

Ressonância Magnética Nuclear e óleos essenciais: um novo olhar sobre a análise de adulterações comerciais

Julio R. Neto¹ (IC)*, Karoline P. Miossi¹ (PQ), Álvaro C. Neto¹ (PQ).

julio.reblin@edu.ufes.br

¹Universidade Federal do Espírito Santo – UFES, Departamento de Química, Vitória, ES

Palavras Chave: Adulteração, Óleo essencial, RMN

Introdução

As plantas desenvolveram diversos mecanismos de defesa ao longo da evolução, incluindo a produção de metabólitos secundários, como óleos essenciais, que possuem propriedades medicinais amplamente exploradas pela ciência.¹ A aroeira (*Schinus terebinthifolius* Raddi), uma espécie nativa da América do Sul, destaca-se por sua composição rica em compostos bioativos, como sesquiterpenos (germacreno B, β -elemeno, δ -cadinene e entre outros), responsáveis por atividades antioxidantes, antimicrobianas, anti-inflamatórias e anticancerígenas.^{2,3}

A extração do óleo essencial da aroeira, obtido de folhas e frutos, é uma forma de aproveitar seus benefícios terapêuticos. No entanto, a comercialização desses óleos pode sofrer adulterações com solventes, compostos sintéticos ou outros óleos, comprometendo sua qualidade e eficácia.⁴ Diante disso, este projeto visa utilizar a Ressonância Magnética Nuclear (RMN) para analisar a composição de óleos essenciais de aroeira disponíveis no mercado, identificando possíveis adulterantes e avaliando sua pureza. Além disso, busca-se estabelecer padrões de composição, naturais ou artificiais, que possam auxiliar na garantia da qualidade desses produtos.

Resultados e Discussão

O óleo essencial foi analisado por RMN de ¹H em um espectrômetro Agilent/Varian operando a 400 MHz, confirmando a presença de sesquiterpenos e monoterpenos característicos. Na região entre 0,8 e 1,3 ppm, observaram-se sinais típicos de hidrogênios em grupos metila (CH₃) e metileno (CH₂) de sistemas saturados, com um singlete em 0,84 ppm sugerindo metilas terminais, como em α -pineno ou δ -cadineno. Os sinais entre 1,15 e 1,27 ppm indicam hidrogênios em sistemas cíclicos. Entre 1,5 e 2,5 ppm, os sinais mais complexos sugerem hidrogênios próximos a insaturações ou anéis terpênicos. Picos em 1,6-1,7 ppm podem corresponder a grupos metileno adjacentes a duplas ligações entre 4,7 e 4,72 ppm pode indicar hidrogênios ligados a carbonos oxigenados ou água residual; Os picos mais significativos aparecem em 5,4-5,45 ppm, característicos de hidrogênios vinílicos, confirmando compostos insaturados como limoneno e β -mirceno. O sinal em 7,26 ppm corresponde ao CDCl₃ (solvente).⁵

O mesmo óleo foi submetido à cromatografia gasosa acoplada ao espectrometria de massas (CG-EM) a fim de corroborar com a análise de RMN, e teve como resultado compostos como: alfa pineno, sabineno, beta pineno, beta mirceno, benzeno, delta limoneno, gama terpineol, hidrato de sabineno, bromopentano e delta cadineno; Logo, conclui-se que o óleo apresenta um perfil típico de monoterpenos e sesquiterpenos insaturados, compatível com a composição esperada para o óleo de aroeira.

Conclusões

A análises confirmam a presença de sesquiterpenos e monoterpenos compatíveis com sua composição esperada. Os resultados validam seu potencial, mas indicam a necessidade de controle de qualidade. O estudo demonstra o potencial do RMN na caracterização de óleos essenciais e detecção de possíveis adulterações.

Agradecimentos



¹Dewick, P. M. Medicinal Natural Products: A Biosynthetic Approach, 3rd ed.; Wiley: Chichester, 2009.

²Silva, T. L.; de Oliveira, V. S.; Augusta, I. M.; Keller, L. M.; Gamallo, O. D.; Saldanha, T. Rev. Virtual Quím. 2019, *11*, 1614–1624.

³Maciel, A. J.; Lacerda, C. P.; Danielli, L. J.; Bordignon, S. A. L.; FuenteFria, A. M.; Apel, M. A. Chem. Biodivers. 2019, *16*, 1–10.

⁴Adams, R. P. Identification of Essential Oil Components by Gas Chromatography/Mass Spectrometry; Allured Publishing Corporation: Carol, 2007.

⁵Silverstein, R. M.; Webster, F. X.; Kiemle, D. J.; Bryce, D. L. Spectrometric Identification of Organic Compounds, 8th ed.; Wiley: Hoboken, 2014.