas propriedades que estes demonstram (SARKAR et al., 2020). No entanto, considerando os dados descritos na literatura, percebe-se que os componentes majoritários identificados em *S. dulcis* são os responsáveis por diversas atividades bioativas.

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

As espécies vegetais possuem complexidades no que diz respeito à composição química. Esta é responsável pela descoberta de propriedades medicinais e impulsiona a Química de Produtos Naturais.

O OE das folhas de *S. dulcis* foi obtido com rendimento de 0,0032% e, a partir da análise por CG-EM, foram identificados 59 constituintes, sendo os majoritários cariofileno (43,02%), humuleno (17,90%), fitol (13,47%), óxido de cariofileno (5,09%), copaeno (2,00%).

Nessa perspectiva, considera-se que este estudo poderá contribuir para posteriores trabalhos relacionados às práticas de uso de *S. dulcis*, como também, contém informações essenciais para orientação e consolidação das propriedades terapêuticas presentes na espécie. No entanto, embora muitos constituintes tenham sido identificados na espécie de estudo, são poucos os estudos que relacionam tais compostos aos efeitos biológicos indicados.

## REFERÊNCIAS

- ALBACH, M.; OXELMAN B.; Bringing together the “new” Plantaginaceae. **American Journal of Botany** 92(2): 297-315, 2005.
- ALVES, Massao Geraldo. **Óleos essenciais**, SAPORITI. 2011. Disponível em: <<https://www.univates.br/media/workshop/palestras/Oleos-essenciais.pdf>>. Acesso em: 21/05/ 2022.
- ANGELO, Priscila Milene; JORGE, Neuza. Compostos fenólicos em alimentos–Uma breve revisão. **Revista do Instituto Adolfo Lutz**, v. 66, n. 1, p. 1-9, 2007.
- AZAMBUJA, Wagner. Óleos essenciais: O início de sua história no Brasil. Revista: **Leosessenciais**, RG, 2009. Disponível em:< <http://oleosessenciais.org/>>. Acesso em: 18/06/2022.
- BAKKALI, F. et al., Biological effects of essential oils – a review. **Food and Chemical Toxicology**, v. 46, n. 2, p. 446-475, 2008. Disponível em: <<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/17996351>>. Acesso em: 16/06/2022.
- BANDONI, A. L. Os recursos vegetais aromáticos no Brasil: seu aproveitamento Industrial para a produção de aromas e sabores. Vitória: **EDUFES**, 2008.
- BARRETO, S. F.; GASPI, F. O. G.; DE OLIVEIRA, C. F.; Estudo químico das principais vias do metabolismo secundários vegetal. **Revista científica da FHO/Fundação Hermínio Ometto**, v. 8, n.1, p. 60-72, 2020.
- BESSA, N.G. F.; BORGES, J. C. M.; BESERRA, F. P.; CARVALHO, R. H. A.; PEREIRA, M. A. B.; FAGUNDES, R.; CAMPOS, S. L.; RIBEIRO, L. U.; QUIRINO, M. S.; CHAGAS JUNIOR, A. F.; ALVES, A . Prospecção fitoquímica preliminar de Plantas nativas do cerrado de uso popular medicinal pela comunidade rural do Assentamento vale verde – Tocantins. **Revista Brasileira Plantas Medicinais**. V.15, n.4, supl.I, p.692-707, 2013.
- BIASI, Luiz A; DESCHAMPS, Cícero. Plantas aromáticas: do cultivo à produção de óleo essencial. Curitiba: **Layr Studio Gráfico e Editora Ltda.**, 106p, 2009.
- BIZZO, H. R.; HOVELL, A. M. C. & REZENDE, C. M. Óleos essenciais no Brasil: Aspectos gerais, Desenvolvimento e Perspectivas. **Química Nova**. Vol. 32, No. 3, p. 588-594, 2009.
- BRACK, P.; KÖHLER, M.; CORRÊA, C. A.; ARDISSONE, R. E.; SOBRAL, M. E. G.; & KNUPP, V. F. Native fruits of Rio Grande do Sul, Brazil: richness and potential as food.**Rodriguésia**, 2020.
- BRASIL. Resolução - RDC nº 2, de 15 de janeiro de 2007. **Ministério da Saúde**, Agência Nacional de Vigilância Sanitária. Disponível em: <http://www.anvisa.gov.br> . Acesso em: 22/05/2022.
- CARVALHO, A. M. S.; HEIMFARTH, L.; PEREIRA, E. W. M.; OLIVEIRA, F. S.; MENESES, I. R. A.; COUTINHO, H. D. M.; PICOT, L. ANTONIOLLI, A. R.; QUINTANS, J. S. S.; QUINTANS-JUNIOR, L. J.; Phytol, a Chlorophyll Component, Produces

