

## CARACTERIZAÇÃO QUÍMICA DO ÓLEO ESSENCIAL DE *Eugenia uniflora* E DE SEU CONSTITUINTE MAJORITÁRIO OXIDOSELINA-1,3,7(11)-TRIEN-8- ONA

**Autor(es): Luziane Teixeira dos Santos<sup>1</sup>; Diones Martins Mesquita<sup>2</sup> Tigressa Helena Soares Rodrigues<sup>3</sup>, Geovany Amorim Gomes<sup>4</sup>**

<sup>1</sup> Discente/Química, CCET, UVA; Email: luzianeteixeira25@gmail.com

<sup>2</sup> Graduado/Química CCET, UVA; Email: dionifluguel@gmail.com

<sup>3</sup> Pesquisadora/Química, CCET, UVA; Email: thelenasr@yahoo.com.br

<sup>4</sup> Pesquisador/Química, CCET, UVA; Email: pesquisadorgeo@yahoo.com.br

### RESUMO:

Na medicina popular brasileira, *Eugenia uniflora* têm sido empregada para o tratamento de diversas enfermidades. Investigações destacam a composição de óleos essenciais extraídos de suas folhas e suas várias propriedades biológicas, como antioxidante e inseticida. Por ter uma variabilidade genética, essa espécie apresenta quimiotipos diferentes. A variabilidade da composição foi constatada em óleos de folhas de genótipos desta espécie coletadas em diferentes regiões do Brasil. Portanto, este trabalho objetivou caracterizar quimicamente o óleo de um espécime de *E. uniflora* coletada no Ceará, bem como determinar a estrutura de um de seus componentes majoritários isolado. O óleo foi obtido por hidrodestilação de suas folhas e para análise de sua composição foi utilizado Cromatógrafo a Gás acoplado com Espectrômetro de Massa - CG/EM e Cromatógrafo a Gás com Detector de Ionização de Chamas - CG/DIC. Com a finalidade de isolar seus componentes majoritários, o óleo foi submetido a coluna cromatográfica em sílica gel. A fórmula estrutural de um dos constituintes foi identificada através de análise dos dados espectrométricos de RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C, massas, além de comparação com dados da literatura. Assim, a análise do óleo revelou nove constituintes, sendo os componentes predominante os sesquiterpenos oxigenados selina-1,3,7(11)-trien-8-ona e oxidoselina-1,3,7(11)-trien-8-ona, sendo esse último identificado como uma das substâncias isoladas por fracionamento cromatográfico do óleo.

**Palavras-chave:** Pitangueira; Óleo volátil; Sesquiterpenos.

### 1. INTRODUÇÃO E OBJETIVO(S)

Durante os últimos anos, as plantas medicinais têm atraído a atenção das comunidades farmacêuticas e científicas, evidências têm demonstrado o potencial promissor de extratos, óleos essenciais e substâncias puras de origem vegetal contra enfermidades (Firmino et al., 2018; Dzogbewu, 2021). Os óleos essenciais são definidos como qualquer óleo volátil que têm componentes aromáticos e que dão odor característico, sabor ou aroma a uma planta.

Dentre os óleos essenciais que possuem efeitos promissores para a saúde humana, destaca-se o de *Eugenia uniflora* (Myrtaceae), conhecida popularmente como pitangueira, árvore frutífera nativa do Brasil e seu cultivo difundido em outros países sul-americanos (Santos; Braz-Filho; Castro, 2015). Na medicina popular brasileira, suas folhas e frutos têm sido amplamente empregados na forma de infusões para obter efeitos excitantes, antifebril, anti-hipertensivo e anti-reumático. Além disso, o chá de suas folhas ou o extrato alcoólico são usados no combate a diarreia, infestação por vermes, bronquite, tosse, ansiedade e hipertensão (Moura et al., 2018).

