



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS BIOLÓGICAS E DA SAÚDE – CCBS
DEPARTAMENTO DE FARMÁCIA – CAMPUS I**

GEOVANA FERREIRA GUEDES SILVESTRE

**ANÁLISE DO PERFIL QUÍMICO DE ÓLEOS FIXOS E COMPOSTOS ISOLADOS
DE *Cnidoscolus quercifolius* POHL (EUPHORBIACEAE)**

Campina Grande

2017

GEOVANA FERREIRA GUEDES SILVESTRE

**ANÁLISE DO PERFIL QUÍMICO DE ÓLEOS FIXOS E COMPOSTOS ISOLADOS
DE *Cnidoscolus quercifolius* POHL (EUPHORBIACEAE)**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à
Universidade Estadual da Paraíba, como requisito
parcial à obtenção do título de Bacharelado em
Farmácia Generalista.

Área de concentração: Farmacognosia.

Orientador: Prof. Dr. Harley da Silva Alves.

Campina Grande

2017

É expressamente proibido a comercialização deste documento, tanto na forma impressa como eletrônica. Sua reprodução total ou parcial é permitida exclusivamente para fins acadêmicos e científicos, desde que na reprodução figure a identificação do autor, título, instituição e ano do trabalho.

S587a Silvestre, Geovana Ferreira Guedes.
Análise do perfil químico de óleos fixos e compostos isolados de *Cnidoscolus quercifolius* POHL (EUPHORBIACEAE) [manuscrito] : / Geovana Ferreira Guedes Silvestre. - 2017.
52 p. : il. colorido.

Digitado.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Farmácia) - Universidade Estadual da Paraíba, Centro de Ciências Biológicas e da Saúde, 2018.

"Orientação : Prof. Dr. Harley da Silva Alves, Coordenação do Curso de Farmácia - CCBS."

1. *Cnidoscolus quercifolius*. 2. Óleos fixos. 3. Triterpenos.
4. Terpenoides.

21. ed. CDD 615

GEOVANA FERREIRA GUEDES SILVESTRE

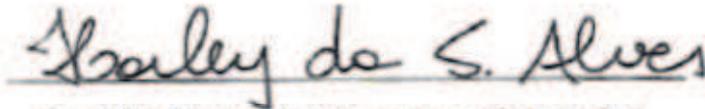
**ANÁLISE DO PERFIL QUÍMICO DE ÓLEOS FIXOS E COMPOSTOS ISOLADOS
DE *Cnidocolus quercifolius* POHL (EUPHORBIACEAE)**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à
Universidade Estadual da Paraíba, como requisito
parcial à obtenção do título de Bacharelado em
Farmácia Generalista.

Área de concentração: Farmacognosia.

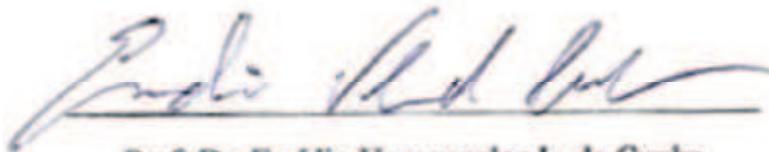
Aprovado em: 20/12/2017.

BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Harley da Silva Alves (Orientador)

Universidade Estadual da Paraíba (UEPB)



Prof. Dr. Emídio Vasconcelos L. da Cunha

Universidade Estadual da Paraíba (UEPB)



Prof. Dr. Ricardo Olímpio de Moura

Universidade Estadual da Paraíba (UEPB)

À minha mãe, pelo encorajamento e confiança durante toda
minha jornada acadêmica, DEDICO.

AGRADECIMENTOS

A Deus, meu criador e inteligência suprema que rege minha vida me inspirando a ser quem sou, até aqui me ajudou não pelo consentimento das coisas que almejo, mas sim me dando forças pra seguir em frente buscando aprimoramento moral e intelectual.

À minha mãe Desaelma, pelo amor incondicional e pelo encorajamento ao longo de toda minha caminhada na universidade, entre idas e vindas, estamos sempre unidas. À meu pai Giovane, que acreditou em mim, na minha capacidade de concluir com êxito.

À minha irmã Maria Luiza pelo companheirismo e ao meu namorado Marsell pelo carinho e compreensão durante a reta final da graduação.

Ao meu orientador Harley Alves, que há quase 4 anos permanece comigo desde que iniciei a iniciação científica, acreditou em mim, mesmo em alguns momentos de dificuldade e incerteza pelos quais passei, meu sincero e afetuoso Obrigada por todos os ensinamentos e pela confiança no meu trabalho.

Aos meus irmãos que a graduação me concedeu, que caminharam junto comigo durante 5 anos, especialmente Mariana, Pablo, Raiff, Daniely, Joyceanna, Renaly, Lucas, Blenda e Rafael meu muito obrigada.

Aos meus amigos de Laboratório, que estiveram ao meu lado na luta diária, em especial Anna Flávia, Helimarcos, Antônio Júnior e Laisla.

Aos professores Emídio Vasconcelos e Ricardo de Moura que compuseram minha banca, obrigada pela solicitude.

À Universidade Estadual da Paraíba pelo acolhimento e oportunidade concedidas.

Ao CNPq pelo incentivo à nossas pesquisas.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	08
2. OBJETIVOS	09
2.1. Objetivo Geral.....	09
2.2. Objetivos Específicos.....	09
3. DEFINIÇÃO	09
3.1. A Espécie.....	09
3.2. Metabólitos secundários dos Vegetais.....	10
3.3. Óleos Fixos.....	11
3.4. Terpenoides.....	13
4. DESENVOLVIMENTO	15
4.1. Metodologia Experimental.....	15
4.1.1. Obtenção do Extrato Etanólico Bruto (EEB).....	15
4.1.2. Obtenção da Fase Hexânica (FH).....	15
4.1.3. Isolamento de Compostos.....	16
4.1.3.1. Métodos Cromatográficos.....	16
4.1.3.2. Acetilação dos Compostos.....	16
4.1.3.3. Cromatografia Gasosa.....	17
4.1.4. Análise Espectroscópica.....	17
5. RESULTADOS E DISCUSSÃO	17
5.1. Análise das Frações Oleosas.....	17
5.1.1. Cromatografia Gasosa (CG-EM) – Óleos não acetilados.....	17
5.1.1.1. Fração 03.....	18
5.1.1.2. Fração 06.....	19
5.1.1.3. Fração 16.....	21
5.1.1.4. Fração 22.....	24
5.1.2. Cromatografia Gasosa (CG-EM) – Óleos acetilados.....	27
5.1.2.1. Fração 03'.....	28
5.1.2.2. Fração 06'.....	30
5.1.2.3. Fração 16'.....	31
5.1.2.4. Fração 22'.....	32
5.2. Identificação Estrutural dos Compostos Isolados.....	34
5.2.1. Infravermelho (IV).....	34
5.2.2. Ressonância Magnética Nuclear (RMN).....	34
6. CONCLUSÃO	39
ABSTRACT	40
REFERÊNCIAS	41

ANEXO A – Espectros de Massas.....	46
---	-----------

ANÁLISE DO PERFIL QUÍMICO DE ÓLEOS FIXOS E COMPOSTOS ISOLADOS DE
Cnidoscolusquercifolius POHL (EUPHORBIACEAE)

Geovana Ferreira Guedes Silvestre¹

RESUMO

A caatinga é uma região rica em biodiversidade e apresenta uma infinidade de espécies em sua flora. *Cnidoscolusquercifolius* Pohl conhecida popularmente como “faveleira” é uma Euphorbiaceae empregada na medicina popular para o tratamento de doenças infecciosas e lesões. Este trabalho teve como objetivo realizar um estudo fitoquímico da fase hexânica (FH) das folhas da faveleira. A fase hexânica (20g) foi submetida a coluna cromatográfica com gel de sílica e solventes orgânicos em gradiente crescente de polaridade fornecendo 67 frações. As frações 03, 06, 16 e 22 apresentaram um aspecto de óleo fixo e foram escolhidas para análise em Cromatógrafo Gasoso acoplado a Espectrômetro de Massa (CG-EM). Estas frações foram ainda acetiladas com anidrido acético e piridina e também analisadas em CG-EM. As frações 7 e 8 da FH foram recromatografadas em coluna com sílica e as subfrações de 1-6 foram reunidas, de acordo com o fator de retenção, e analisadas por espectroscopia no Infravermelho e Ressonância Magnética Nuclear de ¹H e ¹³C. Na análise dos óleos fixos *in natura* e dos acetilados foi possível identificar e quantificar 38 substâncias, dentre elas monoterpenos, ésteres graxos e hidrocarbonetos alifáticos. Das subfrações 1-6 foi possível identificar uma mistura dos triterpenos 3β-O-cinamoil-lupeol e 3β-O-dihidrocinamoil-lupeol. O presente estudo culminou na identificação e descrição de constituintes químicos importantes presentes nos óleos fixos de *C. quercifolius*, dentre eles, compostos com atividade biológica comprovada como o terpineol-4 e γ-terpineno e esqualeno. A mistura de triterpenos identificados por RMN também são citados na literatura como detentores de propriedades antioxidantes, citotóxica, anti-inflamatória, dentre outras, sendo promissores para fornecer subsídios científicos ao uso popular e agregar valor taxonômico à espécie estudada.

Palavras-chave: *Cnidoscolusquercifolius*; Óleos fixos. Triterpenos.

¹ Aluno de Graduação em Farmácia Generalista na Universidade Estadual da Paraíba – Campus I.
Email: geovana_guedes@hotmail.com

1. INTRODUÇÃO

Desde os primórdios da humanidade as plantas sempre foram utilizadas por diversas populações ao redor do mundo. Além do seu consumo como fonte alimentícia, algumas espécies também são empregadas no tratamento e cura de doenças. De acordo com o Ministério da Saúde o uso das plantas é comum em práticas populares e tradicionais, como remédios caseiros e comunitários, processo conhecido como medicina tradicional. É também a matéria-prima para a fabricação de fitoterápicos e outros medicamentos (BRASIL, 2016).

O conhecimento científico a respeito das plantas medicinais gera impacto social expressivo, possibilitando o acesso da população às alternativas de tratamento com novos medicamentos, como é o caso dos fitoterápicos (LIMA, 2015). Além disso, sabe-se que grande parte dos princípios ativos presentes nos medicamentos produzidos pela indústria farmacêutica tem origem vegetal. Estes, antes de se tornarem princípio ativos, são substâncias isoladas de espécies vegetais, que se comprovando atividade biológica são utilizadas como modelo para síntese molecular, podendo ser modificadas ou não.

O Brasil possui uma rica flora considerada fonte inestimável de riquezas naturais atraindo pesquisadores de todas as partes do globo. Os biomas brasileiros apresentam grandiosa diversidade ecológica com peculiaridades encontradas apenas aqui. A caatinga é um exemplo, essa região ocupa cerca de 11 % de todo o território nacional, abrangendo-se por 10 estados e sua biodiversidade ampara diferentes atividades econômicas voltadas para fins agrossilvopastoris e industriais, especialmente nos ramos farmacêutico, de cosméticos, químico e de alimentos (BRASIL, 2017).

Estudos etnofarmacológicos realizados no Brasil apontam que um grande número de espécies da família Euphorbiaceae vêm sendo utilizadas com fins medicinais, especificamente as do gênero *Cnidocolus* que são empregadas no tratamento de doenças agudas e crônicas, além de ferimentos. *Cnidocolus quercifolius* Pohl, também conhecida como “faveleira” é uma espécie bastante comum no semiárido paraibano e é adotada na medicina popular por apresentar propriedades medicinais atribuídas pelos usuários. Dentre elas são citadas a ação cicatrizante, analgésica, antiinflamatória, antibiótica e diurética (GOMES et al, 2014; MORAIS et al, 2016; NÓBREGA, 2001).

Embora tenha havido um aumento satisfatório do número de pesquisas relacionadas a *C. quercifolius*, assim como em outras espécies do gênero *Cnidocolus*, a quantidade de estudos relacionados ao perfil fitoquímico ainda é limitada, necessitando de análises mais aprofundadas das estruturas químicas presentes na espécie, bem como a comprovação de suas atividades farmacológicas, assegurando assim o uso medicinal popular. Além disso, esses

compostos químicos biologicamente ativos, podem vir a assumir papel de inovadores fitofármacos, gerando avanços no âmbito da terapia farmacêutica.

2. OBJETIVOS

2.1. Objetivo Geral

Este trabalho teve como objetivo realizar uma análise fitoquímica da fase hexânica do extrato das folhas de *Cnidoscolusquercifolius*Pohl, visando o isolamento e identificação de compostos com potencial atividade biológica.

2.2. Objetivos Específicos

- Obter o extrato etanólico bruto (EEB) e particioná-lo em fases;
- A partir do rendimento das fases escolher uma para dar prosseguimento ao trabalho (foi escolhida a fase hexânica);
- Isolar e analisar compostos oriundos da fase hexânica (FH) por cromatografia;
- Acetilar frações oleosas retiradas da FH;
- Identificar compostos através de técnicas espectroscópicas de Infravermelho (IV) e Ressonância Magnética Nuclear (RMN).

3. DEFINIÇÃO

3.1. A Espécie

*Cnidoscolusquercifolius*Pohl também denominada *Jatrophaephyllacantha*(TROPICOS, 2017) é conhecida popularmente por ‘faveleira’ ou ‘favela’. É uma planta arbórea endêmica da caatinga pertencente à família Euphorbiaceaeque apresenta espinhos e tricomas urticantes na superfície das folhas e caule (Figura 1), os quais causam irritação ao ser tocados. Apresentam pequenas flores brancas e seus frutos contém sementes oleaginosas (MORAIS et al., 2016; SANTOS et al., 2017).

Figura 1 – Folhas, flores, frutos e árvore da faveleira (*Cnidoscolusquercifolius*)



A utilização da faveleira varia de acordo com cada população e sua necessidade, praticamente todas as partes da planta são aproveitadas. As raízes, cascas e o látex são geralmente empregadas no tratamento de processos inflamatórios do trato urinário (PEIXOTO SOBRINHO et al., 2012). As folhas e flores são indicadas pelos nativos para casos de problemas hepáticos e também tumores e infecções do trato urinário. O óleo da semente é normalmente consumido com fins alimentícios, apresenta significativo potencial antioxidante, alto rendimento e estabilidade oxidativa (SANTOS et al., 2017).

Além dos achados etnofarmacológicos, diversos estudos relacionados à atividade biológica de extratos e substâncias isoladas da espécie já foram realizados corroborando o seu uso na medicina popular. Gomes et al. (2014) através de testes em roedores comprovaram a atividade antinociceptiva dos extratos etanólicos das folhas e das cascas de *C. quercifolius*, confirmando o potencial terapêutico analgésico que se dá provavelmente pela inibição da liberação de mediadores centrais e periféricos.

Extratos de *C. quercifolius* foram testados frente a microorganismos mostrando atividade principalmente contra as bactérias Gram-positivas *Enterococcus faecium*, *Enterococcus faecalis*, *Staphylococcus epidermidis* e *Pseudomonas aeruginosa*. Este mesmo estudo também mostrou que os extratos testados foram capazes de inibir cepas fúngicas de *Lasiodiplodia theobromae*, *L. theobromae* e *Colletotrichum gloeosporioides* (PAREDES, et al., 2016).

Peixoto Sobrinho et al., (2012) corroboram a eficácia de *Cnidocolus quercifolius* citada pelos usuários de no tratamento de tumores em uma pesquisa que utilizou os extratos das partes aéreas para inibir o crescimento de células cancerígenas *in vitro*. No estudo o extrato da casca apresentou inibição de dois tipos de celulares: HT-29 (Human Colon Adenocarcinoma) e Hep-2 (Human Larynx Epidermoid Carcinoma). A identificação de compostos com ação citotóxica em estudos prévios já era um forte indício da atividade anticâncer dos extratos e essa atividade é potencializada quando se trata das substâncias isoladas.

3.2. Metabólitos Secundários de Vegetais

O metabolismo é um conjunto de transformações moleculares que ocorrem nas células dos organismos vivos por meio de reações químicas em cascata mediadas por enzimas. Esse processo metabólico que supre as necessidades energéticas das células é chamado metabolismo primário. Porém há outros tipos de reações mais complexas onde há síntese de substâncias que atuam direta ou indiretamente na sobrevivência da espécie (PEREIRA; CARDOSO, 2012).

Essas substâncias são produtos do metabolismo secundário encontrados nas plantas geralmente em pequenas concentrações, quando comparadas aos compostos do metabolismo primário, apresentando estruturas complexas e com baixo peso molecular. Possuem grande potencial farmacológico, pois como desempenham funções especializadas intrínsecas no vegetal, suas estruturas favorecem a atividade em meio biológico. Embora sejam recorrentes em todas as espécies vegetais, surgem em determinados grupos de plantas de acordo com suas necessidades metabólicas (SILVA; LIMA, 2016).

No passado quando ainda não se conhecia ao certo as estruturas químicas dos metabólitos secundários, estes eram considerados produtos de excreção dos vegetais, porém atualmente com o avanço eminente das pesquisas relacionadas ao assunto sabe-se que eles são essenciais para a adequação do produtor ao meio em que se encontra (SIMÕES et al., 2007).

Trata-se de funções adaptativas que estão associadas a mecanismos de interação da planta com microorganismos, insetos e até mesmo com outras plantas, onde os compostos produzidos podem atuar como fitoalexinas, inseticidas e até mesmo atraentes polinizantes. Além disso, muitos compostos do metabolismo secundário apresentam atividade farmacológica, o que torna o Reino Vegetal uma valiosa fonte de substâncias úteis nas terapias que envolvem humanos (FURLAN; BALDOQUI; KATO, 2009).

Uma vez identificada atividade biológica e segurança de um determinado metabólito secundário, este é utilizado pela Indústria Farmacêutica tanto na produção de fitofármacos, que é o metabólito propriamente dito, quanto no desenvolvimento de princípios ativos utilizando sua estrutura química como modelo para uma nova droga (BRANDÃO, 2009). No ano de 2007 cerca de 75% dos fármacos utilizados para tratar doenças infecciosas e 60% dos anticancerígenos eram de origem natural ou derivados de produtos naturais (MCCHESENEY et al., 2007).

3.3. Óleos Fixos

Também chamados de lipídios ou corpos gordurosos, os óleos fixos são substâncias de origem biológica solúveis em solventes orgânicos que servem principalmente de reserva energética, porém atualmente sabe-se que estes podem apresentar funções mais complexas que essa, como mensageiros em diferentes processos metabólicos, por exemplo. São denominados ‘óleos fixos’ pelo fato de apresentarem altos pontos de ebulição e baixas tensões de vapor, impossibilitando separá-los por destilação, diferentemente dos óleos essenciais (COSTA et al., 2015; SIMÕES et al., 2007).

Dependendo do estado físico dos compostos em questão, pode-se ainda enquadrá-los como gorduras ou ceras. Quando se apresentam em estado físico líquido na temperatura

ambiente, são considerados óleos, quando possuem consistência mole, formando pastas, são tratados como gorduras, as quais se fundem em temperaturas acima de 45°C. As ceras se apresentam em estado sólido, de consistência relativamente dura e se fundem acima de 60°C. Contudo, a fusibilidade dos lipídios é muito relativa quando se trata de diferentes regiões com climas que variam de temperatura, o que afeta a classificação por este critério (SIMÕES et al., 2007).

Basicamente, os óleos fixos são compostos por glicerídeos de ácidos graxos saturados e/ou insaturados, ou seja, uma molécula de glicerol ($C_3H_8O_3$) se liga a uma, duas ou três moléculas de ácidos graxos, que podem ser diferentes ou não, dando origem a um mono-, di- ou triglicerídeo (Figura 2). A denominação ‘ácido graxo’ se refere à qualquer ácido mono ou dicarbóxico que é liberado através da hidrólise de lipídeos naturais, sendo os mais recorrentes dentre os saturados o ácido láurico ($C_{12}H_{24}O_2$), mirístico ($C_{14}H_{28}O_2$), palmítico ($C_{16}H_{32}O_2$) e esteárico ($C_{18}H_{36}O_2$). Já quando se trata dos insaturados, os principais representantes são o ácido oleico ($C_{18}H_{34}O_2$), linoleico ($C_{18}H_{32}O_2$) e linolênico ($C_{18}H_{30}O_2$), ambos apresentados da Figura 3 (ROBBERS et al., 1997).