Antihyperalgesic, Antiinflammatory, and Antiarthritic Effects: Possible NF $\kappa$ B Pathway Involvement and Reduced Levels of the Proinflammatory Cytokines TNF- $\alpha$  and IL-6. **Jornal of natural products**, 2019.

CASSEL, E.; BEDINOT, C.; R.M.V. **Equipamento de extração supercrítica e processo De obtenção de extratos**. Solicitação de Patente – Brasil, PROV020110081175, 2011.

CASTELO, A. V. M. DEL MENEZZI, C. H. S.; RESCK, I. S. Rendimento e análises espectroscópicas (RMN 1 H, 13 C; IV da composição química dos óleos essenciais de quatro plantas do cerrado. **Revista Cerne**, v.16, n.4, p. 573-584, out/dez. 2010.

CASTRO, H. G.; FERREIRA, F. A.; SILVA, D. J. H.; MOSQUIM, P. R. Contribuição ao estudo das plantas medicinais Metabolitos secundários. Viçosa: **Gráfica Suprema e Editora**, 2ª ed, 2004.

CORRÊA, Patricia Luciana Carriel. **Fontes de nitrogênio na fotossíntese, produção de alcaloides e voláteis foliares em *Annona sylvatica* A. St.-Hil.** 2019.

CORREIA, S. J.; DAVID, J. M.; DA SILVA, E. P.; DAVID, J. P.; LOPES, L. M. X.; GUEDES, L. M. S. Flavonóides, noriso-prenóides e outros terpenos das Folhas de Tapirira guianensis. **Química Nova**. v. 31, nº 8, p. 2056-2059, 2008.

COULIBALY, AY; KIENDREBEOGO, M.; KEHOE, PG.; SOMBIE, PA; LAMIEN, CE.; MILLOGO, et. al. Antioxidant and anti-inflammatory effects of *Scoparia dulcis* L. **J Med. Food**. 2011.

CHRISTI, V.; FOGARTY; NIBS: Phytochemical study of *Scoparia dulcis* Linn extract. Sheets. **Int J Pharm Sci & Res**; 12(8): 4371-78. Doi: 10.13040/IJPSR.0975-8232.12(8).4371-78, 2021.

CROZIER, A.; JAGANATH, I. B.; CLIFFORD, M. N. Dietary phenolics: chemistry, bioavailability and effects on health. **Natural Product Reports**, v. 26, n. 8, p. 1001 - 1043, 2009.

DELGADO, C.; MENDES-CALLEJAS G.; CELIS, C.; Caryophyllene Oxide, the Active Compound Isolated from Leaves of *Hymenaea courbaril* L. (Fabaceae) with Antiproliferative and Apoptotic Effects on PC-3 Androgen-Independent Prostate Cancer Cell Line. **Molecules**, 26, 6142, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.3390/>> . Acesso em 23/12/2022.

DUTRA, F. L. G. **Compostos Fenólicos e Metilzantinas em Erva-mate Armazenada em Sistemas de Estacionamento Natural Acelerado**. Mestrado em Tecnologia de Alimentos. UFPR, Curitiba PR. 2009.

FELIPE, L. O.; BICAS, J. L.; **Terpenos, aromas e a química dos compostos naturais**. Química e Sociedade ,Quim. Nova esc – São Paulo, vol. 39, n 2, p. 120 – 130, 2017. Disponível em: < <http://dx.doi.org/10.21577/0104-8899.20160068>> . Acesso em: 15/05/2022.