Investigações destacam a composição química de óleos essenciais extraídos de folhas da *E. uniflora*, além de suas várias propriedades biológicas, como antinociceptiva, hipertérmica (Amorim et al., 2009) antitumoral (Ogunwande et al., 2005), antioxidante (Figueiredo et al., 2019), inseticida (Lobo et al., 2018), anti-*Leishmania* (Rodrigues et al., 2013) antifúngica (Santos et al., 2018;) e ação antibacteriana (Pereira et al., 2017;). Por ter uma variabilidade genética a *E. uniflora* apresenta quimiotipos diferentes (Cipriano; Maia; Deschamps, 2021). Essa variabilidade da composição foi constatada em óleos de folhas de genótipos desta espécie coletadas em diferentes regiões do Brasil (Cipriano; Maia; Deschamps, 2021). Nesse contexto, no óleo da espécime coletada no estado do Ceará, verificou-se que selina-1,3,7(11)-trien-8-ona (36,37%) e seu óxido (27,32%) foram identificados como seus constituintes majoritários (Santos et al. 2018). Enquanto que no óleo da espécime coletada no Maranhão, os constituintes mais abundantes identificados foi o curzereno (47,30%),  $\gamma$ -elemeno (14,25%), e trans- $\beta$ -elemenona (10,4%) (Rodrigues et al. 2013). Já Silva et al. (2018) relatam que os compostos prevalentes do óleo volátil do exemplar coletado em Goiás, foram germacrona (8,52%) e  $\alpha$ -selineno (7,50%).

Diante do exposto, este trabalho objetivou obter a composição química do óleo de folhas de uma espécime de *E. uniflora* coletada no Ceará, bem como determinar a estrutura de um de seus componentes majoritários isolado.

## **2.MATERIAL E MÉTODOS**

### **2.1 COLETA DA PLANTA E OBTENÇÃO DA EXSICATA**

Folhas de *E. uniflora* foram coletadas na região Norte do estado do Ceará. O material vegetal coletado foi identificado sua exsicata foi depositada no Herbário Francisco José de Abreu Matos, localizado no curso de Ciências Biológicas da UVA.

### **2.2 EXTRAÇÃO DO ÓLEO ESSENCIAL**

Para extração do óleo, folhas frescas de *E. uniflora* foram cortadas em pequenos pedaços, e acondicionadas em balão de 5 L juntamente com 2 L de água destilada e submetidas ao processo de hidrodestilação em aparelho doseador tipo Clevenger, por um período de 2 h. Em seguida, o óleo obtido foi seco com sulfato de sódio anidro e mantido em

refrigerador até a análise. O cálculo do rendimento foi realizado através da relação da massa de óleo volátil com a massa de material vegetal fresco utilizado na extração.

### 2.3 ANALISE DO ÓLEO ESSENCIAL

A análise qualitativa da composição química do óleo essencial foi efetuada em Cromatógrafo a Gás acoplado com Espectrômetro de Massa - CG/EM, equipamento Shimadzu modelo QP-2010 Plus. Já a análise quantitativa foi realizada em Cromatógrafo a Gás com Detector de Ionização de Chamas - CG/DIC, equipamento Shimadzu modelo CG-2010 Plus.

### 2.4 ISOLAMENTO DO COMPONENTE MAJORITÁRIO

Visando o isolamento de seus constituintes mais abundantes, uma alíquota de cerca de 2 g do óleo foi fracionada em coluna cromatográfica com gel de sílica. Neste processo, utilizou-se a série eluotrópica constando de hexano e acetato de etila, puros e em misturas binárias com polaridades crescentes, resultando em 116 frações. A comparação dos perfis cromatográficos em Cromatografia em Camada Delgada Analítica (CCDA), possibilitou a reunião das frações 57 a 62, fornecendo 480 mg de um óleo de coloração verde que foi denominada de **1**. Além disso, a análise por CCDA permitiu a junção das frações 75-84, resultando na obtenção de 242 mg de óleo verde, sendo denominada de **2**.

### 2.5 DETERMINAÇÃO ESTRUTURAL

A substância **2** isolada a partir de tratamento cromatográfico do óleo essencial, foi identificada com o emprego de métodos espectrométricos. Os espectros de ressonância magnética nuclear de hidrogênio (RMN <sup>1</sup>H) e de carbono-13 (RMN <sup>13</sup>C) foram gerados em um espectrômetro Agilent DD2 ( <sup>1</sup>H: 600 MHz; <sup>13</sup>C: 150 MHz). Os dados de CG/EM de **2** foram obtidos nos mesmos equipamentos utilizados para analisar o óleo.