Figura 2 – Formação dos Triglicerídeos

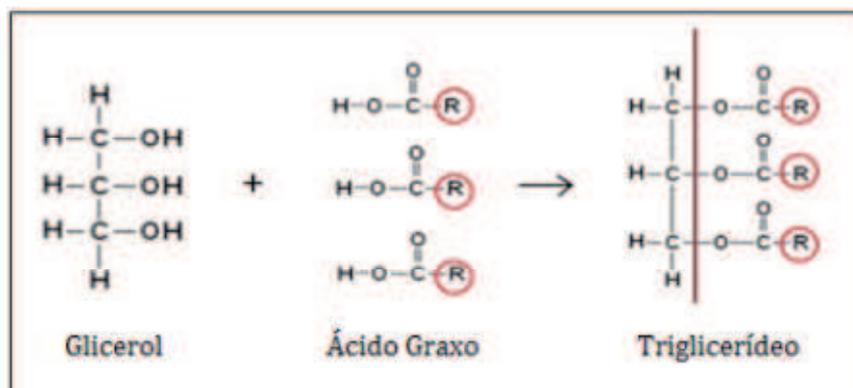
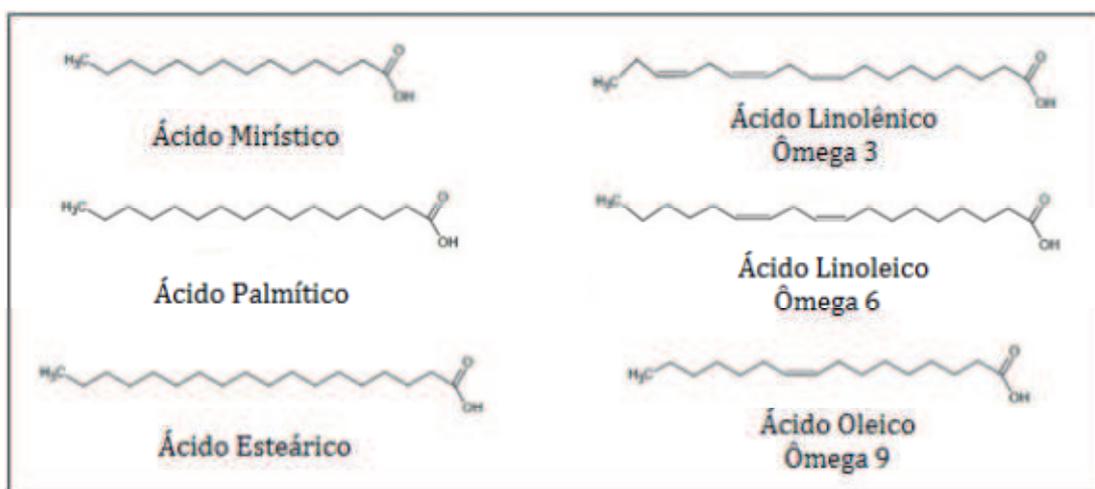


Figura 3 – Ácidos graxos mais comuns em óleos fixos

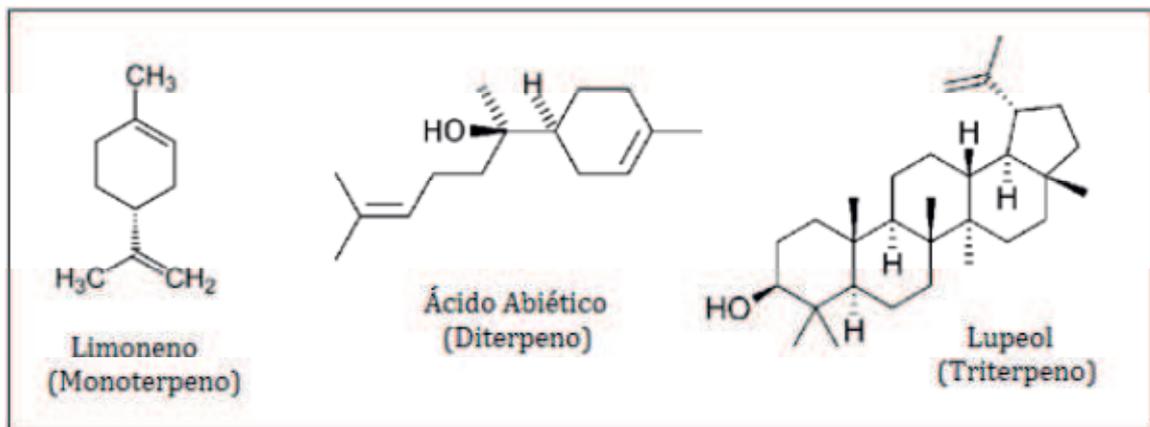


A obtenção de óleos fixos das plantas se dá geralmente a partir de dois processos: Extração por pressão, utilizada principalmente quando o material vegetal é semente, havendo apenas uma prensagem a fim de manter a integridade do óleo extraído; e Extração por Esgotamento de Solvente, processo no qual o vegetal é submetido a contato direto com solvente orgânico (Éter de Petróleo ou n-Hexano) o qual extrai por semelhança de polaridade os constituintes químicos (SIMÕES et al., 2007)

3.4. Terpenoides

Dentre as classes de metabólitos secundários existentes, osterpenoides apresentam as mais variadas estruturas químicas. O esqueleto carbônico destes compostos são formados por unidades de 2-metilbutadieno, ou simplesmente isopreno. A classificação dos terpenoides é baseada na quantidade de moléculas de isoprenos que o compõem, em que uma unidade de isopreno equivale aos hemiterpenos (C_5), duas unidades aos monoterpenos (C_{10}), três unidades sesquiterpenos, quatro unidades diterpenos (C_{20}), cinco unidades sesterterpenos (C_{25}), seis unidades triterpenos (C_{30}) e oito unidades tetraterpenos (C_{40}) (MARQUES, 2010).

Figura 4 – Exemplos de mono-, di- e triterpeno



Embora a classificação dos terpenoides se dê pela contagem de isoprenos do esqueleto carbônico, os verdadeiros precursores na biossíntese destes metabólitos são o mavelonato ou ácido mavelônico e deoxixilulose fosfato, porém a do mavelonato é a mais conhecida (DEWIK, 2002). A prevalência dos terpenoides nos vegetais varia de acordo com a espécie e a maneira como são extraídos.

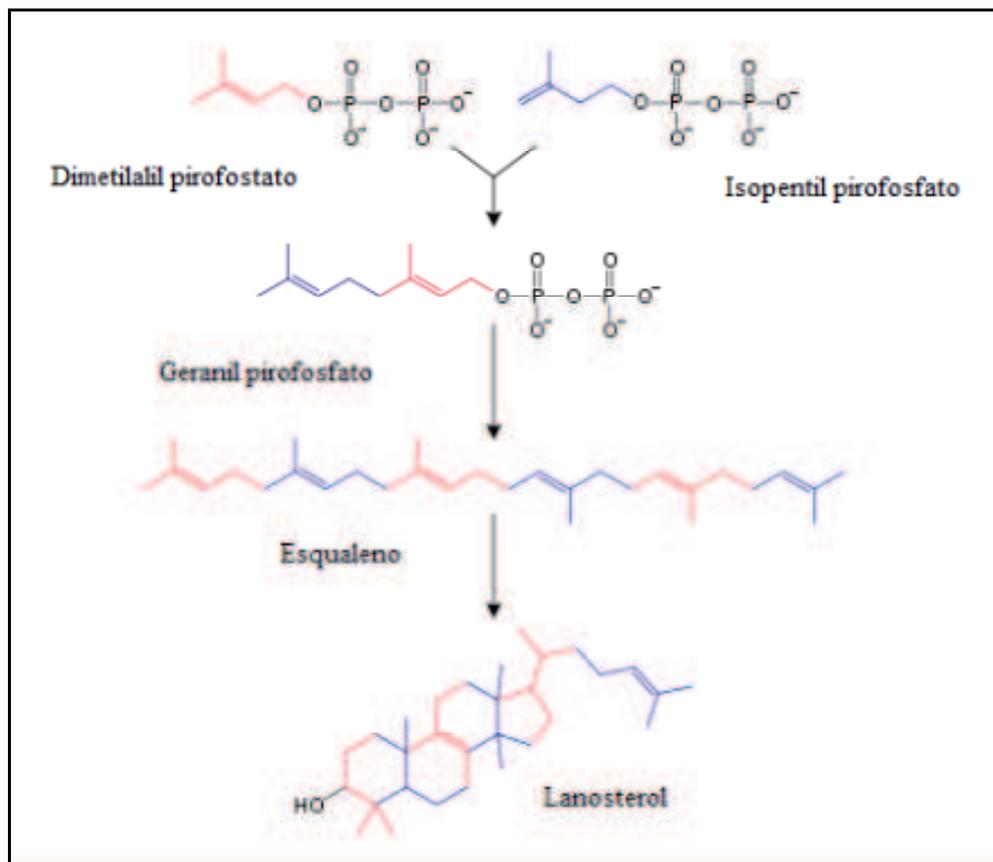
Em óleos essenciais é comum a presença de mono e sesquiterpenos, que são compostos voláteis e geralmente dão odor característico ao óleo, como o geraniol e citrionelol por exemplo, os quais compõem o óleo essencial de gerânio extraído das rosas de *Pelargonium graveolense* vastamente utilizado na indústria cosmeceutica (PATIAS et al., 2016). Os diterpenos também são frequentes em óleos essenciais, porém podem aparecer em

óleos fixos na fórmula de ésteres de ácidos graxos, como é o caso do cafestol e caveol encontrados nos grãos de café (*Coffea arabica*) (TSUKUI, OIGMAN, REZENDE, 2013).

Os triterpenos são usualmente encontrados em sua forma livre ou como derivados oxigenados, glicosilados (triterpenos saponinas) e esterificados pela hidroxila no carbono C-3 ou em outras posições (SANTOS, 2010).

A síntese dos triterpenos ocorre a partir do esqualeno (6 moléculas de isopreno ligadas em cauda-cabeça), a qual também se dá para formação dos esteroides até a formação do 2,3-epóxido esqualeno (Figura 5). Com a formação do 2,3-epóxido esqualeno, este sofre um processo de ciclização que origina uma grande diversidade de conformêros. Podem ocorrer também rearranjos envolvendo metilas e hidrogêncios, acarretando na formação de cadeias carbônicas específicas de alguns triterpenos (SANTOS, 2010).

Figura 5 – Formação do Esqualeno



São descritas na literatura diversas atividades farmacológicas atribuídas aos triterpenos, dentre estas propriedades se destacam a ação antiinflamatória, antibacteriana, fungicida, antiviral, analgésica, cardiovascular e antitumoral (PATROČKA, 2003).

4. DESENVOLVIMENTO

4.1. Metodologia Experimental

4.1.1. Obtenção do Extrato Etanólico Bruto (EEB)

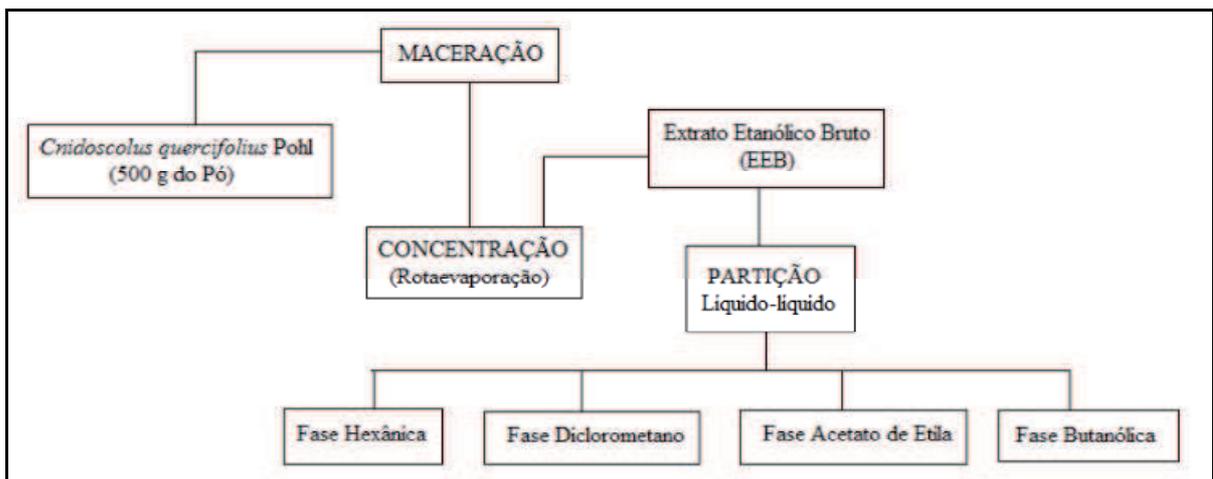
As folhas e galhos de *Cnidoscolus quercifolius* Pohl (faveleira) foram coletadas no município de Campina Grande em uma área vegetal pertencente à Universidade Estadual da Paraíba (UEPB) no dia 15 de agosto de 2013. Foi coletado aproximadamente 3 Kg de folhas e o material também foi preparado no Laboratório de Fitoquímica da UEPB.

O material vegetal coletado foi submetido à secagem em estufa com circulação de ar, a uma temperatura de 40°C, por aproximadamente duas semanas. Durante esse período (intervalo de 3 dias) as plantas eram pesadas para verificar se o peso encontrava-se constante, o que comprovava que a perda de água já havia cessado. A partir do peso constante, as partes aéreas da faveleira foram submetidas a trituração em um moinho de facas obtendo-se 500 g de pó, que foi direcionado para preparação do extrato etanólico.

Para preparação do EEB foi realizada uma maceração em álcool 96%, onde a troca de solvente foi feita a cada 72 horas. À medida que se obtinha o líquido do macerado, este era concentrado em rotaevaporador em temperatura de aproximadamente 50°C.

4.1.2. Obtenção da Fase Hexânica (FH)

Fluxograma 1 – Obtenção do EEB e FH



O fracionamento do extrato etanólico bruto (EEB) das folhas de *C. quercifolius* foi realizado através de uma partição líquido-líquido. Preparou-se uma solução hidroalcoólica (3:7) com 100g de EEB e esta foi colocada em uma ampola de separação. Foram acrescentados solventes em ordem crescente de polaridade: N-hexano, Diclorometano, Acetato de Etila e N-butanol.

As soluções retiradas da ampola após a passagem de cada um dos solventes foram concentradas por rotaevaporação dando origem às fases hexânica (FH), diclorometano (FD), acetato (FA) e butanólica (FB).

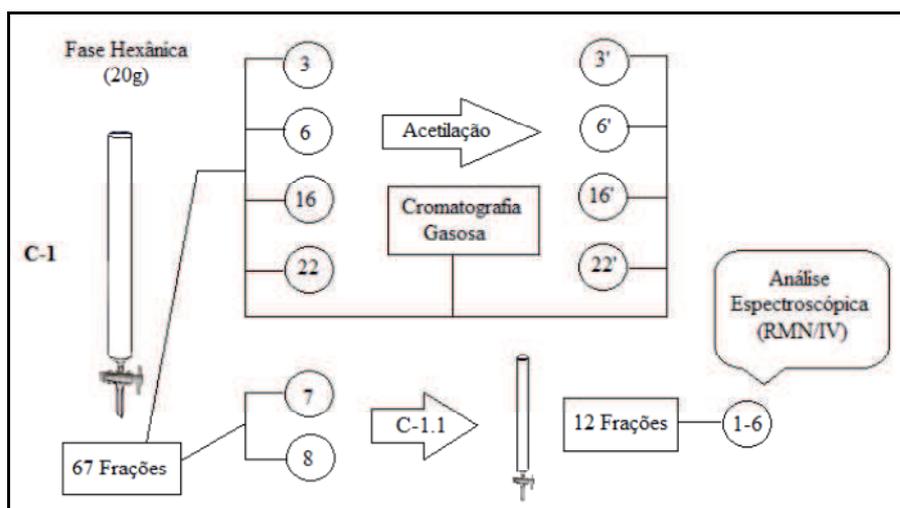
4.1.3. Isolamento dos Compostos

4.1.3.1. Métodos Cromatográficos

Vinte gramas da fase hexânica de *C. quercifolius*, foi cromatografada em coluna (C-1) de sílica gel (0,063 – 0,2 mm/ 70-230 mesh ASTM), tendo como sistema eluente os solventes hexano, diclorometano, acetato de etila e metanol, usados de forma única e como misturas binárias sempre em ordem crescente de polaridade. Obteve-se um total de 67 frações, que foram reunidas mediante comparações de RF (*relative front*) observadas em placas de Cromatografia em Camada Delgada Analítica (CCDA), com auxílio de um aparelho emissor de luz ultravioleta (254 e 366 nm) e vapores de iodo utilizados como reveladores.

As frações 3 (958,2mg), 6 (863,7mg), 16 (1067,8mg) e 22 (192,7mg) se tratavam de óleos fixos que foram enviados para análise em Cromatógrafo Gasoso. As frações 7 e 8 foram reunidas por apresentar grande semelhança entre seus RF's. Foi, então, montada uma nova coluna (C-1.1) tendo como amostra a mistura das frações 7-8 (910,0 mg) da qual obteve-se 12 frações. Destas, as frações 1 a 6 formaram sólidos cristalinos solúveis em clorofórmio e também por semelhança de RF's foram reunidas. A fração 1-6 (20mg) foi encaminhada para análises espectroscópicas na região do IV e de RMN de ^1H e ^{13}C .

Fluxograma 2 – Obtenção das amostras para análise



4.1.3.2. Acetilação de Compostos Oleosos

Uma pequena alíquota das frações oleosas 3, 6, 16 e 22 retiradas da (C-1) foram submetidas à reação de acetilação utilizando anidrido acético e piridina como solvente. Para cada 20 mg de amostra foi feita uma solução com 0,5 mL de piridina e 1,0 mL de anidrido

acético. Esta solução ficou sob agitação magnética por 24 h em temperatura ambiente. A confirmação do término da reação foi feita através de CCDA. Para retirar a piridina foi utilizada uma solução salina (água/NaCl 0,9%) que foi agitada junto com o produto acetilado em um funil de separação e posteriormente descartada.

As frações acetiladas também foram encaminhadas para análise em Cromatógrafo Gasoso para posterior comparação com os espectros das frações não acetiladas.

4.1.3.3. Cromatografia Gasosa

As frações oleosas acetiladas e não acetiladas foram diluídas em hexano na concentração de 300 ppm e enviadas ao Instituto de Pesquisa em Fármacos e Medicamentos (IpeFarM) na Universidade Federal da Paraíba, onde foram submetidas à análise em Cromatógrafo Gasoso acoplado a Espectrômetro de Massa da marca SHIMADZU, modelo GCMS-QP2010 Ultra.

A composição dos óleos foi determinada através do método descrito por Favacho (2009) - Condições programadas no aparelho: Coluna capilar DB-1 (dimetil-polisiloxane) com 30 m de comprimento e 0,25 mm de diâmetro interno; gás de arraste: Hélio (1 mL/min); programa: 120°C/2 min e, depois, aquece 8°C/min até 290°C, permanecendo por 10 min; temperatura do injetor: 250°C; temperatura do detector: 280°C; temperatura do forno: 120°C; modo de injeção: 0,1 µL (solução 10%), split 1:20, 500 ng/na coluna. Os espectros de massa foram produzidos por impacto de elétrons (70 eV). Os espectros de massa dos constituintes foram comparados com os padrões existentes no banco de dados NIST.