FURLAN, C. M.; MOTTA, L. B. A Botânica no cotidiano. Instituto de Biociências da Universidade de São Paulo, **Departamento de Botânica**, 2008.

GIL, ANTONIO CARLOS. **Como elaborar projetos de pesquisa**. São Paulo: Atlas, 2017.

GOMES, P. B.; MATA, V. G.; RODRIGUES, A. E. Production of rose geranium oil using supercritical fluid extraction. **Journal of Supercritical Fluids**, v. 41, p. 50-60, ISSN 0896-8446, 2007. Disponível em:

< <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0896844606002324> > . Acesso em: 16/06/2022.

GONÇALVES, A; GUAZZELLI, M. J. **Agroflorestas e óleos essenciais**. 2014. Disponível em: < [http://www.centroecologico.org.br/cartilhas/Cartilha\\_Oleos.pdf](http://www.centroecologico.org.br/cartilhas/Cartilha_Oleos.pdf) > . Acesso em: 17/05/2022.

GYRDYMOVA, YULIA & RUBTSOVA, S. Caryophyllene and caryophyllene oxide: a variety of chemical transformations and biological activities. **Chemical Papers**. 76. 10.1007/s11696-021-01865-8, 2021.

HEFLER, S. M. **O Gênero Plantago L. (PLANTAGINACEAE) Na região Sul do Brasil**, 2002.

ISAH, T. **Stress and Defense Responses in Plant Secondary Metabolites Production. Biological Research**, v. 52, n. 39, p. 52-39, 2019.

JAKIEMIU, E. A. R. **Uma contribuição ao estudo do óleo essencial e do extrato de toumilho (Thymus vulgaris L.)**. 2008. 90f. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Alimentos), Universidade Federal do Paraná, Porto Alegre, 2008.

JIANG, Z.; SUNG J.; WANG, X.; ZHANG, Y.; ZHOU, H.; WEN, L.;. A review on the phytochemistry and pharmacology of the herb Scoparia dulcis L. for the potential treatment of metabolic syndrome. **RSC Adv Vances**. vol. 11(50):31235-31259, 2021.

JIAO, Y. et al. Assessment of phenolic contributors to antioxidant activity of new kiwifruit Cultivars using cyclic voltammetry combined with HPPLC. **Food Chemistry**, v. 268, p. 77-85, 2018.

LIN, D.; XIAO, M.; ZHAO J.; et al. Na overview of plant phenolic compounds and their importance in human nutrition and management of type 2 diabetes. **Molecules**, 21(10):1374, 2016;. Disponível em: < <https://doi.org/10.3390/molecules21101374> > . Acesso em: 12/12/2022.

MACHADO, B. F. M.T; JÚNIOR, A. F.;. Óleos essenciais: aspectos gerais e usos em terapias naturais. **Cad. Acad., Tubarao**, v. 3, n. 2, p. 105-127, 2011.

MARTINO, L.; NAZZARO, F.; MANCINI, E.; DE FEO, V. In: PREEDY, V. R.; WATSON, R. R.. (ed). 1º Ed. **Essencial oils from Mediterranean Aromatic Plants. The Mediterranean Diet: Na Evidence-Based Approach**. Londres: **Elsevier**. Chap. 58, p. 649-661. 2014.

MARTINS, C. de M. **Estudo Químico, Atividade Antioxidante, Atividade Antimicrobiana e Análise do Óleo Essencial da Espécie Kielmeyera Coriacea Mart. & Zucc (Pau-santo) do Cerrado**. Instituto de Química. UFU, Uberlândia. 2012.

MCMURRY, J. **Química Orgânica - Combo**. SP: **Cengage Learning**, ed. 7, p. 1344, 2011.

MELANIA, B.; KRISTINA, S.; PAUL S.; **Antiulcer activity of water extract of *Scoparia dulcis***. *Fitoterapia*; 79:587-588. 2008.