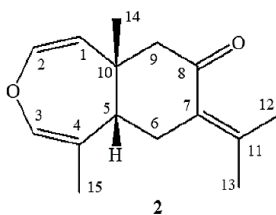
## 3.RESULTADOS E DISCUSSÃO - GRÁFICOS (Opcional)

O óleo essencial de *Eugenia uniflora* (OEEU) foi obtido com rendimento 0,41% (m/m). Através da análise por CG/EM e CG/DIC, foi possível identificar nove constituintes do óleo, representando, assim, 97,37% de sua composição. Quanto aos grupos de constituintes presentes, houve o predomínio dos sesquiterpenos oxigenados (90,01%), seguidos pelos hidrocarbonetos sesquiterpênicos (7,36%). A análise do referido óleo revelou, ainda, os sesquiterpenos oxigenados selina-1,3,7(11)-trien-8-ona (42,22%) e oxidoselina-1,3,7(11)-trien-8-ona (46,81%) como constituintes majoritários (Tabela 1). Estudos prévios realizados com OEEU, contendo elevados teores desses sesquiterpenos oxigenados, relatam que o óleo apresentou atividade inseticida (Ascari et al., 2021) e hepatoprotetora (Silva et al., 2023).

Tabela 1 – Composição química, índice de Kovats calculado (IK<sub>C</sub>), índice de Kovats da literatura (IK<sub>L</sub>) (Adams et al. 2007), percentagens dos componentes identificados e de suas classes químicas (%) no óleo essencial de *Eugenia uniflora* (OEEU).

Constituinte	IK <sub>C</sub>	IK <sub>L</sub>	OEEU %
<i>Hydrocarboneto sesquiterpênico</i>			7,36
β-Elemeno	1395	1390	1,94
β-Cariofileno	1424	1419	1,47
γ -Elemeno	1439	1436	0,62
Biciclogermacreno	1499	1500	0,39
Germacreno B	1561	1561	2,94
<i>Sesquiterpeno oxigenado</i>			90,01
Selina-1,3,7(11)-trien-8-ona	1636	1634	42,22
Selin-11-en-4α-ol	1660	1659	0,47
Germacrona	1699	1693	0,51
Oxidoselina-1,3,7(11)-trien-8-ona	1737	1748	46,81
<b>TOTAL</b>			97,37

A cromatografia em coluna convencional de OEEU permitiu o isolamento do composto **2** (figura 1) o qual teve sua estrutura elucidada através de dados fornecidos por CG/EM, espectros de RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C e da atribuição inequívoca dos deslocamentos químicos dos átomos de hidrogênio ( $\delta_H$ ) e carbono-13 ( $\delta_C$ ), envolvendo, inclusive, comparação com valores descritos na literatura (Ascari et al., 2021).



**Figura 1.** Estrutura química de oxidoselina-1,3,7-trien-8-ona (**2**) apresentando a estereoquímica relativa em C-5 e C-10. Fonte: Adaptado de Ascari et al., (2021).

A pureza do composto **2** foi de 97,1%, conforme determinado por análises de CG/EM. O espectro de RMN de <sup>1</sup>H de **2** apresentou sinais em  $\delta_H$  2,83 (dd,  $J = 15,3, 4,7$  Hz),  $\delta_H$  2,45 – 2,52 (m),  $\delta_H$  2,40 (d,  $J = 15,0$  Hz) e  $\delta_H$  2,19 (d,  $J = 15,8$  Hz) referentes aos hidrogênios diastereotópicos H-6, H-6', H-9 e H-9', respectivamente. Em  $\delta_H$  4,42 (d,  $J = 5,9$  Hz),  $\delta_H$  6,02 (d,  $J = 7,6$  Hz),  $\delta_H$  6,14 (s) e  $\delta_H$  2,23 (d,  $J = 5,0$  Hz) estão os sinais correspondentes aos hidrogênios metínicos H-1, H-2, H-3 e H-5, nessa ordem. Quatro grupos metila foram observados nos seguintes deslocamentos  $\delta_H$  1,98 (d,  $J = 2,3$  Hz, H-12 ou H-13),  $\delta_H$  1,80 (d,  $J = 1,2$  Hz, H-12 ou H-13),  $\delta_H$  1,24 (s, H-14) e  $\delta_H$  1,77 (d,  $J = 1,5$  Hz, H-15).

O espectro <sup>13</sup>C mostrou sinal  $\delta_C$  202,6 para carbono carbonílico. Havia quatro carbonos metílicos em  $\delta_C$  23,1 (C-12 ou C-13),  $\delta_C$  22,3 (C-12 ou C-13),  $\delta_C$  31,0 (C-14) e  $\delta_C$  21,5 (C-15) e quatro carbonos metínicos em  $\delta_C$  110,4 (C-1),  $\delta_C$  140,5 (C-2),  $\delta_C$  137,7 (C-3) e  $\delta_C$  51,0 (C-5).