4.1.4. Análise Espectroscópica

A investigação espectroscópica da fração 1-6 (C1.1) foi realizada no Instituto de Pesquisa em Fármacos e Medicamentos (IpeFarM) da Universidade Federal da Paraíba. Os espectros na região do Infravermelho foram obtidos em aparelho SHIMADZU, modelo Prestige2, utilizando pastilhas de KBr para dispersão do composto químico. Foram obtidos espectros de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de ¹H e ¹³C (500 MHz e 125 MHz) envolvendo técnica APT obtidos em aparelho VARIAN.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1. Análise das Frações Oleosas

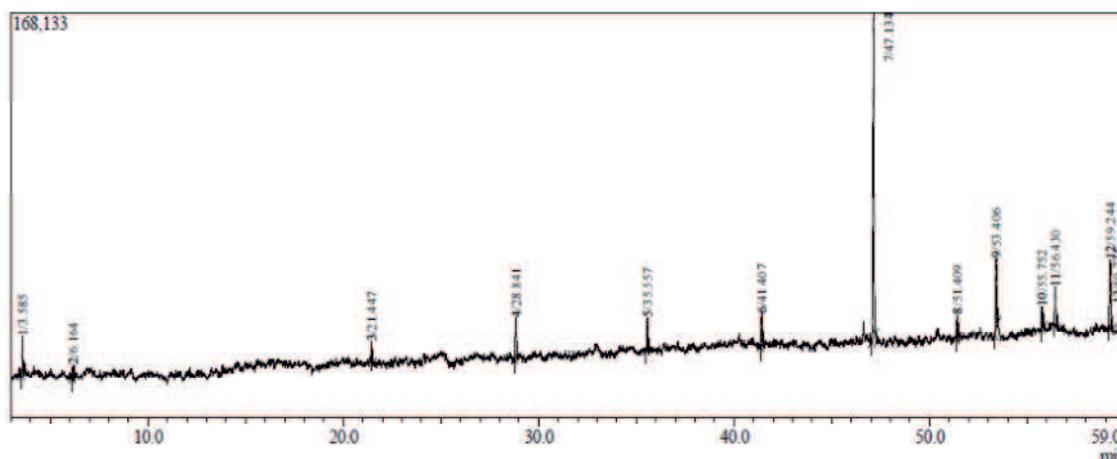
5.1.1. Cromatografia Gasosa (CG-EM) – Óleos não acetilados

As primeiras frações da coluna da FH (C-1) após serem concentradas apresentaram aspecto e consistência de óleos. Seus pontos de vaporização variavam entre 150° e 200° C, o

que possibilitou dizer que se tratava de óleos fixos. Foram escolhidas 4 amostras (3, 6, 16 e 22) para injeção em Cromatógrafo Gasoso.

5.1.1.1. Fração 03

Figura 6 – Cromatograma da Fração 03



O cromatograma da Fração 03 (Figura 6) apresentou 13 picos, sendo 4 referentes a substâncias que não foram identificadas no banco de dados, 3 referentes a compostos artefatos, isto é, não fazem parte da composição do óleo, e 6 picos referentes aos componentes do óleo (Figura 7).

Todas os componentes do cromatograma, exceto os artefatos, bem como a concentração (Área do pico) e seus tempos de retenção com suas respectivas massas moleculares, estão expressos no quadro a seguir:

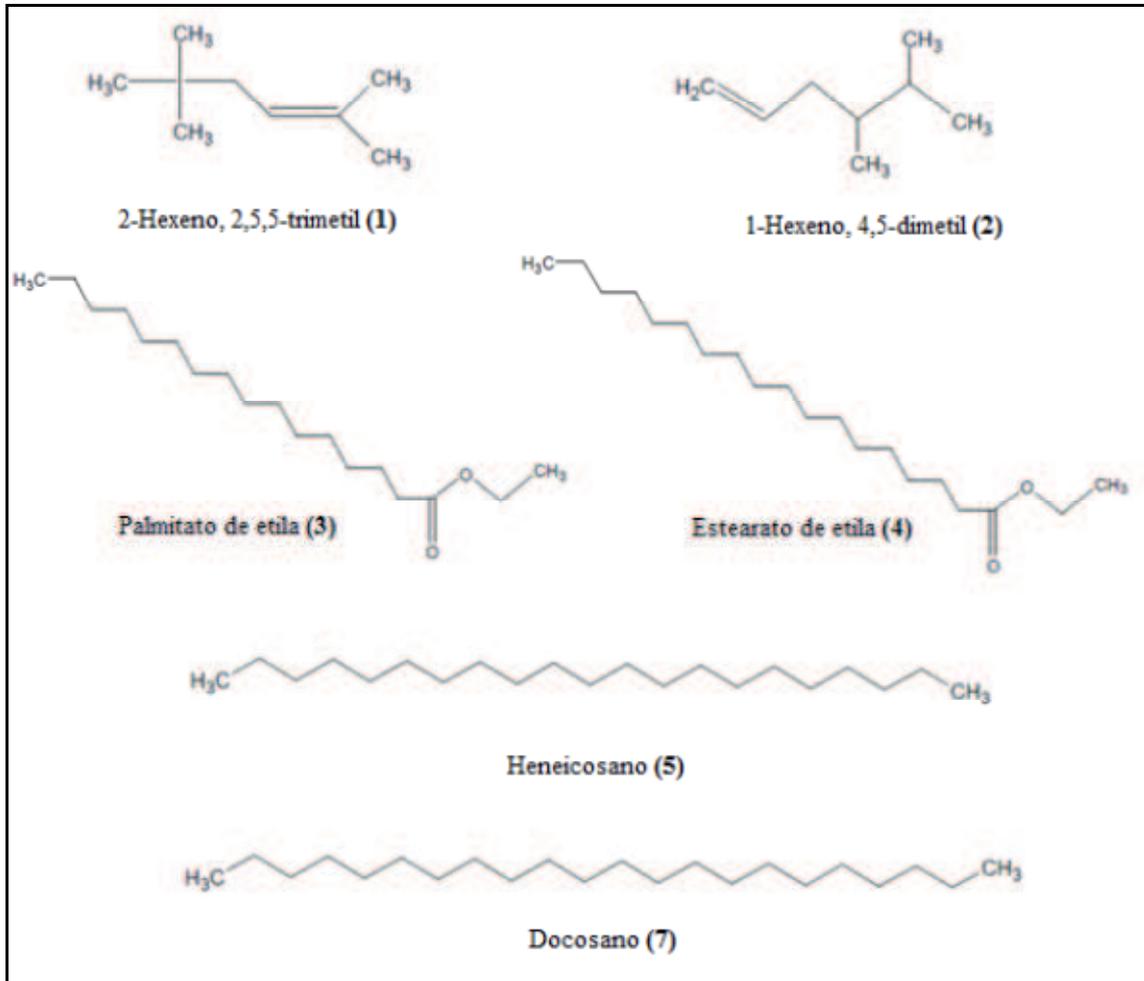
Quadro 1 – Dados cromatográficos da Fração 03

Pico	Tempo de Retenção (minutos)	Concentração (%)	Constituinte Químico	Fórmula Molecular	Massa Molecular m/z $[M]^+$
1	3,585 min	3,26	2-Hexeno,2,3,3-trimetil	C_9H_{18}	126
2	6,164 min	1,38	1-Hexeno, 4,5-dimetil	C_8H_{16}	112
7	47,134 min	45,78	Palmitato de etila	$C_{18}H_{36}O_2$	284
9	53,406 min	9,75	Estearato de etila	$C_{20}H_{40}O_2$	312
11	56,430 min	5,65	Heneicosano	$C_{21}H_{44}$	296
12	59,244 min	11,32	Docosano	$C_{22}H_{46}$	310

O palmitato de etila(**3**) foi o composto majoritário da Fração 03, com uma prevalência de 45,78% apresentando um tempo de retenção de 47,134 minutos. Também apareceram picos referentes à presença do estearato de etila(**4**)na representando 9,75%, docosano(**6**) 11,32% e heneicosano(**5**) 5,65%. Houve também o aparecimento de estruturas de siloxanos, provavelmente oriundos da sílica gel que compunha a fase estacionária da coluna da qual foi retirada a amostra, sendo essas estruturas tratadas portanto como artefatos. Após esta análise, estes artefatos foram retirados das frações através de filtração.

É comum em óleos fixos a prevalência de ácidos graxos insaturados, como ácido palmítico e esteárico. Também é recorrente a presença de hidrocarbonetos acíclicos como os hexenos ramificados **(1)** e **(2)** e de alcanos saturados como heneicosano e docosano.

Figura 7 – Compostos identificados na Fração 03



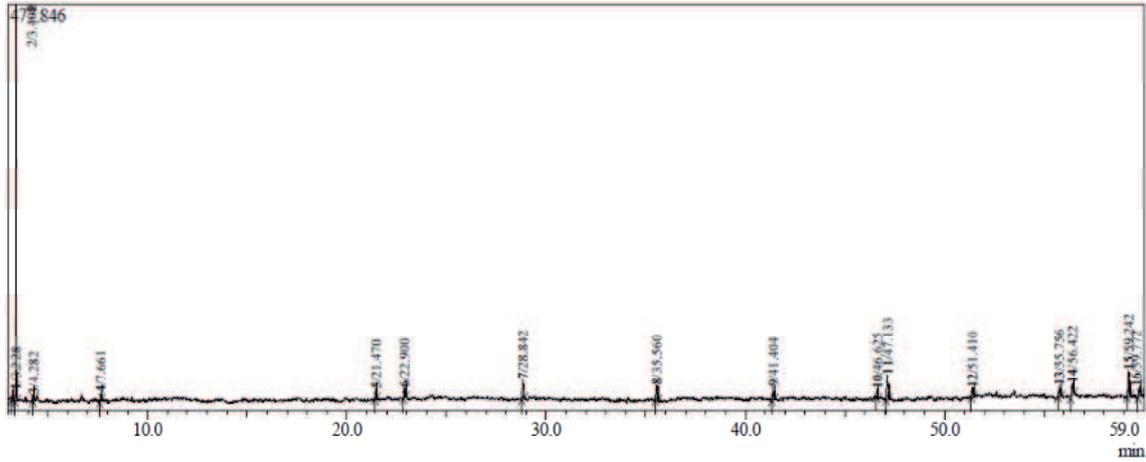
Silva et al. (2014) observaram a composição de óleos fixos extraídos das sementes de *C. quercifolius*, apresentando o ácido linoleico ($C_{18}H_{32}O_2$) como o composto majoritário (cerca de 50%), diferindo do presente estudo onde não foi observada a presença deste ácido graxo. Isso pode ocorrer devido à diferença da origem do óleo, por exemplo, já que a produção de metabólitos das folhas pode diferir drasticamente das sementes. Ainda na análise destes autores, pôde-se constatar a presença de ácido palmítico (+/- 18%) e ácido esteárico (+/- 12%), os quais também ocorreram na amostra 03, entretanto em concentrações diferentes e acrescidos de radical etila que são os compostos **(3)** e **(4)** da Figura 7.

5.1.1.2. Fração 06

O cromatograma da fração 06 (Figura 8) apresentou um total de 16 picos, onde 4 foram referentes a artefatos, 4 de substâncias não cadastradas na biblioteca e 8 picos

referentes aos compostos do óleo, os quais estão expressos na Figura 9. Os dados do cromatograma estão expressos no Quadro 2.

Figura 8 – Cromatograma da Fração 06

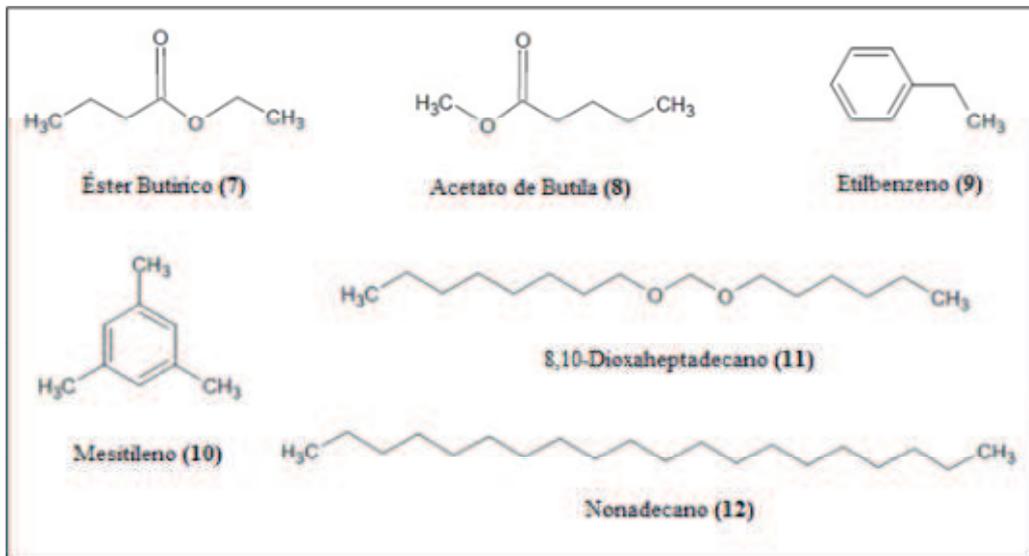


Quadro 2 – Dados cromatográficos da Fração 06

Pico	Tempo de Retenção (minutos)	Concentração (%)	Constituinte Químico	Fórmula Molecular	Massa Molecular m/z [M] ⁺
1	3,228	1,46	Éster Butírico	C ₆ H ₁₂ O ₂	116
2	3,406	48,00	Acetato de Butila	C ₆ H ₁₂ O ₂	116
3	4,282	0,87	Etilbenzeno	C ₈ H ₁₀	106
4	7,661	1,61	Mesitileno	C ₉ H ₁₂	120
6	22,900	2,47	8,10-Dioxaheptadecano	C ₁₅ H ₃₂ O ₂	244
11	47,133	7,34	Palmitato de etila	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	284
14	56,422	4,51	Nonadecano	C ₁₉ H ₄₀	268
15	59,242	7,96	Heneicosano	C ₂₁ H ₄₄	296

Diferente da Fração 03, o composto majoritário da fração 06 foi o acetato de butila (48%), porém houve a presença palmitato de etila(3) e o hidrocarboneto heneicosano(5), assim como na Fração 03.

Figura 9 - Compostos identificados na Fração 06



O éster butírico(7) e o acetato de butila(8) fazem parte de uma classe muito conhecida de compostos orgânicos voláteis derivados de ácidos graxos vegetais que apresentam propriedades aromatizantes, sendo largamente utilizados pela Indústria Alimentícia e Farmacêutica. Há uma grande demanda de consumo desses compostos por parte dessas indústrias, o que ocasiona a busca pela produção em maiores quantidades através de vias sintéticas. Contudo, os produtos esterificados oriundos desses processos diminuem seu valor comercial (BITENCOURT; PEREIRA, 2006).

O etilbenzeno(9) e o mesitileno(10) são intermediários químicos voláteis também de relevância comercial utilizados pelas indústrias química, petroquímica e farmacêutica. Suas aplicações variam de solventes a precursores de diversos produtos de tinturaria e verniz. Entretanto, a principal empregabilidade do etilbenzeno (9) é na fabricação de estireno, monômero utilizado na produção de polímeros como o poliestireno (Isopor®) (GESTIS, 2017; FENSTERSEIFER, 2010).

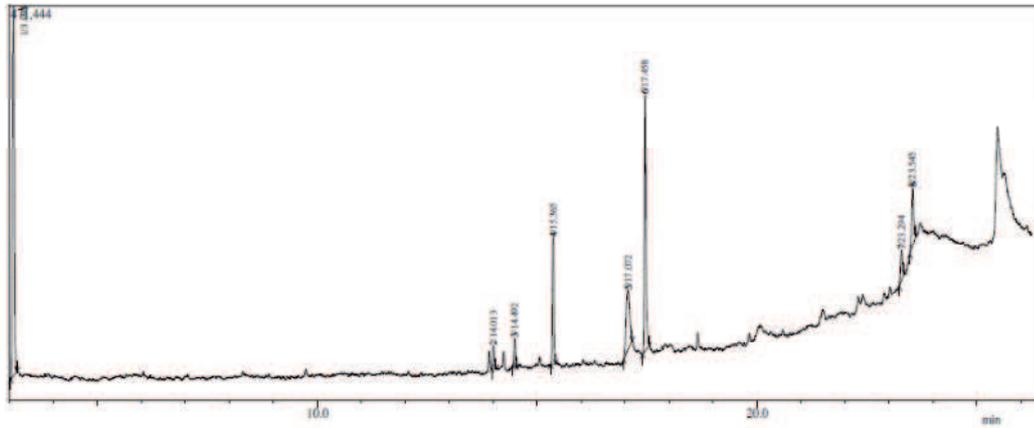
Não é frequente o aparecimento de compostos da natureza do etilbenzeno(9) e mesitileno(10) em estudos de óleos fixos vegetais e isto pode se dar devido ao método de extração, onde as amostras analisadas neste trabalho foram extraídas por solventes orgânicos, por meio de cromatografia líquida, diferentemente de diversos estudos da literatura, os quais observam óleos e graxas retirados dos vegetais por métodos mecânicos como a prensagem a frio, por exemplo.

Embora seja possível encontrar na literatura estudos fitoquímicos que detectam a presença destas substâncias em óleos (MARQUES, 2010), é bem provável que não façam parte da composição original do produto natural, visto que, ao analisar as rotas biossintéticas dos metabólitos vegetais não é possível observar a participação de compostos desse tipo, nem como intermediários, nem como produtos. Diante disso, sugere-se que o etilbenzeno(9) e o mesitileno(10) podem ser oriundos dos solventes utilizados nos processos cromatográficos, que muitas vezes não apresentam grau elevado de pureza e possuem contaminantes que podem interferir no resultado final da análise.

5.1.1.3. Fração 16

O cromatograma da Fração 16 apresentou 8 picos (Figura 10), dos quais 3 não foram associados a nenhuma estrutura química da biblioteca e 5 são referentes a compostos apresentados na Figura 11. Os dados cromatográficos estão expressos no Quadro 3.

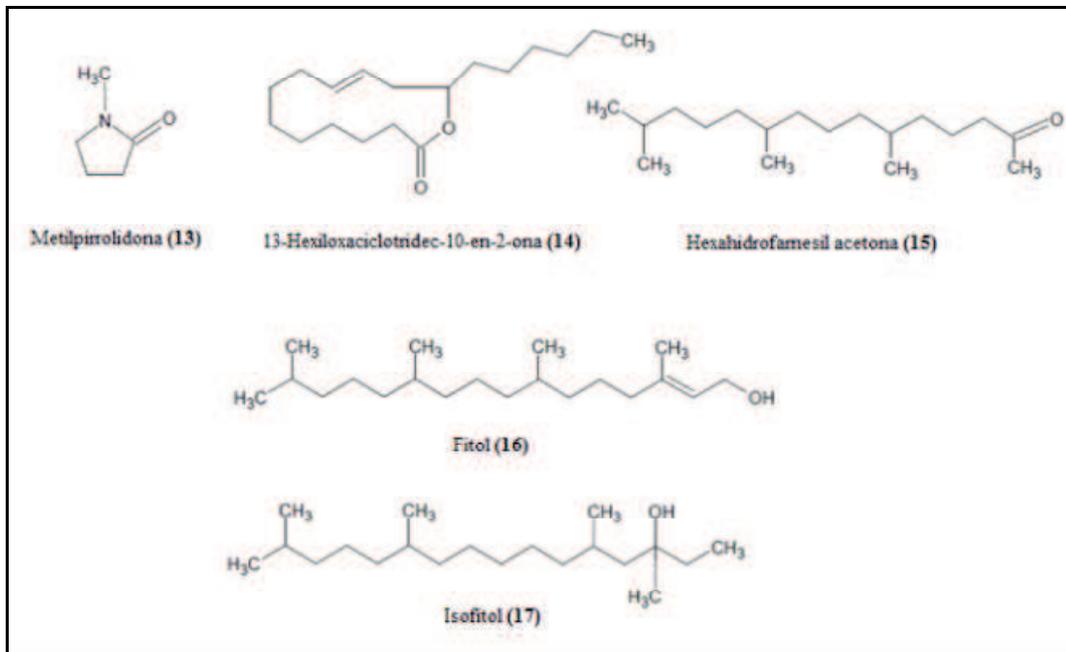
Figura 10 – Cromatograma da Fração 16



Quadro 3 – Dados cromatográficos da Fração 16

Pico	Tempo de Retenção (minutos)	Concentração (%)	Constituinte Químico	Fórmula Molecular	Massa Molecular m/z $[M]^+$
1	3.095	47,09	Metilpirrolidona	C_5H_9NO	99
2	14.013	1,65	Hexahidrofarnesil Acetona	$C_{18}H_{36}O$	268
4	15.365	8,77	Isofitol	$C_{20}H_{40}O$	296
5	17.072	10,60	13-Hexiloxaciclotridec-10-en-2-ona	$C_{18}H_{32}O_2$	280
6	17.458	23,57	Fitol	$C_{20}H_{40}O$	296

Figura 11 - Compostos identificados na Fração 16



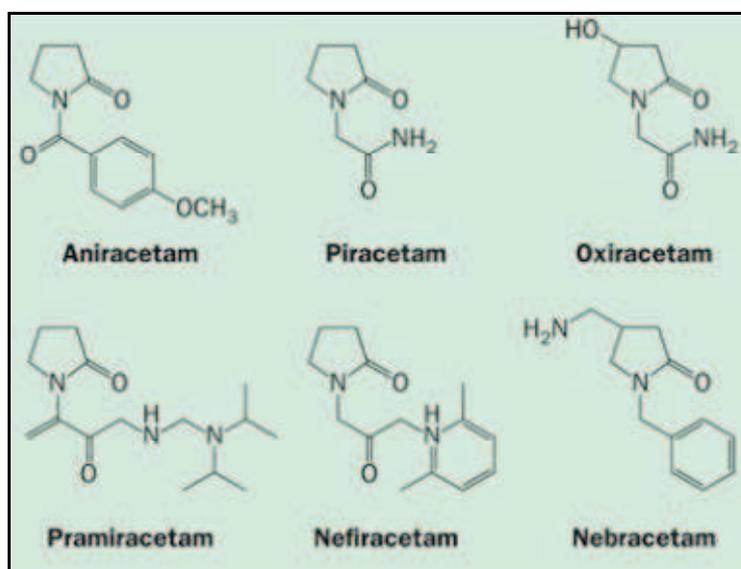
O composto majoritário da fração 16 foi ametilpirrolidona(13), seguido do fitol(16), do 13-Hexiloxaciclotridec-10-em-2-ona (14) e do isofitol(17).