MORAES, A.A.B.; DINIZ, N. L.; COSTA, K. S. D.; PEREIRA, GALÚCIO, J.M.; TAUBE, P. S; COSTA, C. M. L.; NEVES CRUZ, J.; DE AGUIAR, A. E. H.; FARIA, L. J.G.; Bioactive Natural Compounds and Antioxidant Activity of Essential Oils from Spice Plants: New Findings and Potential Applications. **Biomolecules**, Jul 1;10(7):988, 2020.

MURTI, K.; PANCHAL, M.; TAYA, P.; Singh R. Pharmacological properties of *Scoparia dulcis*: A review. **Pharmacologia**. ;3:344–347, 2012.

NASCIMENTO, A.; PADRE, A.C.K.; Aromaterapia: o poder das plantas e dos óleos essenciais. Aromaterapia: o poder das plantas e dos óleos essenciais. Recife: **Fiocruz-PE**, 2020. Disponível em: < <http://observapics.fiocruz.br/wp-content/uploads/2020/06/Cuidado-integral-na-CovidAromaterapiaObservaPICS.pdf> >. Acesso em: 17/05/ 2022.

NAVARRETE, A.; WALLRAF, S.; MATO, R. B.; COCERO, M. J. Improvement of Essential Oil Steam Distillation by Microwave Pretreatment. **I&EC Research**, v. 50, p. 4667-4671, 2011.

NEO, G. G. A. **Perfil químico e avaliação do potencial antimicrobiano de óleos essenciais de Plantas medicinais da família lamiaceae**. Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Departamento de Farmácia do Campus de Lagarto da Universidade Federal de Sergipe, 2017.

NOGUEIRA, E.; NOVAES, A.; SANCHEZ, C. Avaliação do efeito do óleo-resina de copaíba (*Conífera* sp.) Na proliferação celular in vitro. **Brazilian Journal of Veterinary Research and Animal Science**, v.49, p.293-300, 2012.

OKADA, T.; et. al. Metabolomics of Medicinal Plants: the Importance of Multivariate Analysis of Analytical Chemistry Data. **Current Computer-Aided Drug Design**, 6 (3), pp. 179-196, 2010.

OKOH, O. O.; SADIMENKO, A. P.; AFOLAYAN, A. J.; Comparative evaluation of the antibacterial activities of the essential oils of *Rosmarinus officinalis* L. obtained by hydrodistillation and solvent free microwave extraction methods. **Food Chemistry**, v. 120, p. 308-312, 2010. ISSN 0308-8146. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0308814609011443> . Acesso em: 04/06/2022.

OLIVEIRA-JÚNIOR, R. G.; FERRAZ, C. A. A.; OLIVEIRA, A. P.; ALENCAR, J. M. T.; ARAÚJO, E. C. C.; NUNES, X. P.; PICPT, L.; BRAZ-FILHO, R.; ROLIM, L. A.; ALMEIDA, J. R. G. S. Chemical Constituents of Non-Polar Fractions Obtained from *Cnidioscolus quercifolius* Pohl (Euphorbiaceae), a Medicinal Plant Native from the Brazilian Caatinga Biom. **Rev. Virtual Quim.**, 11 (2), 498-516, 2019.

ORDAZ, G.; DE ARMAS, H.; YANEZ, D.; MORENO, Y.; Composición química de los aceites esenciales de las hojas de *Helicteres guazumifolia* (Sterculiaceae), *Piper tuberculatum* (Piperaceae), *Scoparia dulcis* (Arecaceae) y *Solanum subinerme* (Solanaceae), recolectadas em Sucre, Venezuela. Ver. **Biol. Trop.** (Int. J. Trop. Biol. ISSN-0034-7744) Vol. 59 (2): 585-595, June 2011.

PAMUNUWA, G.; et al. Antidiabetic Properties, Bioactive Constituents, and Other Therapeutic Effects of *Scoparia dulcis*. **Evid Based Complement Alternat Med**. 2016.

PARI, L.; LATHA, M.; Efeito anti-hiperlipidêmico de *Scoparia dulcis* (sweet broomweed) em ratos diabéticos com estreptozotocina. **J Med Food**. 2006.