A análise dos dados espectrométricos de **2**, aliada a comparação dos mesmos com dados descritos literatura, permitiram determinar que **2** é o sesquiterpeno oxidoselina-1,3,7(11)-trien-8-ona. Esta proposta foi confirmada pelo sinal observado no espectro de massas em  $m/z$  232

(29,87%), compatível com sua fórmula molecular ( $C_{15}H_{20}O_2$ ). Evidências científicas têm demonstrado o potencial inseticida desse composto, como também de selina-1,3,7(11)-trien-8-ona (Silva et al., 2023).

#### 4. CONSIDERAÇÕES FINAIS ou CONCLUSÃO

A análise do perfil químico de OEEU permitiu concluir que a espécie de *E. uniflora* investigada neste estudo, pertence ao quimiotipo selina-1,3,7(11)-trien-8-ona/oxidoselina-1,3,7(11)-trien-8-ona bastante comum no Ceará. Além disso, o presente trabalho forneceu um método simples para o isolamento de um dos constituintes mais abundantes do óleo. A próxima fase da pesquisa envolverá a determinação estrutural do composto **1**, também isolado de OEEU, e a realização de bioensaios com o óleo e seus componentes isolados, já que esses produtos são conhecidos por sua bioatividade.

#### AGRADECIMENTOS



#### REFERÊNCIAS

- ADAMS, H.R.D. et al. Research Methods For Graduate Business and Social Science Students. Publicações SAGE India Pvt Ltd, 2007.
- AMORIM, A. C. L. et al. Antinociceptive and hypothermic evaluation of the leaf essential oil and isolated terpenoids from *Eugenia uniflora* L. (Brazilian Pitanga). *Phytomedicine*, v. 16, n.10, p. 923–928, 2009.
- CIPRIANO, R. R.; MAIA, B. H. L. N. S.; DESCHAMPS, C. Chemical variability of essential oils of *Eugenia uniflora* L. genotypes and their antioxidant activity. *Anais da Academia Brasileira de Ciências*, v. 93, n. 1, p. e20181299, 2021.
- FIRMINO, D. F. et al. Antibacterial and Antibiofilm Activities of *Cinnamomum* sp. Essential Oil and Cinnamaldehyde: Antimicrobial Activities. *THE SCIENTIFIC WORLD JOURNAL*, v. 2018, p.1-9, 2018.
- FIGUEIREDO, P. L. B. et al. Composition, antioxidant capacity and cytotoxic activity of *Eugenia uniflora* L. chemotype-oils from the Amazon. *Journal of Ethnopharmacology*, v. 232, p. 30–38, 2019.
- MOURA, G. S. et al. *Eugenia uniflora* L.: potential uses as a bioactive plant. *Arquivos do Instituto Biológico*, v. 85, e0752017, 2018.
- NTONDINI, S. S.; LENATHA, G. G.; DZOGBEWU, T. C. Inhibitory Effect of Essentials Oil Against Oral Pathogens. *International Journal of Dentistry and Oral Science*, v. 8, n. 1, p. 1308-1313, 2021.

- OGUNWANDE, I. A. et al. Studies on the essential oils composition, antibacterial and cytotoxicity of *Eugenia uniflora* L. *The International Journal of Aromatherapy*, v. 15, p.147–152, 2005.
- PEREIRA, N. L. F. et al. In vitro evaluation of the antibacterial potential and modification of antibiotic activity of the *Eugenia uniflora* L. essential oil in association with led lights. *Microbial Pathogenesis*, v. 110, p. 512–518, 2017.
- RODRIGUES, K. A. F. et al. *Eugenia uniflora* L. Essential Oil as a Potential Anti-Leishmania Agent: Effects on *Leishmania amazonenses* and Possible Mechanisms of Action. *Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine*, v. 2013, p. 1–10, 2013.
- SANTOS, F. R.; BRAZ-FILHO, R.; CASTRO, R. N. Influência da idade das folhas de *Eugenia uniflora* L. na composição química do óleo essencial. *Química Nova*, v. 38, n. 6, p. 762-768, 2015.
- SANTOS, J. F. S. et al. Chemical composition, antifungal activity and potential anti-virulence evaluation of the *Eugenia uniflora* essential oil against *Candida* spp. *Food Chemistry*, v. 261, n. 30, p. 233-239, 2018.
- THAMBI, M. et al. Composition and antimicrobial activities of the essential oil from *Eugenia uniflora* L. leaves growing in India. *International Journal Pharma and Biomedical Sciences*, v.4, n. 1, p. 46-49, 2013.