A metilpirrolidona(13)é um composto bastante utilizado na indústria farmacêutica como co-solvente, apresentando propriedade solubilizante superior ao etanol e

propilenoglicol. Isso se deve ao fato da metilpirrolidona apresentar solubilidade em fase aquosa e com um coeficiente de partição de -0,54 possibilita miscibilidade também em fase oleosa. A baixa toxicidade deste composto aumenta ainda mais seu uso na indústria. Além disso, a literatura mostra que metilpirrolidona pode atuar melhorando a absorção de alguns fármacos, principalmente os de via transdérmica, como a insulina, ibuprofeno e indapamina(SOUZA, 2016; MARTINS, VEIGA, 2002).

Existem vários fármacos atualmente no mercado que possuem o grupamento pirrolidona em sua estrutura (Figura 12) e embora haja uma similaridade com o neurotransmissor GABA (ácido gama aminobutírico), poucos destes fármacos possuem ação gabaérgica(SHORVON, 2001).

Figura 12 – Exemplos de fármacos pirrolidônicos



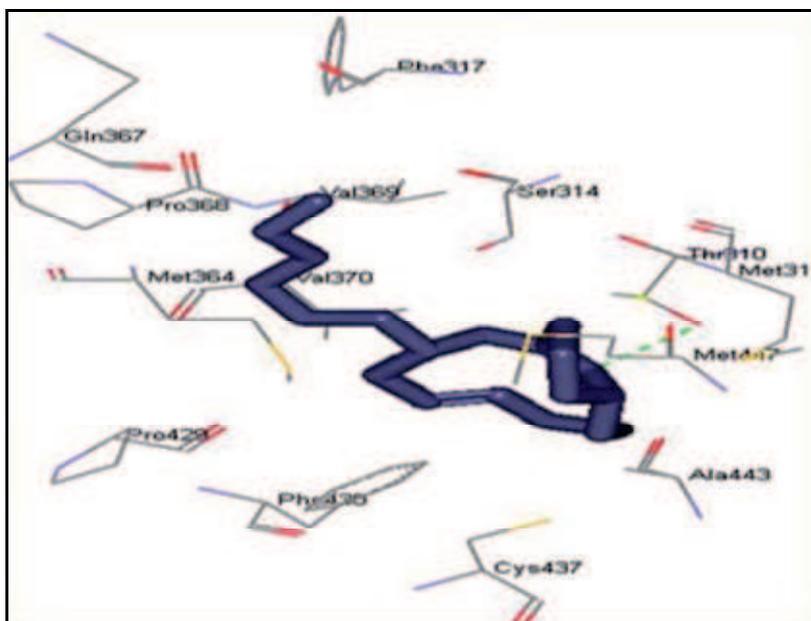
Em estudo realizado com as folhas da espécie *Cnidocolusacontifolius*, obteve-se cromatograma com substâncias semelhantes às mostradas na análise do presente estudo, inclusive pirrolidona, porém na forma desmetilada. Ocorreu também a presença do ácido esteárico e palmitato de metila, similar à fração 03, onde obteve-se estas estruturas porém ligadas a um radical etil(OMOTOSO; KENETH; MKPARU, 2014).

A substância 13-Hexiloxaciclotridec-10-en-2-ona (**14**) foi identificada na espécie *Ambrosia marítima* (Asteraceae), planta comum em países africanos, utilizada pela população na medicina tradicional local para tratamento de distúrbios gastrintestinais, infecções e diversos tipos de tumores (DIRAR et al., 2014).

Mohamed et al.(2014) sugerem a atividade quimioterápica deste composto(**14**) através de um estudo de Docking Molecular, onde o mesmo apresentou interação química (Figura 13) *in vitro* com a enzima aromatase do complexo Citocromo P450 (CYP19A1), a qual

participa do metabolismo de diversos xenobióticos, além de estar envolvida na síntese de estrógenos e por isso é considerada um alvo para o câncer de mama.

Figura 13 – Docking de 13-Hexiloxaciclotridec-10-en-2-ona (**14**) em Ciocromo P450 - CYP19A1



Hexahidrofarnesil Acetona (**15**) é uma fitona frequentemente encontrada em óleos essenciais. As espécies *Phlomis leucophracta*, *Phlomis chimerae* e *Phlomis grandiflora*, ambas nativas da Turquia, são produtoras de óleos essenciais com atividade antimicrobiana comprovada, e têm na composição química de seus óleos a fitona (**15**) como um de seus constituintes majoritários (LIOLIOS et al., 2007).

O fitol (**16**) é o isoprenoide acíclico provavelmente mais abundante na biosfera, faz parte da molécula da clorofila e está ligado a ela através de uma ligação de éster. É citado na literatura como agente antiinflamatório e analgésico (LEITE, 2010). Já foi identificado em inúmeras plantas, devido à sua ligação com a clorofila, é recorrente em extratos de folhas e caules, como no extrato hexânico de *Euphorbia tirucalli*, espécie pertencente à mesma família que *Cnidocolus quercifolius* (MACHADO, 2007). O isofitol (**17**) é um dos produtos do fitol.

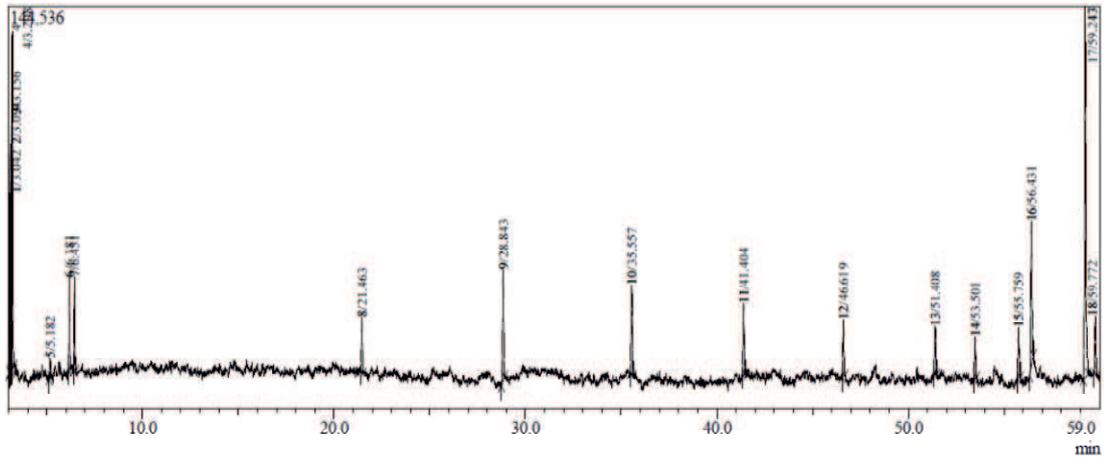
A fração 16 apresentou uma quantidade de substâncias menor do que às demais, porém estas substâncias já são conhecidas por apresentarem alguma atividade biológica, acentuando assim o interesse em realizar testes mais aprofundados, não só com esta fração, mas com todas avaliadas neste estudo.

5.1.1.4. Fração 22

O cromatograma da Fração 22 (Figura 14) apresentou 16 picos, sendo 8 referentes a artefatos, ou seja, não fazem parte da composição do óleo, como dito anteriormente, e 8

referentes aos constituintes presentes na amostra (Figura 15). Os componentes do cromatograma da Fração 22, exceto os artefatos, estão expressos no Quadro 4.

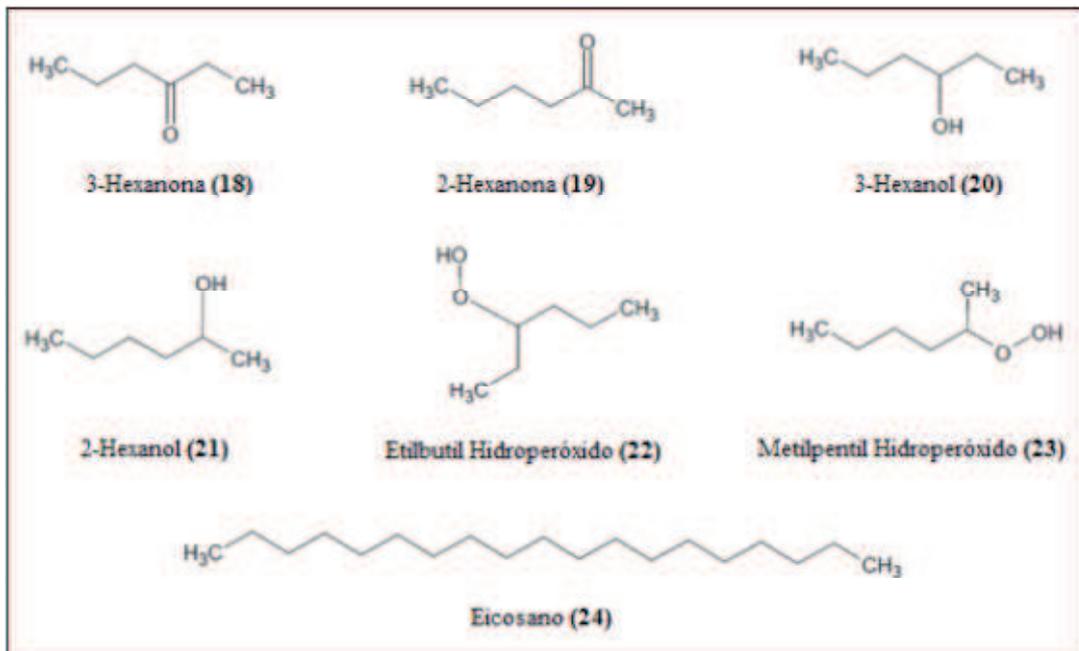
Figura14 – Cromatograma da Fração 22



Quadro 4 – Dados cromatográficos da amostra 22

Pico	Tempo de Retenção (minutos)	Concentração (%)	Constituinte Químico	Fórmula Molecular	Massa Molecular m/z $[M]^+$
1	3,042	4,63	3-Hexanona	$C_6H_{12}O$	100
2	3,094	6,35	2-Hexanona	$C_6H_{12}O$	100
3	3,156	7,37	3-Hexanol	$C_6H_{14}O$	102
4	3,208	10,66	2-Hexanol	$C_6H_{14}O$	102
6	22,900	2,47	EtilbutilHidroperóxido	$C_6H_{14}O_2$	118
7	47,133	7,34	MetilpentilHidroperóxido	$C_6H_{14}O_2$	118
16	56,431	8,63	Eicosano	$C_{20}H_{42}$	282
17	59,243	24,24	Heneicosano	$C_{21}H_{44}$	296

Figura 15 - Compostos identificados na Fração 22



Uma característica interessante observada nesta amostra foi a presença de algumas substâncias voláteis que são registradas, usualmente, na literatura compondo óleos essenciais. É o caso do mesitileno(**10**), que ocorreu na fração 16, encontrado em óleos essenciais de espécies do gênero *Protium* e do 3-hexanol(**20**), presente no óleo essencial da poupa do pequi (*Caryocar brasiliense*) (MARQUES, 2010; CORDEIRO et al., 2013).

Janes et al. (1992) comprovaram a atividade anestésica de 3-hexanol(**20**), fato que pode estar relacionado com o efeito de “dormência” observado quando há contato direto da pele com as folhas de *Cnidocolus quercifolius*. A presença dos constituintes 3-hexanona(**18**), 2-hexanona(**19**), 3-hexanol(**20**) e 2-hexanol(**21**) não foi descrita em nenhum estudo referente a extratos da espécie *Cnidocolus quercifolius*.

Com relação aos hidroperóxidos(**22**) e (**23**), devido às suas estruturas químicas, são substâncias consideradas espécies reativas. Trata-se dos primeiros produtos da peroxidação lipídica, ou seja, do processo de degradação dos ácidos graxos. De maneira geral, a peroxidação nas moléculas aumenta sua toxicidade, causando danos a membranas biológicas (MIYAMOTO, 2005).

Por outro lado, essa toxicidade proporcionada pela espécie reativa pode ser de grande valia quando aplicada em terapias alternativas de controle antimicrobiano e crescimento celular desordenado (em alguns tipos de câncer, por exemplo). A Terapia Fotodinâmica pode ser citada como uma dessas terapias, onde, a partir da exposição do composto à luz, há a formação de oxigênio singlete (1O_2) o qual participa de reações de oxidação com moléculas importantes na homeostase celular, como aminoácidos, lipídeos e bases de DNA, ocasionando apoptose (PERUSSI, 2007).

O composto mais abundante da Fração 22 foi o heneicosano(**5**), com ocorrência de 24,24% seguido pelo 2-hexanol(**20**) com 10,66%. Os compostos 3-hexanona(**18**) e 2-hexanona(**19**) possuem mesma fórmula molecular diferindo apenas pela posição da carbonila. Da mesma maneira pode-se referir ao 3-hexanol (**20**) e 2-hexanol(**21**), o que permite trata-los com mesma relevância de concentração.

Assim como na Fração 03 e 06, também houve na fração 22 presença dos alcanos alifáticos eicosano(**24**) e heneicosano(**5**), sendo condizente com Ferreira et al. (2005) onde afirma-se que a ocorrência de hidrocarbonetos é muito comum na superfície lipídica de quase todas as plantas, chegando a predominar quantitativamente em alguns casos.

A comparação entre a composição lipídica das frações 03, 06, 16 e 22 pode ser observada na Tabela 1, a qual apresenta as substâncias e as suas respectivas concentrações. A

comparação dos dados deste estudo com outros relacionados a análise de óleos de sementes de *Cnidocolusquercifolius* estão apresentados na Tabela 2.

Tabela 1 - Comparação de compostos identificados nas frações analisadas e suas concentrações

Fração 03		Fração 06	
2-Hexano,2,3,3-trimetil	3,26 %	Éster Butírico	1,46 %
1-Hexano, 4,5-dimetil	1,38 %	Acetato de Butila	48,00 %
Palmitato de etila	45,78 %	Etilbenzeno	0,87 %
Estearato de etila	9,75 %	Mesitileno	1,61 %
Heneicosano	5,65 %	8,10-Dioxaheptadecano	2,47 %
Docosano	11,32 %	Palmitato de etila	7,34 %
		Nonadecano	4,51 %
		Heneicosano	7,96 %
Fração 16		Fração 22	
Metilpirrolidona	47,09 %	3-Hexanona	4,63 %
Hexahidrofarnesil Acetona	1,65 %	2-Hexanona	6,35 %
Isofitol	8,77 %	3-Hexanol	7,37 %
13-Hexiloxaciclotridec-10-em-2-ona	10,60 %	2-Hexanol	10,66 %
Fitol	23,57 %	EtilbutilHidroperóxido	2,47 %
		MetilpentilHidroperóxido	7,34 %
		Eicosano	8,63 %
		Heneicosano	24,24 %

Tabela – 2: Comparação entre compostos encontrados na literatura e suas concentrações

Cavalcanti et al. (2012) Óleo de Semente		Santos et al. (2017) Óleo da Semente	
Ácido Linoleico	49,45 %	Ácido Linoleico	54,39 %
Ácido Palmítico	20,87 %	Ácido Oleico	20,13 %
Ácido Oleico	17,80 %	Ácido Palmítico	16,63 %
Ácido Esteárico	10,55 %	Ácido Esteárico	7,21 %
Ácido Linolênico	1,02 %	Ácido Linolênico	0,97 %
ÁcidoMirístico	0,31 %	ÁcidoMirístico	0,30 %

Atualmente é predominante na literatura estudos que avaliam a constituição do óleos retirados da semente da faveleira, bem como nas demais espécies produtoras de oleaginosas, pois há um grande interesse nutricional devido à presença comprovada de ácidos graxos insaturados benéficos à saúde (CAVALCANTI et al., 2012). Estudos realizados com enfoque parecido com o do presente trabalho se utilizam geralmente de materiais vegetais que possuam cera ou gordura abundantes, como é o caso da copaíba e buriti.

É natural a diferença de composição lipídica devido a este fator, porém é de significativa relevância essa avaliação de amostras oleosas retiradas de extrato hexânico da espécie, pois possibilita a identificação de substâncias e suas possíveis aplicações, embasando cientificamente o uso terapêutico e sua toxicidade descritos pelas população usuária na medicina popular.

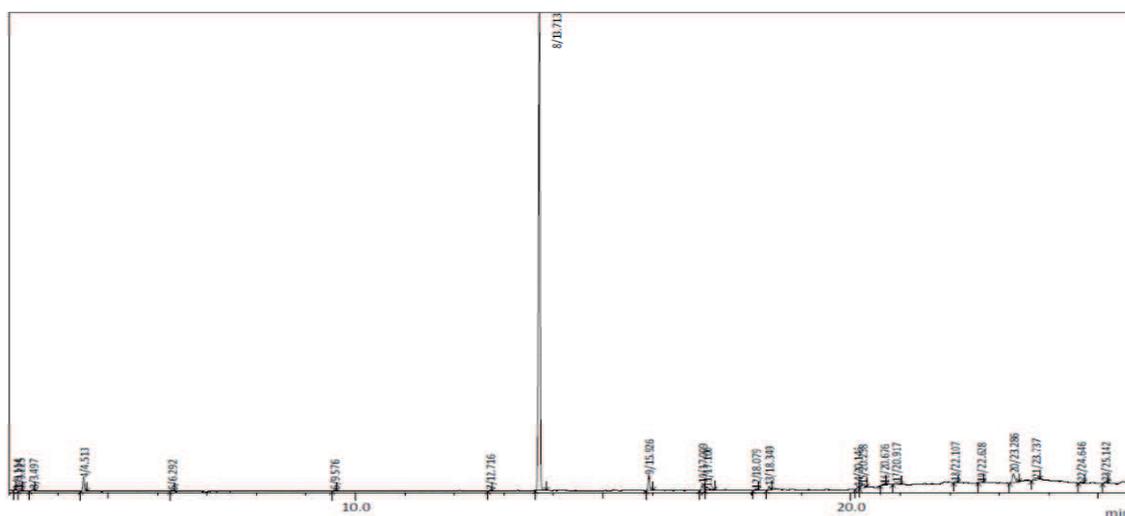
5.1.2. Cromatografia Gasosa (CG-EM) – Óleos acetilados

As frações acetiladas foram analisadas da mesma maneira que as não acetiladas e serão tratadas como Fração 03', 06', 16' e 22'.

5.1.2.1. Fração 03'

O cromatograma da Fração 03' (Figura 16) apresentou um total de 23 picos, sendo 6 referentes à substâncias não identificadas pelo banco de dados do aparelho. Isto ocorre geralmente quando a fragmentação da molécula em questão não condiz com nenhuma outra cadastrada no sistema. Há a possibilidade de se estudar quais são estas substâncias e inseri-las na biblioteca, porém necessitaria de um estudo mais avançado, com isolamento e identificação estrutural através de outros métodos espectroscópicos, como Ressonância Magnética Nuclear e Infravermelho.