PERES, L. E. P.; **Metabolismo Secundário**. Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz – ESALQ – 25p., 2004.

RABÊLO, Waléria Ferreira. **Caracterização química, toxicidade e avaliação da Atividade antibacteriana do óleo essencial do Cravo da Índia (*Syzygium aromaticum*)**. Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Química da Universidade Federal do Maranhão, 2010.

ROBERTS, M.; STRACK, D.; WINK, M. Biosynthesis of Alkaloids and Betalains. **Annual Plant Review**, v. 40, p. 20-91, 2010.

SANTOS, Adailson da Silva. Óleos essenciais: uma abordagem econômica e industrial. Rio de Janeiro: **Interciência**, 2011.

SANTOS, R.I.; **Metabolismo básico e origem dos metabolismos secundários**. In: SIMÕES, C.M.O.; SCHENKEL, E.P.; GOSMANN, G.; MELLO, J.C.P.; MENTZ, L.A. & PETROVICK, P.R. (orgs.). *Farmacognosia: da planta ao medicamento*. 3ed. Porto Alegre/Florianópolis: Ed. Universidade/UFRGS/, p.209-216, 2007.

SARKAR, P. A.; GHOSH, S.; PODDAR, T.; SARKAR, S.; CHOUDHURY, S.; “Phytochemical, botanical and ethno-Pharmacological study of *scoparia dulcis* Linn. (Scrophular-Iaceae): a concise review,” **Te Pharma Innovation**, vol. 9, No. 7, pp. 30–35, 2020.

SARTORATTO, A.; **Análise de constituintes voláteis de plantas aromáticas por microextração em fase sólida acoplada a cromatografia gasosa (SPME/CG)**. 2004. 86p. (Dissertação, Mestrado em Química).Campinas: Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química. 2004.

SARTOR, R. B.; **Modelagem, Simulação e Otimização de uma Unidade Industrial de Extração de Óleos Essenciais por Arraste a Vapor**. Dissertação (Mestrado em Pesquisa e Desenvolvimento de Processos). Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Porto Alegre, 2009.

SAVITHARAMMA, N.; et. al. Screening of medicinal plants for secondary metabolites. **Middle-East J. Sci. Res.**, 8, pp. 579-584, 2011.

SILVEIRA, J. C.; BUSATO, N. V.; COSTA, A. O S.; JUNIOR, E. F. C.; Levantamento e análise de métodos de extração de óleos essenciais. **Enciclopédia Biosfera**, Centro Científico Conhecer: Goiânia, v.8, n.15; p. 2038, 2012. Disponível em:

<<http://www.conhecer.org.br/enciclop/2012b/ciencias%20exatas%20e%20da%20terra/levantamento%20e%20analise.pdf>>. Acesso em: 17/05/2022.

SILVA, C. M. **Sesquiterpenóides de Senecio bonariensis Hook et Arn.**; Dissertação (mestrado) Universidade Federal de Santa Maria, Centro de Ciências Ciências da Saúde, Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas, RS, 2006.

SILVA, D. G.; **Isolamento e Caracterização do Óleo Essencial da Lippia alba (Mill.) N. E. Brown (Erva Cidreira) e Investigação da Atividade Biológica.** UFSC. 2008.

SILVA, L. V.; MENDES, Marisa F.; COELHO, Gerson L. V.; **Extração do óleo essencial da pimenta rosa (Schinus molle) usando hidrodestilação e soxhlet.** VI Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica. Rio de Janeiro, Brasil. 2005.

SILVA, M. G. V. et al., Essential oils of *Ocimum basilicum* L., *O. basilicum* var *minimum* and *O. basilicum* var *purpurascens* gown in Northeast of Brazil. **Flavour and Fragrance Journal**, v. 18, p. 3-14, 2003.

SIMÕES, Cláudia Maria Oliveira et al. Farmacognosia: do produto natural ao medicamento. Porto Alegre: **Artmed**. 502p, 2017.