Figura 16 – Cromatograma da Fração 03'



Quadro 5 – Dados cromatográficos da Fração 03'

Pico	Tempo de Retenção (minutos)	Concentração (%)	Constituinte Químico	Fórmula Molecular	Massa Molecular m/z [M] ⁺
1	3.114	0.09	3-Etil-3-metil-heptano	C ₁₀ H ₂₂	142
2	3.225	0.33	Gama terpineno	C ₁₀ H ₁₆	136
3	3.497	0.29	5-Isobutilnonano	C ₁₃ H ₂₈	184
4	4.513	2.09	Terpineol-4	C ₁₀ H ₁₈ O	154
5	6.292	0.14	Hexadecano	C ₁₆ H ₃₄	226
6	9.576	0.13	Eicosano	C ₂₀ H ₄₂	282
8	13.713	84.48	Miristato de isopropila	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	270
9	15.926	2.53	Palmitato de etila	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	284
10	17.009	1.62	13-Hexiloxaciclotridec-10-en-2-ona	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	280
12	18.079	0.16	Oleato de etila	C ₂₀ H ₃₈ O ₂	310
13	18.349	0.55	Estearato de etila	C ₂₀ H ₄₀ O ₂	312
20	23.286	3.20	Esqualeno	C ₃₀ H ₅₀	410
22	24.646	0.37	Docosanoato de etila	C ₂₄ H ₄₈ O ₂	368

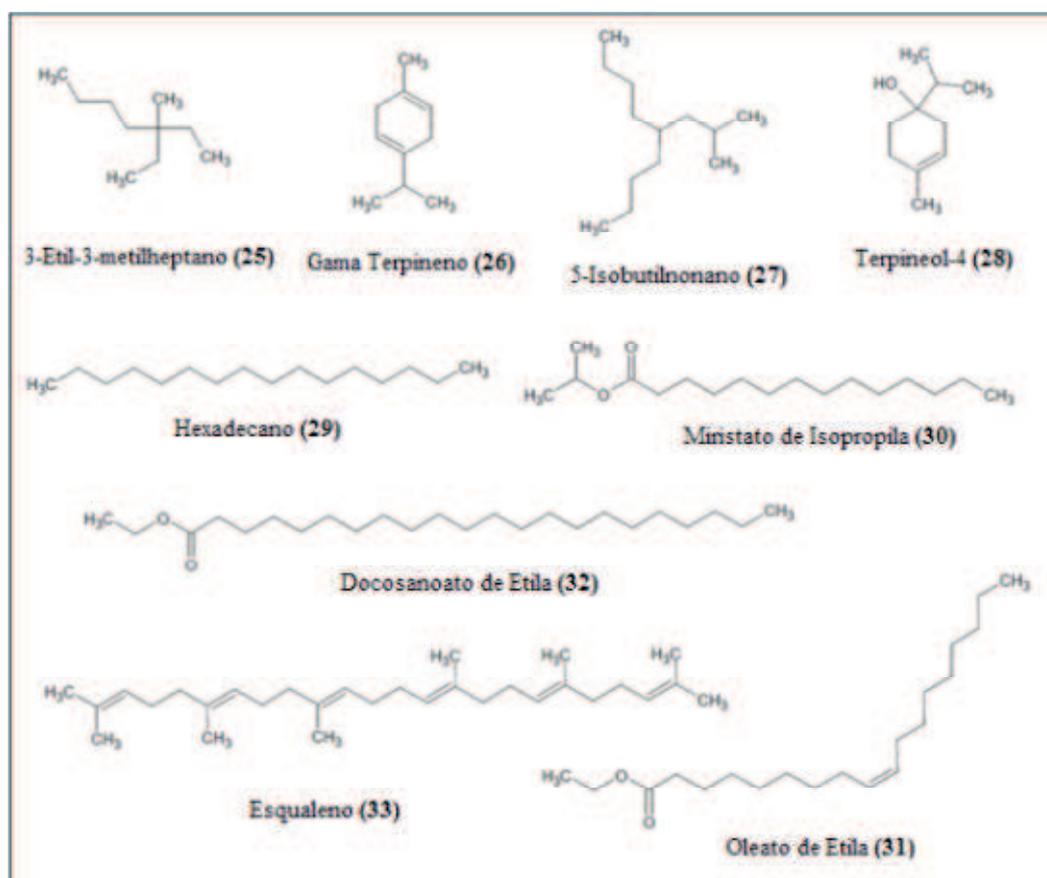
A Fração 03' apresentou maior quantidade de substâncias quando comparada com os cromatogramas das demais frações, contudo estas substâncias foram detectadas em baixas

concentrações, a maioria abaixo de 1% da composição do óleo, com excessão dos três compostos majoritários. O miristato de isopropila(30) foi o composto mais abundante da Fração 03' com 84,48% de prevalência. Este, por sua vez, é um éster oriundo do ácido mirístico, ácido graxo muito encontrado em óleos fixos extraídos de plantas (SANTOS; MELO, 2000).

O miristato de isopropila(30) é muito utilizado na indústria farmacêutica e cosmeceutica como excipiente em formulações emulsinonadas e oleosas, atuando como agente emoliente, dispersante e diluente para óleos. É também empregado como promotor químico de permeação de fármacos em formulações transdérmicas, facilitando a solubilidade de determinados princípios ativos, como os antiinflamatórios não esteroidais por exemplo (SILVA et al., 2010).

Houve a presença de compostos identificados nas frações não acetiladas descritas anteriormente neste estudo, como eicosano(24), palmitato de etila(3), estearato de etila(4) e 13-Hexiloxaciclotridec-10-en-2-ona(14). Os compostos voláteis Gama terpineno(26) e terpineol-4 (28) são monoterpenos muito comuns em óleos essenciais, inclusive de espécies da família Euphorbiaceae como *Crotonrhamnifolius*(SILVA, 2008), sendo identificados pela primeira vez no gênero *Cnidocolus*.

Figura 17 – Compostos identificados na Fração3'



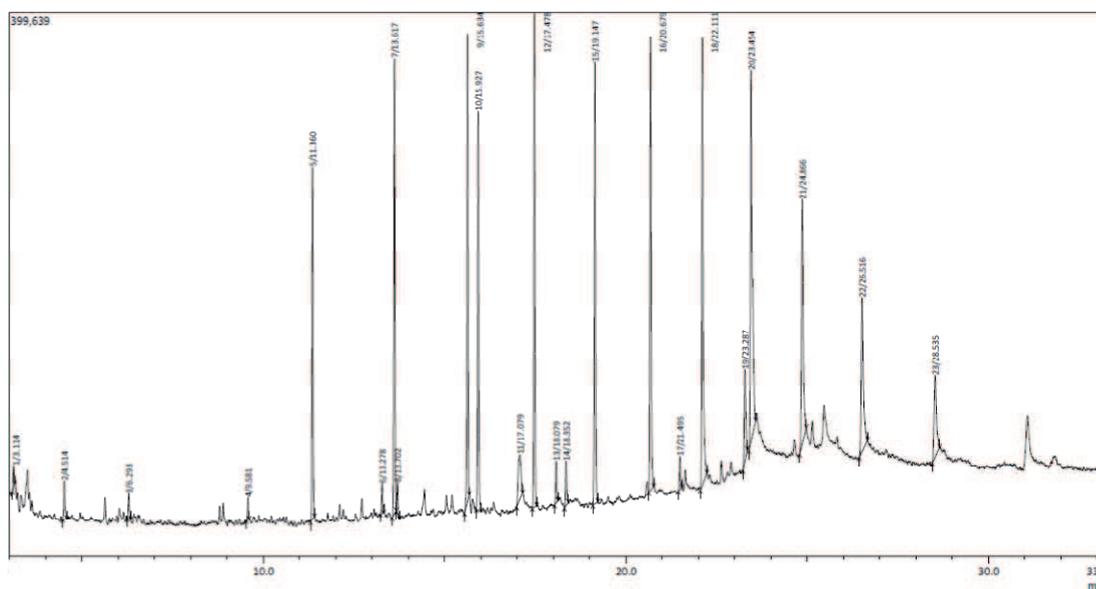
Os ésteres graxos palmitato de etila(**3**) e estearato de etila(**4**) aparecem no cromatograma da Fração 03' em baixas concentrações, diferentemente da Fração não acetilada 03, na qual estes compostos se apresentam em concentrações elevadas, sendo o palmitato de etila majoritário nesta fração (45,78%). O oleato de etila(**31**) e docosanoato de etila(**32**) não apareceram na Fração não acetilada 03.

A presença do esqualeno(**33**) confere grande importância à esta fração, pois trata-se do precursor da síntese de triterpenos e esteroides, incluindo colesterol, onde, em plantas e animais sofre ciclização e associado a outros precursores pode originar 200 diferentes tipos de esqueletos triterpênicos. Apresenta diversas atividades biológicas comprovadas, em especial a atividade antioxidante e adjuvante no tratamento do câncer como potencializador da quimioterapia(GUNES, 2013; MOREIRA et al., 2010).

Além disso, o esqualeno(**33**) é utilizado em formulações farmacêuticas como excipiente por apresentar biocompatibilidade e estabilidade, auxiliando no processo de absorção de fármacos principalmente de via oral (MARQUES, 2010). Foi identificado na família Euphorbiaceae no extrato hexânico da espécie *Crotonmusicarpa* (BARRETO et al., 2013).

5.1.2.2. Fração 06'

Figura 18 – Cromatograma da Fração 06'



O cromatograma da Fração 06' (Figura 18) apresentou 23 picos, onde apenas metade destes foram referentes a compostos identificados. Os compostos presentes na Fração 06' foram os mesmos que ocorreram na Fração 03', com exceção do isobutilnoanano(**17**), docosanoato de etila(**32**) e esqualeno(**33**), que não apareceram no cromatograma desta fração. O Quadro 6 apresenta os constituintes da Fração '06.

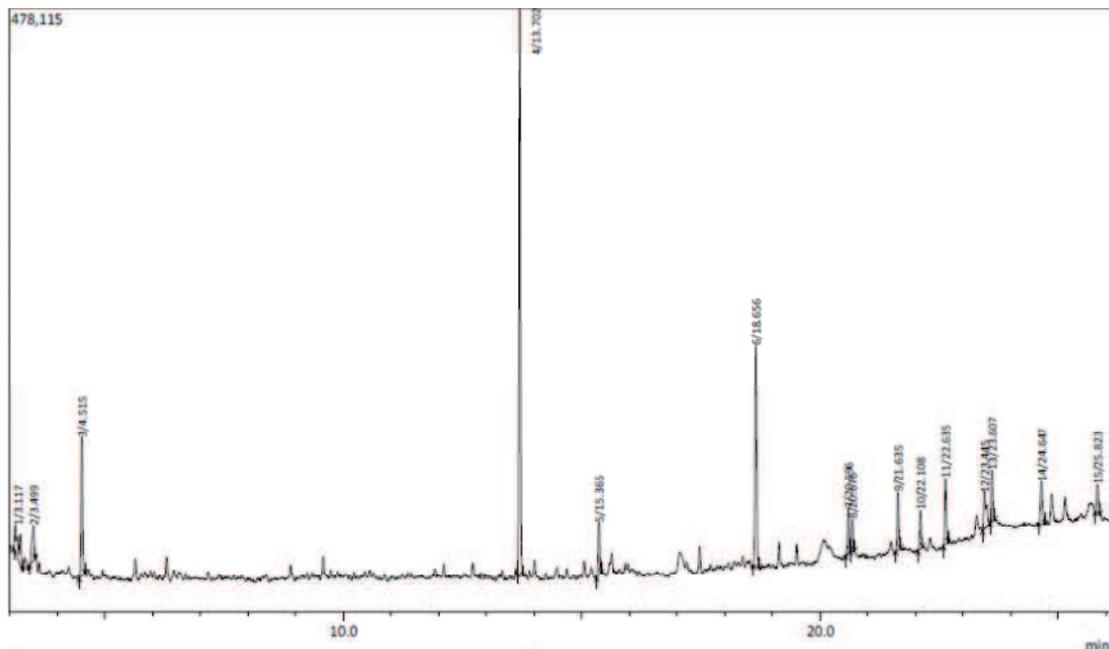
Quadro 6 – Dados cromatográficos da Fração 06'

Pico	Tempo de Retenção (minutos)	Concentração (%)	Constituinte Químico	Fórmula Molecular	Massa Molecular m/z $[M]^+$
1	3.114	0.35	3-Etil-3-metil-heptano	$C_{10}H_{22}$	142
2	4.514	0.77	Terpinenol - 4	$C_{12}H_{26}$	170
3	6.293	0.46	Hexadecano	$C_{16}H_{34}$	226
4	9.581	0.35	Eicosano	$C_{20}H_{42}$	282
6	13.278	0.54	Miristato de etila	$C_{16}H_{31}O_2$	256
8	13.702	0.54	Miristato de isopropila	$C_{17}H_{34}O_2$	270
10	15.927	7.50	Palmitato de etila	$C_{18}H_{36}O_2$	284
11	17.079	2.04	13-Hexiloxaciclotridec-10-en-2-ona	$C_{18}H_{32}O_2$	280
13	18.079	0.79	Oleato de etila	$C_{20}H_{38}O_2$	310
14	18.352	0.93	Estearato de etila	$C_{20}H_{40}O_2$	312

5.1.2.3. Fração 16'

O cromatograma da Fração 16' (Figura 19) apresentou 15 picos, sendo 3 referentes a artefatos e 10 referentes a substâncias identificadas e 2 picos não identificados pela biblioteca do aparelho.

Figura 19 –Cromatograma da Fração 16'



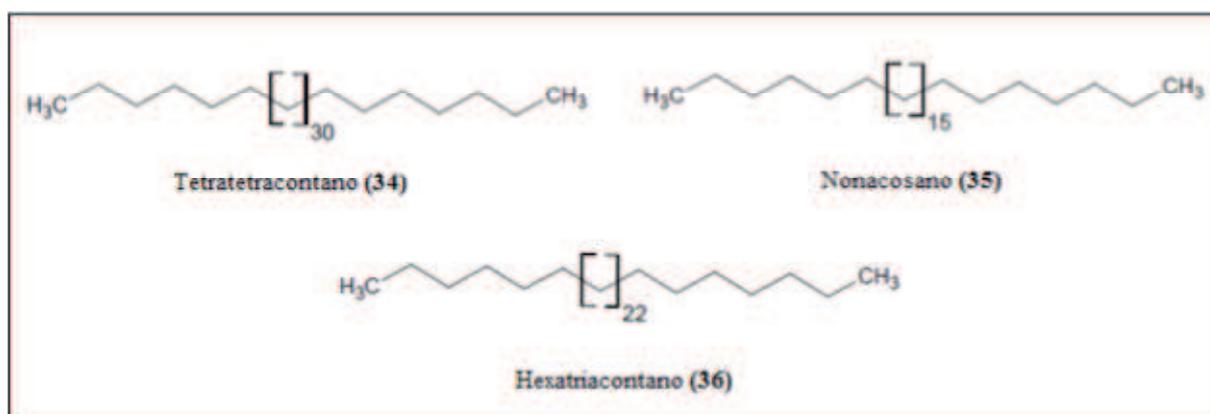
O constituinte majoritário foi o miristato de isopropila(30) assim como na Fração 06'. Em seguida o fitol(16), o eicosano(24) e o terpineol-4 (28) são os compostos que aparecem em maior concentração na Fração 16'. Dos dez constituintes químicos observados na Fração 16', sete já foram identificados em frações anteriores descritas neste estudo. O quadro 7

mostra os dados cromatográficos da Fração 16', bem como suas massas registradas no aparelho.

Quadro 7 – Dados cromatográficos da Fração 16'

Pico	Tempo de Retenção (minutos)	Concentração (%)	Constituinte Químico	Fórmula Molecular	Massa Molecular m/z $[M]^+$
1	3.117	4.41	3-Etil-3-metil-heptano	$C_{10}H_{22}$	142
2	3.499	3.13	5-Isobutilnonano	$C_{13}H_{28}$	184
3	4.515	8.68	Terpinenol-4	$C_{10}H_{18}O$	154
4	13.702	40.50	Miristato de isopropila	$C_{17}H_{34}O_2$	270
5	15.365	3.16	Isofitol	$C_{20}H_{40}O$	296
6	18.656	13.35	Fitol	$C_{20}H_{40}O$	296
7	20.596	9,46	Eicosano	$C_{20}H_{42}$	282
11	22.635	3.95	Tetratetracontano	$C_{44}H_{90}$	618
14	24.647	3.28	Nonacosano	$C_{29}H_{60}$	408
15	25.823	2.15	Hexatriacontano	$C_{36}H_{74}$	506

Figura 20 – Compostos identificados na Fração 16'



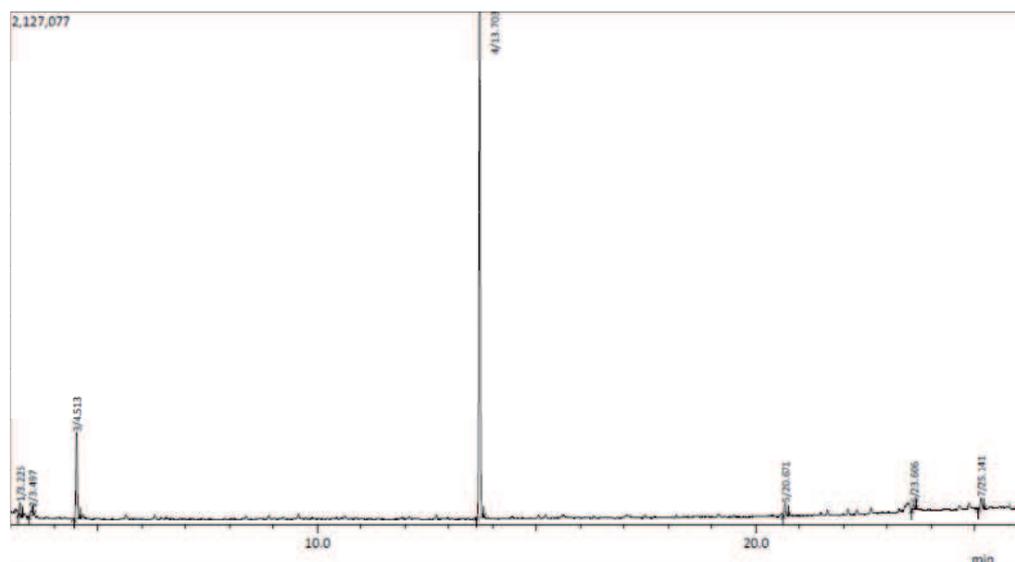
Além dos compostos identificados em frações anteriores, houve o aparecimento dos alcanos acíclicos saturados de cadeia longa tetratetracontano(34),nonacosano(35) e hexatriacontano(36)mostrados na Figura 20, que são comuns em óleos fixos e extratos hexânicos de várias plantas como *Solanummelongena*, *Bauhiniamicrostachya* e *Fluggealeucopyrus*. Sendo esta última uma Euphorbiaceae que apresentou também em sua composição palmitato de etila(3) e fitol(16), amos encontrados neste estudo também (VANITHA et al., 2016; BIANCO, SANTOS, 2003; SUDHA, CHIDAMBARAMPILLAI, MOHAN, 2013).

5.1.2.4. Fração 22'

A Fração 22' apresentou um cromatograma com apenas sete picos, sendo um não identificado no banco de dados. O composto que apareceu em maior concentração foi o miristato de isopropila(30), assim como nas Frações 06' e 16'. Com exceção do 3,7-dimetil-

decano (**38**), todos os outros componentes desta fração foram identificados em frações descritas anteriormente.

Figura 21 – Cromatograma da Fração 22'

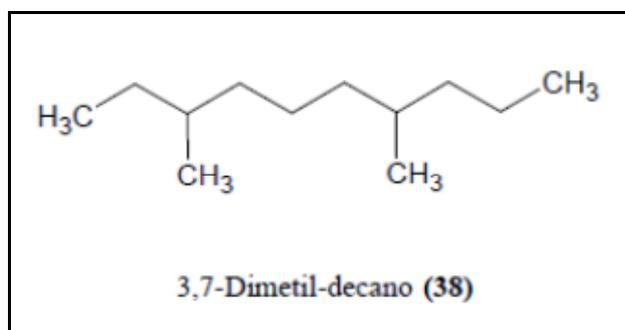


Os compostos presentes na Fração 22' e seus dados cromatográficos estão expressos no Quadro 8.

Quadro 8 – Dados cromatográficos da Fração 22'

Pico	Tempo de Retenção (minutos)	Concentração (%)	Constituinte Químico	Fórmula Molecular	Massa Molecular m/z [M] ⁺
1	3.225	1.44	γ - Terpineno	C ₁₀ H ₁₆	136
2	3.497	1.41	3,7-Dimetil-decano	C ₁₂ H ₂₆	170
3	4.513	11.55	Terpinenol-4	C ₁₀ H ₁₈ O	154
4	13.703	81.34	Miristato de isopropila	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	270
6	23.606	0.75	Eicosano	C ₂₀ H ₄₂	282
7	25.141	1.80	Esqualeno	C ₃₀ H ₅₀	410

Figura 22 – Composto identificado da Fração 22'



O hidrocarboneto decano comumente identificado em extratos apolares, aparecendo na literatura em sua forma original (C₁₀H₂₂) quanto na forma ramificada possuindo diversos isômeros. Espécies do gênero *Pilocarpus* (Rutaceae) e *Equisetum giganteum*, apresentaram isômeros do dimetil decano na composição de suas ceras (MICHELIN et al., 2005; SKORUPAA et al., 1998).

Todos as frações em que foi observada a presença de artefatos foram devidamente filtradas e purificadas. Os espectros de massas dos compostos citados nas Tabelas 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 e 8 estão apresentados no ANEXO A.

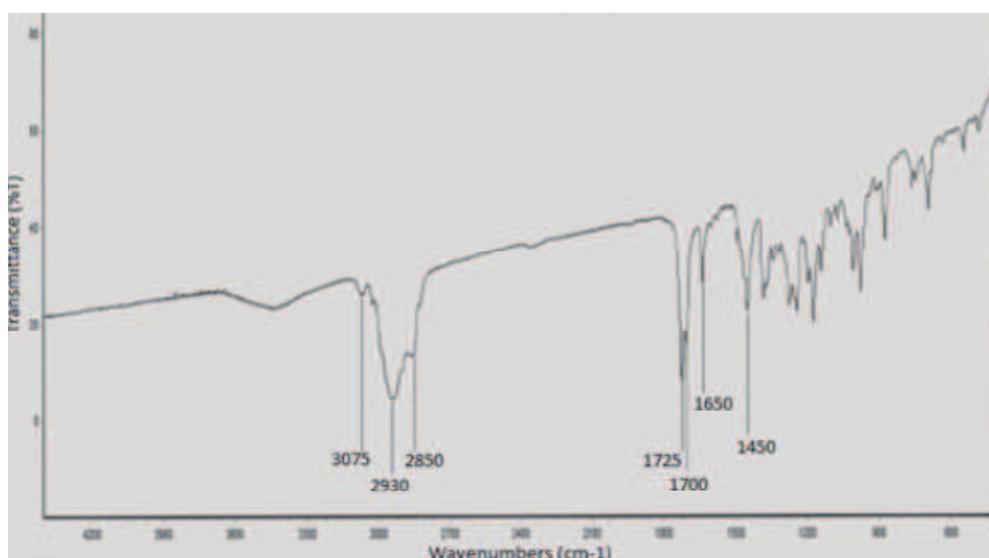
5.2. Identificação Estrutural de Compostos Isolados

5.2.1. Infravermelho (IV)

Os sólidos cristalinos (Cq1) retirados da (C-1.1) foram analisados inicialmente por espectroscopia na região do infravermelho.

O espectro de IV da amostra (Figura 23) apresentou uma fraca banda de absorção em torno de 3075 cm^{-1} , sugestiva de estiramento C-H de carbono sp^2 . As absorções observadas entre 3000 e 2850 cm^{-1} , podem ser atribuídas a estiramentos C-H de carbonos metílicos, metilênicos e metínicos. Observa-se também uma banda de absorção por volta de 1725 cm^{-1} e outra em 1700 cm^{-1} , característica de carbonila (C=O), de ácido carboxílico ou éster. Em torno de 1650 cm^{-1} observa-se uma banda de absorção sugestiva de estiramento C=C de alceno, além de uma banda em 1450 cm^{-1} , que sugere o mesmo tipo de estiramento, porém para anel aromático (PAVIA, 2012).

Figura 23 – Espetro de Infravermelho de Cq-1



5.2.2. Ressonância Magnética Nuclear (RMN)

A análise dos espectros de Ressonância Magnética Nuclear de Cq1 conduziu à proposta de uma mistura de dois componentes, Cq-1a e Cq-1b, através de comparação com dados registrados na literatura (PAULA et al., 2016).

O espectro de RMN de ^1H (δ , CDCl_3 , 500MHz), exibiu um grande número de sinais (Figura 24) na região entre δ_{H} 1,7-0,7, sendo nessa observados singletos em δ_{H} 0,81 (s, 3H); 0,87 (s, 12H); 0,96 (s, 3H) e 1,05 (s, 3H), que são sugestivos de hidrogênios de metila ligados

a átomos de carbono saturados e não hidrogenados, como também se observou a presença de três singletos largos, um em δ_H 1,71 (s, 3H) sugestivo de carbono metílico e outros dois em δ_H 4,59 e δ 4,71, para prótons etilênicos em uma ligação dupla 1,1-dissubstituída (LEMOS et al., 1991). A presença desses sinais sugere a presença de um esqueleto triterpenoide. Juntamente a estes deslocamentos, observa-se dois duplos dubletos, em δ_H 4,45 (dd, $J = 10,6, 5,8$ Hz, 1H) e δ_H 4,60 (dd, $J = 10,5, 5,2$ Hz, 1H), sugestivos de prótons carbinólicos.

A presença de sinais entre δ_H 7,21 (m, 7,28 – 7,18, 5H), δ_H 7,35 (m, 7,37-7,34, 3H) e δ_H 7,50 (m, 7,51 – 7,49, 2H) sugere a presença de prótons aromáticos. Observa-se também dois tripletos em δ_H 2,60 (t, $J = 7,9$ Hz, 2H) e em δ_H 2,93 (t, $J = 7,6$ Hz, 2H), sugestivos para os hidrogênios em carbonos alifáticos do grupo cinamoil, além dos sinais em δ_H 6,42 ($J = 16,0$ Hz, 1H) e outro em δ_H 7,64 ($J = 16,0$ Hz, 1H), característicos de hidrogênios olefinicos do tipo *trans*, mostrando que um dos compostos tem uma dupla ligação na cadeia lateral do cinamoil.

O espectro de RMN de ^{13}C , utilizando a técnica APT, (δ , $CDCl_3$, 50MHz) (Figura 28), apresentou uma grande quantidade de sinais, o que permitiu enfatizar a presença de dois esqueletostriterpenoides (Tabela 3) sendo esses deslocamentos químicos característicos dos compostos 3β -*O*-cinamoil-lupeol e 3β -*O*-dihidrocinamoil-lupeol, os quais se encontram em mistura, anteriormente descritos por Paula et al. (2016), contudo isolados pela primeira vez na espécie *Cnidoscolusquercifolius*.

Figura 24 – Estruturas químicas de Cq-1a e Cq-1b

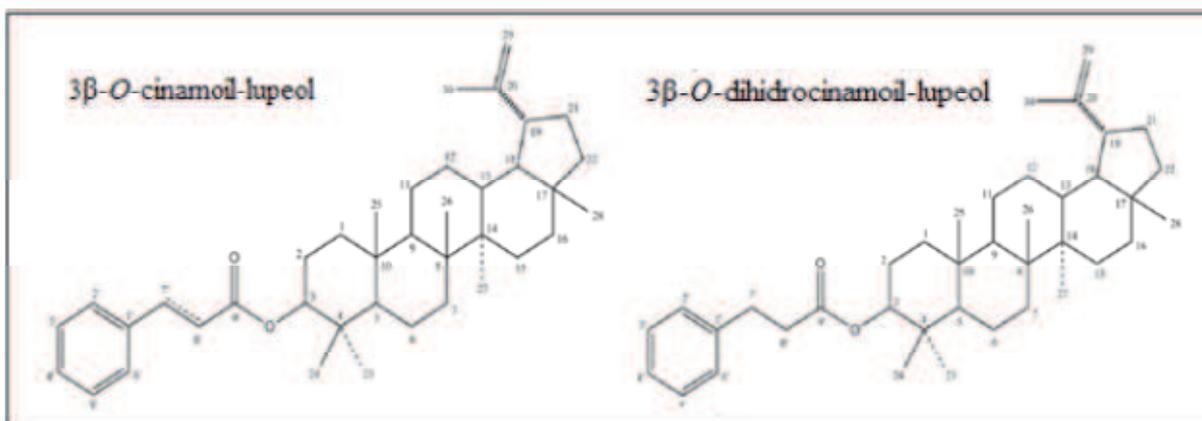


Tabela 3 - Dados de RMN de ^1H e ^{13}C (δ , CDCl_3 , 500 e 125 MHz) da substância Cq-1a e Cq-1b, comparados com dados da literatura (δ , CDCl_3 , 200 e 50 MHz) de (LEMOS, et al. 1991).

	3β-O-cinamoil-lupeol			3β-O-dihidrocinoil-lupeol		
	Cq-1 ^a		Literatura	Cq-1b		Literatura
C	δ_{C}	δ_{H}	δ_{C}	δ_{C}	δ_{H}	δ_{C}
4	37,79	-	37,9	37,79	-	37,9
8	40,81	-	40,9	40,81	-	40,9
10	37,04	-	37,1	37,04	-	37,1
14	42,80	-	42,3	42,80	-	42,3
17	42,98	-	43,0	42,98	-	43,0
20	150,96	-	150,9	150,96	-	150,9
1'	134,52	-	134,6	140,55	-	140,6
9'	166,83	-	166,8	172,71	-	171,7
CH						
3	80,93	4,60 (dd, $J=10,5$ $J=5,2$ Hz)	81,0	80,93	4,45 (dd, $J=10,6$, $5,8$ Hz)	81,0
5	55,34	-	55,4	55,39	-	55,5
9	50,29	-	50,4	50,29	-	50,4
13	38,00	-	38,1	38,00	-	38,1
18	48,25	-	48,3	48,25	-	48,3
19	47,99	1,90 (m)	48,0	47,99	1,90 (m)	48,0
2'	128,24	7,50 (m, 7,51 – 7,49)	128,3	128,01	7,21 (m, 7,28 – 7,18)	128,0
3'	128,42	7,35 (m, 7,37 – 7,34)	128,5	128,82	-	128,9
4'	130,09	-	130,1	126,16	-	126,2
5'	128,42	7,35 (m, 7,37 – 7,34)	128,5	128,82	-	128,9
6'	128,24	7,50 (m, 7,51 – 7,49)	128,3	128,01	7,21 (m, 7,28 – 7,18)	128,0
7'	144,22	7,64 (d, $J=16,0$ Hz)	144,3	CH₂ – 31,08	2,93 (t, $J=7,6$ Hz)	31,1
8'	118,79	6,42 (d, $J=16,0$ Hz)	118,9	CH₂ – 36,23	2,60 (t, $J=7,9$ Hz)	36,2
CH₂						
1	38,33	-	38,4	38,38	-	38,4
2	23,67	-	23,7	23,81	-	23,9
6	18,17	-	18,2	18,17	-	18,2
7	34,17	-	34,3	34,17	-	34,3
11	20,97	-	20,9	20,97	-	20,9
12	25,06	-	25,1	25,06	-	25,1
15	27,41	-	27,5	27,41	-	27,5
16	35,55	-	35,6	35,55	-	37,6
21	29,81	-	29,9	29,81	-	29,9
22	39,98	-	40,0	39,98	-	40,0
29	109,34	29 a - 4,71 (sl) 29 b - 4,59 (sl)	109,4	109,34	29 a - 4,67 (sl) 29 b - 4,55 (sl)	109,4
CH₃						
23	27,87	-	27,9	28,00	-	28,1
24	16,52	-	16,5	16,67	-	16,7

25	16,15	-	16,2	16,19	-	16,2
26	15,95	-	16,0	15,95	-	16,0
27	14,50	-	14,5	14,50	-	14,5
28	17,99	-	18,0	17,99	-	18,0
30	19,27	-	19,3	19,27	-	19,3

Conclusão da Tabela 3

Figura 25 – Espectro de RMN de ¹H (CDCl₃, 500 MHz) de Cq-1

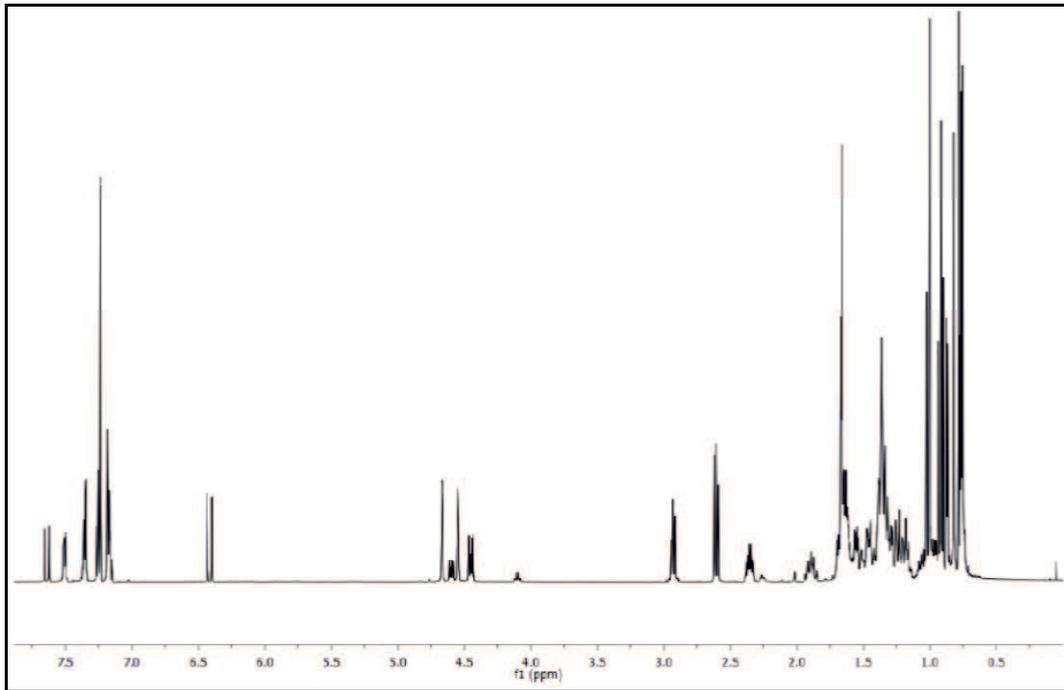


Figura 26 – Expansão do Espectro de RMN de ¹H (CDCl₃, 500 MHz) de Cq-1

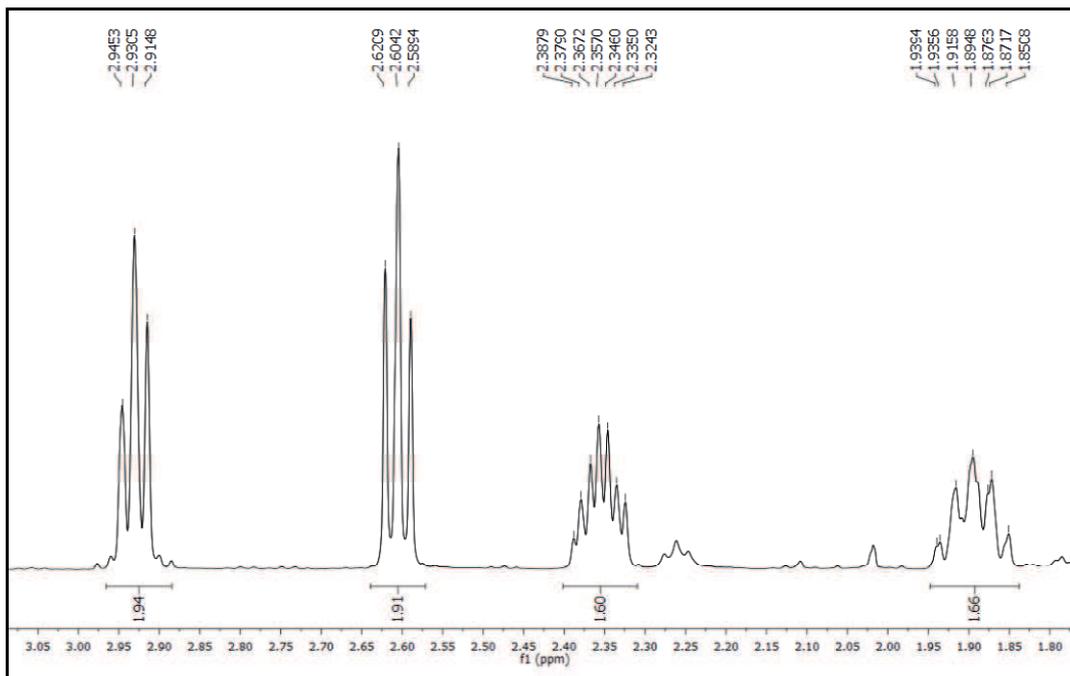


Figura 27 – Expansão do Espectro de RMN de ^1H (CDCl_3 , 500 MHz) de Cq-1

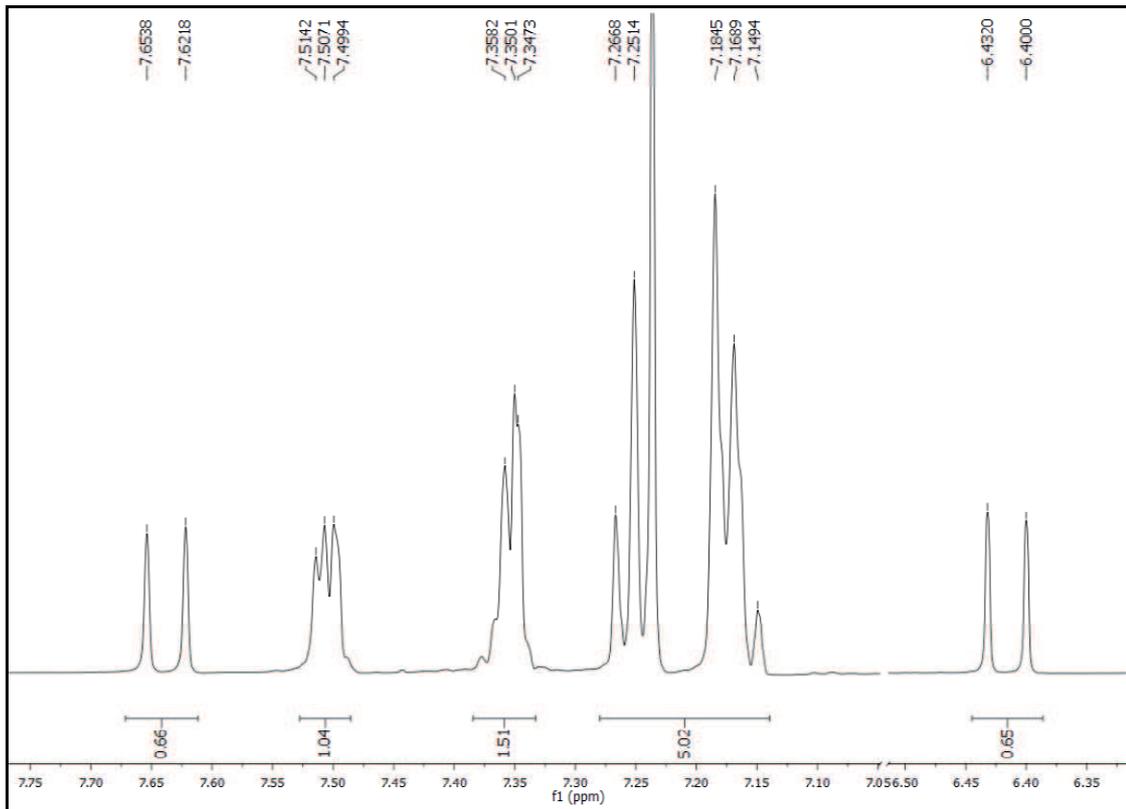
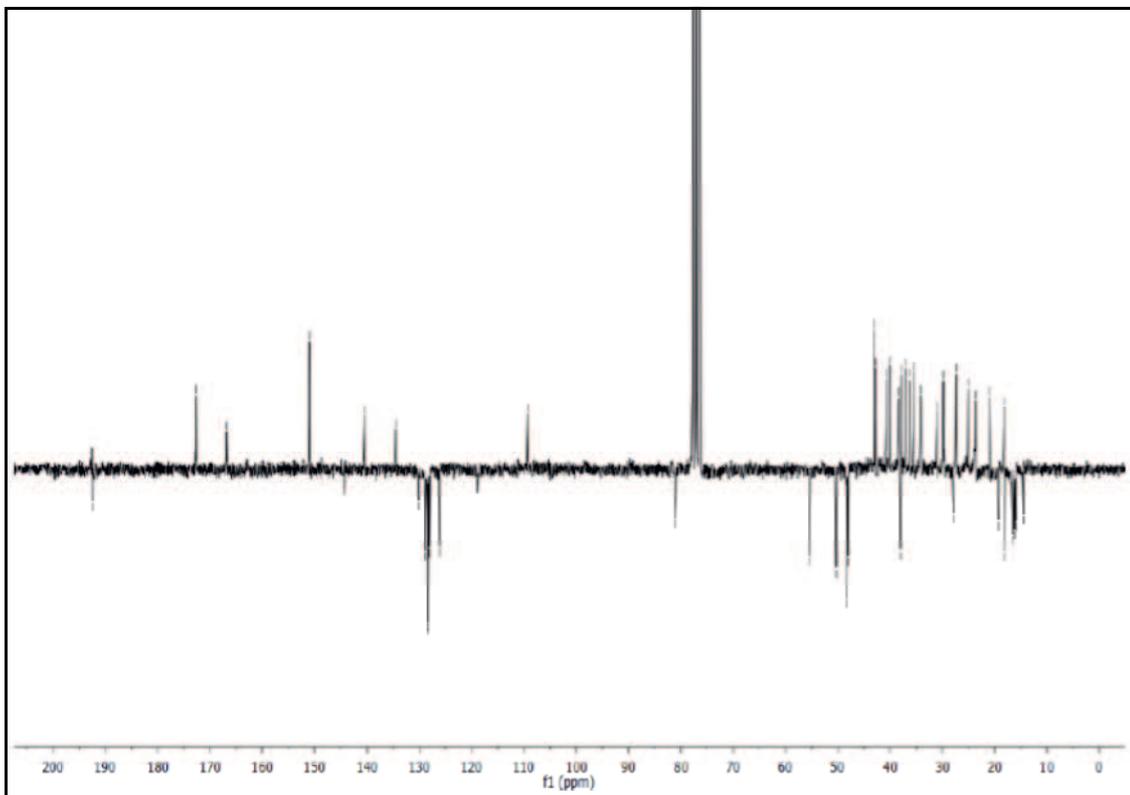