SIMÕES, C. M. O.; et al. **Farmacognosia: Da planta ao Medicamento.** 6.ed. Porto Alegre/Florianópolis. 2010.

SIMÕES, C. M. O.; SCHENKEL, E. P.; GOSMANN, G.; MELLO, J. C. P.; MENTEZ, L. A.; PETROVICK, P. R. Farmacognosia: da planta ao medicamento, 5ª ed., Porto Alegre – Florianópolis. **Editora da UFRGS/ Editora da UFSC**, 2003.

STEFFENS, A.H. **Estudo da composição química dos óleos essenciais obtidos por destilação por arraste a vapor em escala laboratorial e industrial.** Porto Alegre, 2010. Disponível em:

<<https://repositorio.pucrs.br/dspace/bitstream/10923/3294/1/000423851Texto%2BCompleto-0.pdf>>. Acesso em: 20/05/2022.

SUN, Q.; HEILMANN, J.; KÖNIG, B.; Natural phenolic metabolites with antiangiogenic properties – a review from the chemical point of view. **Beilstein Journal Organic Chemical**. v. 11, p. 249-264, 2015. Disponível em:

<<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC4361970/>>. Acesso em: 22/05/2022.

TIN, A.; NGUYEN, T. H.; HOANG, T.; PHAM, B.; LONG, G.; DUNG, Le. Chemical Constituents of the Aerial Parts of *Scoparia Dulcis* and Anti-Cancer, Anti-Inflammatory Activities. **Key Engineering Materials**. 814. 360-364, 2019.

TRANCOSO, M. D.; BAPTISTA, B. A V.; GOMES, G. A.; GONZALEZ, M. M.; RIBEIRO, T. B.; **Óleos essenciais: Extração, importância e aplicações no cotidiano.** In: 53º Congresso Brasileiro de Química. Rio de Janeiro. 2013. Disponível em: <<http://www.abq.org.br/cbq/2013/trabalhos/14/2780-17038.html>>. Acesso em: 04/06/2022.

VIEIRA, R. F.; AGOSTINI -COSTA, T. S.; Caracterização química de metabólitos secundários em germoplasma vegetal. In: NASS, L. L.(Ed.). Recursos genéticos vegetais. Brasília: **Embrapa recursos Genéticos e Biotecnologia**, 2007.

VIEIRA, T. M.; DIAS, H. J; MEDEIROS, T. C. T.; GRUNDMANN, C. O.; GROPPPO, M.; HELENO, V. C. G.; MARTINS, C. H. G.; CUNHA, W. R.; CORTI, A. E. M.; SILVA, E. O.;

Chemical composition and antimicrobial Activity of the essential oil of *Artemisia absinthium* Asteraceae leaves. **J Essent Oil Bear Pl.** 20:123–131, 2017.

VITTI, A. M. S.; BRITO, J. O. Óleo essencial de Eucalipto. **Documentos Florestais**, Nº 17, São Paulo, 2003. Disponível em: < <http://www.ipef.br/publicacoes/docflorestais/df17.pdf>.> . Acesso em: 04/06/2022.

VIVEIROS, MAGDA & COSTA, JOSÉ & OLIVEIRA, ANSELMO & RÚBIO, CAROLINA & PADOVANI, CARLOS & RATINHO, CLÁUDIA & SCHELLING, SILVANA. Anti-inflammatory effects of  $\alpha$ -humulene and  $\beta$ -caryophyllene on pterygium fibroblasts. **International Journal of Ophthalmology**. 15. 1903-1907, 2022.

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

WHITE, B. L.; et al.; Release of bound procyanidins from cranberry pomace by alkaline hydrolysis. **J. Agric. Food Chem.**, 58, pp. 7572-7579. 2010.

ZULFIKER, A.; RAHMAN, M. M.; HOSSAIN, M. K.; HAMID, K.; MAZUMDER, M.; RANA, M. S.; In vivo analgesic activity of ethanolic extracts of two medicinal plants- *Scoparia dulcis* L. and *Ficus racemosa* Linn. **Biol.**; 2:42–48. Med. 2010.