Figura 28 – Espectro de RMN de ^{13}C (CDCl_3 , 500 MHz) de Cq-1



6. CONCLUSÃO

O presente trabalho apresentou resultados importantes para a espécie *Cnidocolusquercifolius* contribuindo para sua quimiotaxonomia. O perfil fitoquímico das frações oleosas retiradas da fase hexânica apresentou uma gama de substâncias, em sua maioria inéditas na faveleira e no gênero *Cnidocolus*.

A acetilação destas frações permitiu observar compostos diferentes e com potencialidades farmacológicas interessantes, como os monoterpenoides terpineol-4 e gama terpineno e do triterpeno acíclico esqualeno, os quais possuem atividades antioxidante comprovada, além de outras propriedades citadas na etnofarmacologia, porém sem comprovação científica.

A análise da fração que resultou na identificação da mistura dos compostos 3β -*O*-cinamoil-lupeol e 3β -*O*-dihidrocinoil-lupeol também foi satisfatória, pois estes são descritos pela primeira vez na faveleira.

Devido às características destes metabólitos secundários e sua atividade biológica proposta na literatura, há a necessidade de realizar ensaios biológicos de toxicidade e ação farmacológica, objetivando a continuidade deste estudo.

CHEMICAL PROFILE ANALYSIS OF FIXED OILS AND ISOLATED COMPOUNDS OF
Cnidoscolusquercifolius POHL (EUPHORBIACEAE)

Geovana Ferreira Guedes Silvestre¹

ABSTRACT

The caatinga is a rich region in biodiversity and presents a multitude of species in its flora. *Cnidoscolusquercifolius* Pohl popularly known as "faveleira" is an Euphorbiaceae used in folk medicine for the treatment of infectious diseases and injuries. The objective of this work was to carry out a phytochemical study of the hexane phase (FH) of the faveleira leaves. The hexane phase (20 g) was subjected to chromatography column with silica gel and organic solvents in polarity gradient affording 67 fractions. Fractions 03, 06, 16 and 22 presented a fixed oil aspect and were chosen for analysis in Gas Chromatograph coupled to Mass Spectrometer (GC-MS). These fractions were acetylated with acetic anhydride and pyridine and also analyzed in GC-MS. The FH fractions 7 and 8 were rechromatographed in silica column and subfractions 1-6 were pooled according to the retention factor and analyzed by Infrared spectroscopy and ¹H and ¹³C Nuclear Magnetic Resonance. In the analysis of in natura fixed oils and acetylated, it was possible to identify and quantify 38 substances, among them monoterpenes, fatty esters and aliphatic hydrocarbons. From subfractions 1-6 it was possible to identify a mixture of 3β-O-cinnamoyllupeoltriterpenes and 3β-O-dihydrocinnamoyllupeoltriterpenes. The present study culminated in the identification and description of important chemical constituents present in the fixed oils of *C. quercifolius*, among them, compounds with proven biological activity such as terpineol-4 and γ-terpinene and squalene. The mixture of triterpenes identified by spectra are also mentioned in the literature as having antioxidant, cytotoxic and anti-inflammatory properties, among others, being promising to provide scientific subsidies to the popular use and to add taxonomic value to the studied species.

Key Words: *Cnidoscolusquercifolius*; Fixed oil; Triterpenes.

¹ Pharmacy academic at State University of Paraíba – Campus I.
Email: geovana_guedes@hotmail.com

REFERÊNCIAS

- BARRETO, M. B.; GOMES, C. E.; FREITAS, J. V. B.; PINTO, F. C. L.; SILVEIRA, E. R.; GRAMOSA, N. V. Flavonoides e Triterpenoides de *Crotonmusicarpa* (Euphorbiaceae). **Química Nova**, v. 36, n. 5, p. 675-679, 2013.
- BIANCO, E. M.; SANTOS, C. A. M. Substâncias isoladas das folhas de *Bauhinia microstachya*(Raddi) Macbr. (Caesalpiniaceae). **Revista Brasileira de Farmacognosia**, v. 13, n. 2, p.93-99, 2003.
- BITENCOURT, C. C.; PEREIRA, E. B. Síntese de ésteres formadores de aromas empregando lipases imobilizadas em quitosana por adsorção física. **Revista de Iniciação Científica**, v. 4, p. 235-245. 2009.
- BRANDÃO, M. G. L. Plantas Medicinais e Fitoterápicos: Aspectos Gerais e Métodos de Validação. Belo Horizonte: **O Lutador**. 44p. 2009.
- BRASIL, Ministério do Meio Ambiente. Biomas Brasileiros. Disponível em: <<http://www.mma.gov.br/biomas/caatinga>>. Acessado em 06 de out. 2017, 17:15h.
- BRASIL, Ministério da Saúde, Secretaria de Ciência, Tecnologia e Insumos Estratégicos, Departamento de Assistência Farmacêutica. Política e Programa Nacional de Plantas Medicinais e Fitoterápicos – Brasília: Ministério da Saúde, 2016. 190 p.
- CAVALCANTI, M. T.; BORA, P. S.; CARVAJAL, J. C. L.; FLORENTINO, E. R.; SILVA, F. L. H. Análise térmica e perfil de ácidos graxos do óleo das amêndoas de faveleira (*Cnidoscylusphyllacanthus*Pax. & K. Hoffm) com e sem espinho. **Revista Verde de Agroecologia e Desenvolvimento Sustentável**. v. 7, n. 4, p. 154-162. 2012.
- CORDEIRO, M. W. S.; CAVALLIERI, A. L. F.; FERRI, P. H.; NAVES, M. M. V. Características físicas, composição químico-nutricional e dos óleos essenciais da polpa de *Caryocar brasiliense* nativo do estado de Mato Grosso. **Revista Brasileira de Fruticultura**.v. 35, n. 4, p. 1127-1139. 2013.
- DEWICK, P. M. **Medicinal natural products: a biosynthetic approach**. 2a ed. John Wiley & Sons Ltd, p. 212 e 168, 2002.
- DIRAR, A. I.; MOHAMED, M. A.; AHMED, W. J.; MOHAMMED, M. S.; KHALID, H. S.; GARELDABI, E. A. E. Isolation and Characterization of Potential Cytotoxic Leads from *Ambrosia maritima*L. (Asteraceae). **JournalofPharmacognosyandPhytochemistry**, v. 3, n. 4, p. 38-41, 2014.
- FAVACHO, H. A. S. **Caracterização fitoquímica e avaliação da atividade anti-inflamatória e antinociceptiva do óleo fixo de Euterpe Oleracea**Mart. 2009. 79f. Dissertação (Mestrado em Ciências Farmacêuticas) - Universidade Federal do Pará, Belem, 2009.
- FENSTERSEIFER, M. L. A. **Determinação de benzeno, tolueno, etilbenzeno e xilenos em águas subterrâneas coletadas próximas a postos de combustível**. 2010. 52f. Trabalho de

Conclusão de Curso (Bacharelado em Química Industrial) – Centro Universitário UNIVATES, Lajeado, 2010.

FERREIRA, E. A.; DEMUNER, A. J.; SILVA, A. A.; SANTOS, J. B.; VENTRELLA, M. C.; MARQUES, A. E.; PROCÓPIO, S. O. Composição química da cera epicuticular e caracterização da superfície foliar em genótipos de cana-de-açúcar. **Planta Daninha**, v. 23, n. 4, p. 611-619. 2005.

FURLAN, M.; BALDOQUI, D. C.; KATO, M. J. **Biossíntese de Produtos Naturais: Atualidades e perspectivas no desenvolvimento de novos fármacos** in Química dos Produtos Naturais, Novos Fármacos e a Moderna Farmacognosia: Editora Univale, p. 83 - 102, 2009.

GESTIS, Substance Database. 1,3,5-Trimethylbenzene. Disponível em: <[http://gestisen.itrust.de/nxt/gateway.dll/gestis_en/031080.xml?f=templates\\$fn=default-doc.htm\\$3.0](http://gestisen.itrust.de/nxt/gateway.dll/gestis_en/031080.xml?f=templates$fn=default-doc.htm$3.0)>. Acessado em 25 de novembro de 2017.

GOMES, L. M. A.; LIMA-SARAIVA, S. R. G.; ANDRADE, T. M. G.; SILVA, J. C.; DINIZ, T. C.; BARRETO, V. N. S.; MENDES, R. L.; QUINTANS-JÚNIOR, L. J.; QUINTANS, J. S. S.; LIMA, J. T.; ALMEIDA, J. R. G. S.

Antinociceptive activity of the ethanol extract from barks and leaves of *Cnidioscolus quercifolius* (Euphorbiaceae) in mice. **Journal of Young Pharmacists**, v - 6, n - 2, 2014.

GUNES, F. E. Medical Use of Squalene as a Natural Antioxidant. **Journal of Marmara University Institute of Health Sciences**, v. 3, n. 4, p. 220-228, 2013.

JANES, N.; HSU, J. W.; RUBIN, E.; TARASCHI, T. F. Nature of alcohol and anesthetic action on cooperative membrane equilibria. **Biochemistry**. v. 31, p. 9467-9472. 1992.

LEITE, A. C. R. M. **Efeitos Antiinflamatórios e Antinociceptivos do Fitol, um Ativador de NADPH Oxidase, e Tadalafil, um Inibidor de 5-Fosfodiesterase, em Modelos Experimentais**. 2010. 118f. Tese (Doutorado em Ciências Médicas) – Iniversidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2010.

LEMOS, T. L. G.; SILVEIRA, E. R.; OLIVEIRA, M. F. Terpenoids from *Cnidioscolus phyllacanthus* Pax e Hoff. **Jornal of Brazilian Chemical Society**, v. 2, n. 3, p. 105-110, 1991.

LIMA, J. L. **Estudo de caso de análise de custos das atividades da fase Fitoquímica do projeto de pesquisa e desenvolvimento de um medicamento à base de uma espécie vegetal**. 2015. 72f. Dissertação (Mestrado em Gestão, Pesquisa e Desenvolvimento na Indústria Farmacêutica) - Instituto de Tecnologia em Fármacos – FIOCRUZ, Rio de Janeiro, 2015.

LIOSLIOS, C.; LAOUER, H.; BOULAACHEB, N.; GORTZI, O.; CHINOUI, I. Chemical composition and antimicrobial activity of essential oil of Algerian *Phlomis bovei* De Noé supsp. *bovei*. **Molecules**, v. 12, p. 772-781, 2007.

MACHADO, M. M. **Perfil Fitoquímico e Avaliação dos Principais Efeitos Biológicos e Imunológicos in vitro de Euphorbiatirucalli L.** 2007. 105f. Dissertação (Mestrado em Ciências Farmacêuticas) – Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, 2007.

MARQUES, D. D. **Contribuição ao conhecimento químico da flora acreana: Protiumhebetatum Daly, Protiumheptaphyllum (Aublet) Marchand subsp. Ulei (swat) Daly e Protiumheptaphyllum (Aublet) Marchand subsp. heptaphyllum.** 56f. 2010. Tese (Doutorado em Química Orgânica) – Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2010.

MARTINS, M. R. F. M.; VEIGA, F. Promotores de Permeação para a Liberação Transdérmica de Fármacos: Uma Nova Aplicação Para as Ciclodextrinas. **Revista Brasileira de Ciências Farmacêuticas**, v. 38, n. 1, 2002.

MCCHESENEY, J. D.; VENNKATARAMAN, S. K.; HENRI, J. T. Plant Natural Products: Back to the Future or into extinction? **Phytochemistry**. v. 68, n. 14, p. 2015-2022. 2007.

MIYAMOTO, S. **Hidroperóxidos de lipídeos como fonte biológica com oxigênio singlete: estudos com marcação isotópica, espectrometria de massa e luminescência.** 199f. 2005. Tese (Doutorado em Bioquímica) – Universidade de São Paulo, São Paulo, 2005.

MICHELIN, E. M. Z.; BRESCIANI, L. F. V.; DANIELSKI, L.; YUNES, R. A.; FERREIRA, S. R. S. Composition profile of horsetail (*Equisetum giganteum* L.) oleoresin: comparing SFE and organic solvents extraction. **The Journal of Supercritical Fluids**, v. 33, n. 2, p. 131-138, 2005.

MOHAMED, M. A.; DIRAR, A. I.; ISMAIL, E. M. O.; KHALID, H. S.; ALFATIH, F.; KHALID, A. In SilicoMolecular Docking Of Di-(2-Ethylhexyl) Phthalate And 13-Hexyloxacyclotridec-10-En-2-One Identified In *Ambrosia Maritima*L. (Asteraceae). **World JournalofPharmaceuticalResearch**, v. 3, n. 10, p. 8-16. 2014.

MORAIS, N.R.L.; OLIVEIRA NETO, F.B.; MELO, A.R.; BERTINI, L.M.; SILVA, F.F.M.; ALVES, L.A. Prospecção fitoquímica e avaliação do potencial antioxidante de *Cnidioscolusphyllacanthus*(müll. Arg.) Pax&k.hoffm. Oriundo de apodi – RN. **Revista Brasileira de Plantas Mediciniais**, Campinas, v.18, n.1, p.180-185, 2016.

MOREIRA, D. L.; FONSECA, V. M.; BHERING, C. A.; VASCONCELOS, M. F.; CUNHA-JUNIOR, E. F.; CANTO-CAVALHEIRO, M. M.; TORRESSANTOS, E. C.; KAPLAN, M. A. C. Estudo Químico e da Atividade Leishmanicida de Frações de *Piper cabralanum* C.DC. (Piperaceae). **Revista Fitos**, v. 5, n. 1, p. 92-98, 2010.

NÓBREGA, S. B. P. **A faveleira (Cnidioscolusquercifolius) como fonte alternativa na alimentação humana e animal no Semi-Árido Paraibano.** 2001. 145 f. Dissertação (Mestrado em Desenvolvimento e Meio Ambiente) - Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2001.

OMOTOSO, A. E.; KENETH, E.; MKPARU, A. I. Chemometric profiling of methanolic leaf extract of *Cnidioscolusaconitifolius*(Euphorbiaceae) using UV-VIS, FTIR and GC-MS techniques. **Journalof Medicinal PlantResearch**, v. 2, n. 1, p. 6-12, 2014.

PAREDES, P. F. M.; VASCONCELOS, F. R.; PAIM, R. T. T.; MARQUES, M. M. M.; MORAIS, S. M.; LIRA, S. M.; BRAQUEHAIS, I. D.; VIEIRA, I. G. P.; MENDES, F. N. P.; GUEDES, M. I. F. Screening of Bioactivities and Toxicity of *Cnidoscolusquercifolius*Pohl. **Evidence-BasedComplementaryandAlternative Medicine**, v. 2016, 9 páginas. Disponível em <<http://dx.doi.org/10.1155/2016/7930563>>. Acessado em 10 de novembro de 2017.

PATIAS, I. S.; FAUSTO, V. P.; HOMRICK, S. S.; VAUCHER, R. A.; RECH, V. C.; GIONGO, J. L. Estabilidade e Atividade Antifúngica de Nanoemulsão Contendo Óleo de Gerânio Incorporada em Hidrogel. **DisciplinarumScientia. Série: Naturais e Tecnológicas**, v. 17, n. 2, p. 269-283, 2016.

PATOČKA, J. Biologicallyactivepentacyclitriterpenesandtheircurrent medicine Signification; **JournalofAppliedBiomedicine**, v. 1, p. 7-12, 2003.

PAULA, A. C.; MELO, K. M.; DA SILVA, A. M.; FERREIRA, D. A.; MONTE, F. J. Q.; SANTIAGO, G. M. P.; LEMOS, T. L. G.; BRAZ-FILHO, R.; MILITÃO, G. C. G.; SILVA, P. B. N.; SILVA, T. G. Constituintes Químicos e Atividade Citotóxica de *Cnidoscolusphyllacanthus*. **Revista Virtual de Química**, v. 8, n. 1, p. 231-241, 2016.

PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S.; VYVYAN, J. R. **IntroductiontoSpectroscopy**. 4. ed. Califórnia: Brooks/Cole, 2012.

PEIXOTO-SOBRINHO, T. J. S.; TAVARES, E. A.; CASTRO, V. T. N. A.; VERAS-FILHO, J.; MILITÃO, G. C. G.; SILVA, T. G.; AMORIM, E. L. C. Antiproliferativeactivityofspeciesofthe genus *Cnidoscolus*against HT-29, Hep-2 and NCI-H292 cells. **Molecular &ClinicalPharmacology**, v. 3, n. 2, p. 55-61, 2012.

PERUSSI, J. R. Inativação Fotodinâmica de Microorganismos. **Química Nova**, v. 30, n. 4, p. 988-994, 2007.

PEREIRA, R. J.; CARDOSO, M. G. Metabólitos secundários vegetais e benefícios antioxidantes vegetablesecondarymetabolitesandantioxidantsbenefits. **Journal of Biotechnology and Biodiversity**, v. 3, n. 4, p. 146-152, 2012

ROBBERS, J. E.; SPEEDIE, M. K.; TYLER, V. E. **Farmacognosia e Farmacobiotechnologia**. São Paulo: Editorial Premier, 372p., 1997.

SANTOS, K. A.; ARAGÃO-FILHO, O. P.; AGUIAR, C. M.; MILINSK, C. M.; SAMPAIO, S. C.; PALÚ, F.; SILVA, E. A. Chemical composition, antioxidant activity and thermal analysis of oil extracted from favela (*Cnidoscolusquercifolius*) seeds. **Industrial Crops and Products**, v. 97, p. 368-373, 2017.

SHORVON, S. Pyrrolidone Derivatives – New Drug Classes. **The Lancet**, v. 358, n. 9296, p. 1885-1892, 2001.

SILVA, A. C. O.; LIMA, R. A. Identificação das classes de metabólitos secundários no extrato etanólico dos frutos e folhas de *Eugenia uniflora*L. **Revista Eletrônica em Gestão, Educação e Tecnologia Ambiental**, v. 20, n. 1, p. 381–388. Jan. - abr. 2016.

SILVA, F. K. S. **Contribuição ao Estudo Fitoquímico de Crotonrhamnifolius (Euphorbiaceae)**. 2008. 131f. Dissertação (Mestrado em Química Orgânica) – Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2008.

SILVA, J. A.; APOLINÁRIO, A. C.; SOUZA, M. S. R.; DAMASCENO, B. P. G.; MEDEIROS, A. C. D. Administração cutânea de fármacos: desafios e estratégias para o desenvolvimento de formulações transdérmicas. **Revista de Ciências Farmacêuticas Básica e Aplicada**, v. 31, n. 3, 2010.

SIMÕES, C. M. O.; SCHENKEL, E. P.; GOSMAN, G.; MELLO, J. C. P.; MENTZ, L. A.; PETROVICK, P. R. **Farmacognosia: da Planta ao Medicamento**. Florianópolis: Editora da UFSC, 1102p, 2007.

SKORUPAA, L. A.; SALATINOVA, M. L. F.; SALATINOVA, A. HydrocarbonsofleafepicuticularwaxesofPilocarpus (Rutaceae): Taxonomicmeaning. **BiochemicalSystematicsandEcology**, v. 26, n. 1, p. 655-662, 1998.

SOUZA, J. S. N. **Estudo das interações do Praziquantel com Ciclodextrinas em Sistemas Multicomponentes**. 2016. 87f. Dissertação (Mestrado em Ciências Farmacêuticas) - Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2016.

SUDHA, T.; CHIDAMBARAMPILLAI, S.; MOHAN, V. R. GC-MS Analysis of Bioactive Components of Aerial parts of *Fluggealeucopyrus* Willd. (Euphorbiaceae). **Journal of Applied Pharmaceutical Science**, v. 3, n. 5, p. 126-130, 2013.

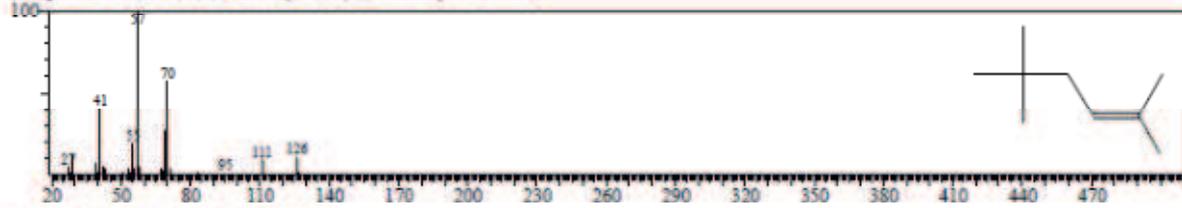
TROPICOS.ORG. Missouri Botanical Garden. Disponível em <<http://http://tropicos.org/Name/50168800>> Acessado em 27 de dez. de 2017.

TSUKUI, A.; OIGMAN, S. S.; REZENDE, C. M. Óleo de Grãos de Café Cru: Diterpenos Cafestol e Caveol. **Revista Virtual de Química**, v. 6, n. 1, p. 16-33, 2013

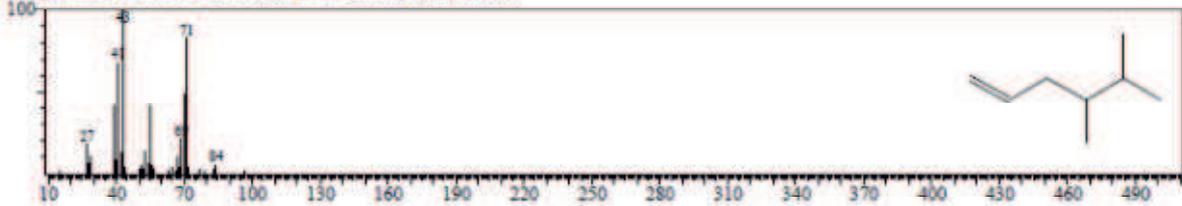
VANITHA, A.; KALIMUTHU, K.; CHINNADURAI, V.; JULIET, Y. S.; PRABAKARAN, R. GCMS Analysis of Leaf and Salt Stress Callus of Eggplant (*Solanum melongena* L.). **British Journal of Pharmaceutical Research**, v. 14, n. 6, p. 1-11, 2016.

ANEXO A – Espectros de Massas

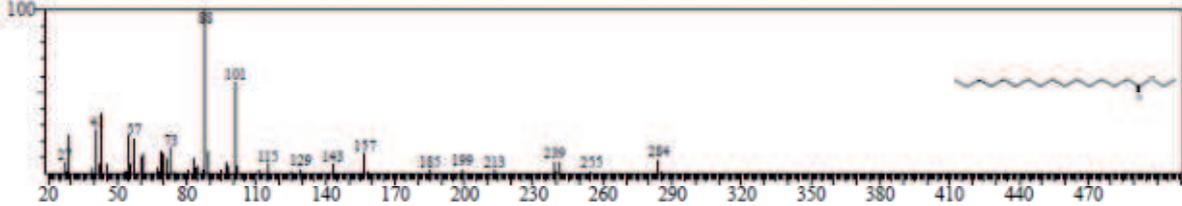
Hit#1 Entry:6669 Library:NIST08.LIB
 SI:92 Formula:C9H18 CAS:40467-04-7 MolWeight:126 BasePeak:57.00 RefIndex:816
 CompName:2-Hexene, 2,5,5-trimethyl- \$\$ 2,5,5-Trimethyl-2-hexene \$\$



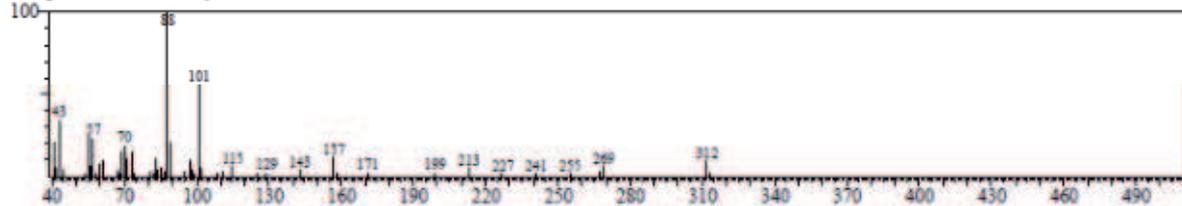
Hit#1 Entry:3631 Library:NIST08.LIB
 SI:82 Formula:C8H16 CAS:16106-59-5 MolWeight:112 BasePeak:43.00 RefIndex:678
 CompName:1-Hexene, 4,5-dimethyl- \$\$ 4,5-Dimethyl-1-hexene \$\$



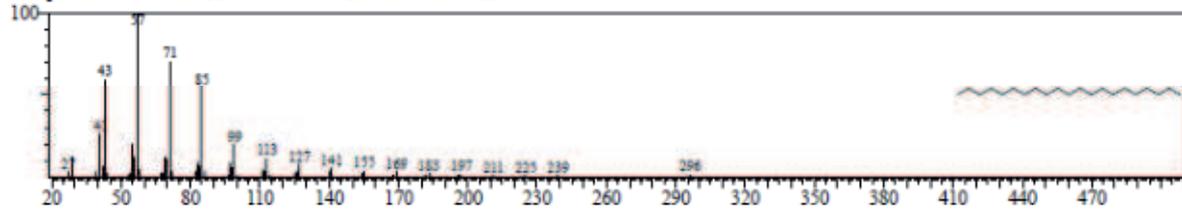
Hit#2 Entry:100823 Library:NIST08.LIB
 SI:95 Formula:C18H36O2 CAS:628-97-7 MolWeight:284 BasePeak:88.00 RefIndex:1978
 CompName:Hexadecanoic acid, ethyl ester \$\$ Palmitic acid, ethyl ester \$\$ Ethyl hexadecanoate \$\$ Ethyl palmitate \$\$



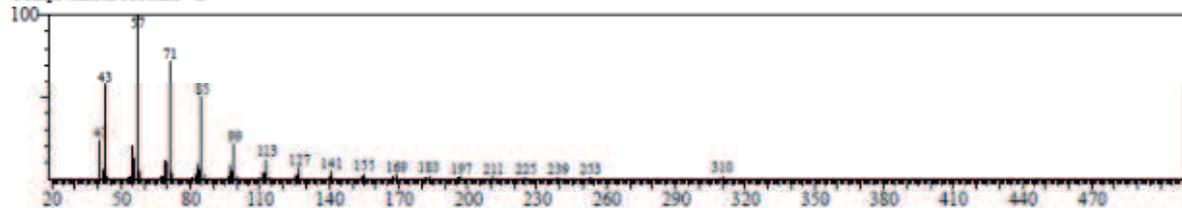
Hit#1 Entry:96 Library:FFNSC1.3.lib
 SI:95 Formula:C20 H40 O2 CAS:111-61-5 MolWeight:312 BasePeak:88.00 RefIndex:2198
 CompName:Stearate <-ethyl->



Hit#3 Entry:24179 Library:NIST08.LIB
 SI:95 Formula:C21H44 CAS:629-94-7 MolWeight:296 BasePeak:57.00 RefIndex:2109
 CompName:Henicosane \$\$ n-Henicosane \$\$ Henicosane # \$\$



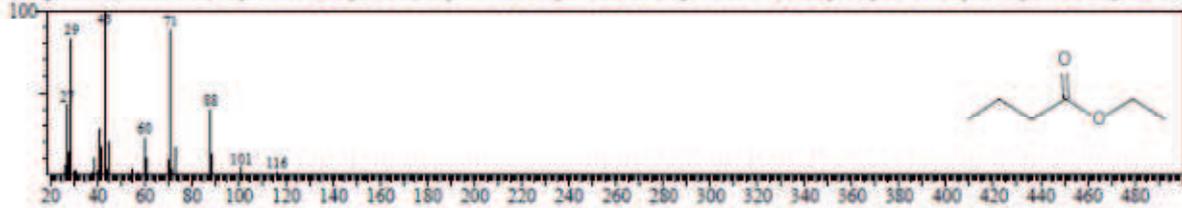
Hit#1 Entry:931 Library:FFNSC1.3.lib
 SI:96 Formula:C22 H46 CAS:629-97-0 MolWeight:310 BasePeak:57.00 RefIndex:2200
 CompName:Docosane <-n->



Hit#1 Entry:3501 Library:NIST08.LIB

SI94 Formula:C6H12O2 CAS:105-54-4 MolWeight:116 BasePeak:43.00 RetIndex:785

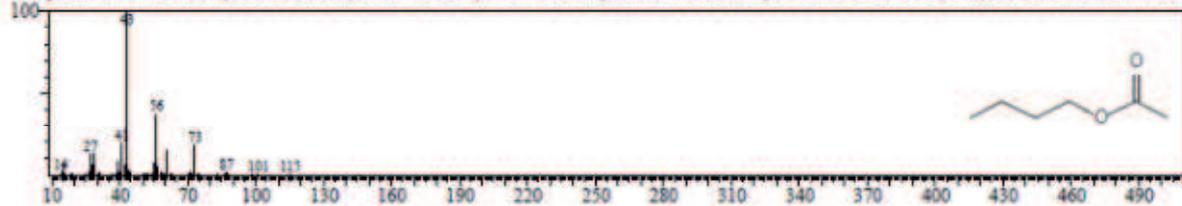
CompName:Butanoic acid, ethyl ester \$\$\$\$ Butyric acid, ethyl ester \$\$\$\$ Butyric ether \$\$\$\$ Ethyl butanoate \$\$\$\$ Ethyl butyrate \$\$\$\$ Ethyl n-butyrate \$\$\$\$ Ethyl n-butanoate



Hit#1 Entry:4531 Library:NIST08.LIB

SI98 Formula:C6H12O2 CAS:123-86-4 MolWeight:116 BasePeak:43.00 RetIndex:785

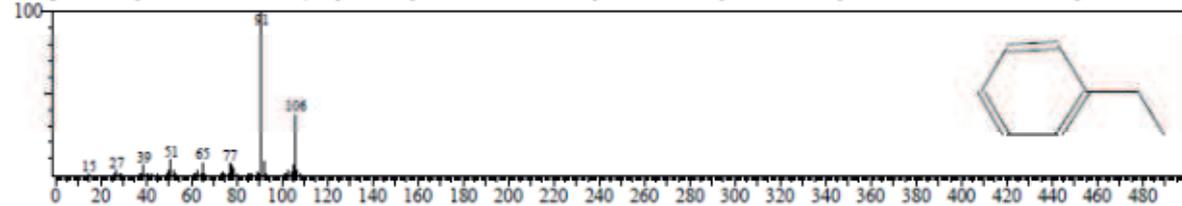
CompName:Acetic acid, butyl ester \$\$\$\$ n-Butyl acetate \$\$\$\$ Butyl acetate \$\$\$\$ Butyl ethanoate \$\$\$\$ 1-Butyl acetate \$\$\$\$ CH3COO(CH2)3CH3 \$\$\$\$ Acetic acid n-butyl ester



Hit#1 Entry:2361 Library:NIST08.LIB

SI90 Formula:C8H10 CAS:100-41-4 MolWeight:106 BasePeak:91.00 RetIndex:893

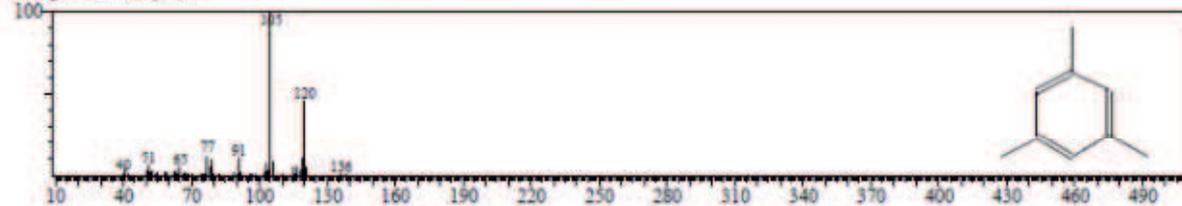
CompName:Ethylbenzene \$\$\$\$ Benzene, ethyl- \$\$\$\$ Ethylbenzol \$\$\$\$ EB \$\$\$\$ Phenylethane \$\$\$\$ Aethylbenzol \$\$\$\$ Ethylbenzen \$\$\$\$ Ethilbenzene \$\$\$\$ Etylobenzen \$\$\$\$ N-Ethylbenzene



Hit#1 Entry:1718 Library:FFNSC1.3.lib

SI91 Formula:C9H12 CAS:108-67-8 MolWeight:120 BasePeak:105.00 RetIndex:994

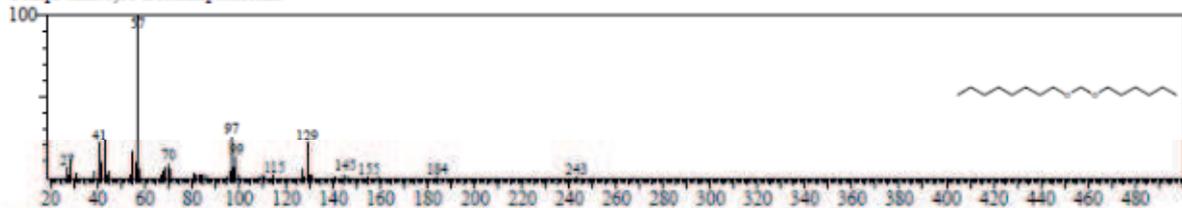
CompName:Mesitylene



Hit#1 Entry:72328 Library:NIST08.LIB

SI82 Formula:C15H32O2 CAS:0-00-0 MolWeight:244 BasePeak:57.00 RetIndex:1664

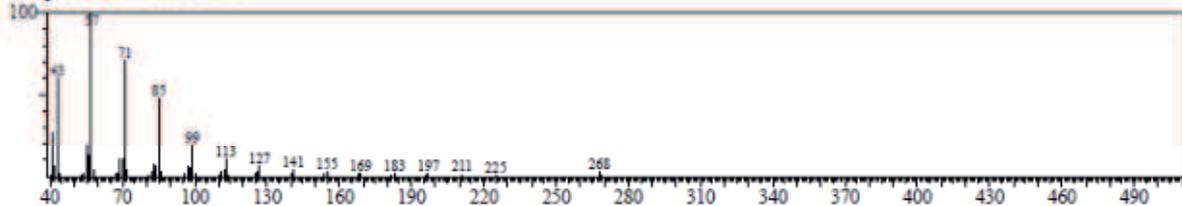
CompName:8,10-Dioxaheptadecane



Hit#1 Entry:920 Library:FFNSC1.3.lib

SI95 Formula:C19H40 CAS:629-92-5 MolWeight:268 BasePeak:57.00 RetIndex:1900

CompName:Nonadecane <n>



Hit#:1 Entry:1821 Library:NIST08.LIB

SI:98 Formula:C5H9NO CAS:872-50-4 MolWeight:99 BasePeak:99.00 RetIndex:920

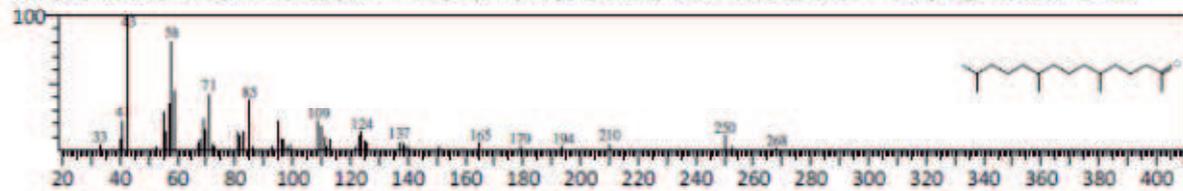
CompName:2-Pyrrolidinone, 1-methyl- \$\$ M-Pyrol \$\$ N-Methyl-alpha-pyrrolidinone \$\$ N-Methyl-alpha-pyrrolidone \$\$ N-Methyl-gamma-butyrolactam \$\$ N-Methyl-2-pyrrolidinone \$\$ N-Methyl-2-pyrrolidone \$\$ N-Methylpyrrolidinone \$\$ N-Methylpyrrolidone \$\$ NMP \$\$ 1-Methyl-2-Pyrrolidinone \$\$ 1-Methyl-2-pyrrolidone \$\$ 1-Methyl-5-pyrrolidinone \$\$ 1-Methylpyrrolidinone \$\$ 2-Pyrrolidone, 1-methyl- \$\$ 1-Methylazacyclopentane-2-one \$\$ 1-Methylpyrrolidone \$\$ N-Methylpyrrolidone \$



Hit#:1 Entry:22611 Library:NIST08s.LIB

SI:95 Formula:C18H36O CAS:502-69-2 MolWeight:268 BasePeak:43.00 RetIndex:1754

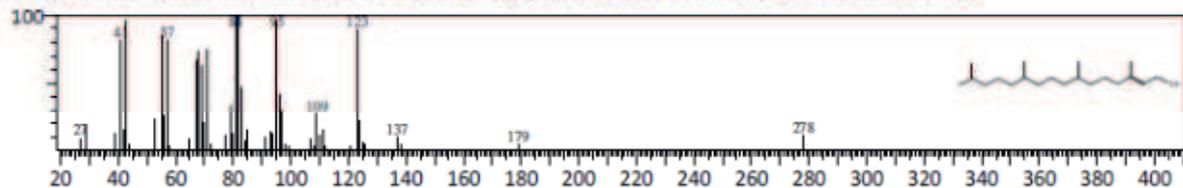
CompName:2-Pentadecanone, 6,10,14-trimethyl- \$\$ Hexahydrofarnesyl acetone \$\$ 6,10,14-Trimethyl-2-pentadecanone \$\$



Hit#:1 Entry:109355 Library:NIST08.LIB

SI:91 Formula:C20H40O CAS:102608-53-7 MolWeight:296 BasePeak:81.00 RetIndex:2045

CompName:3,7,11,15-Tetramethyl-2-hexadecen-1-ol \$\$ (2E)-3,7,11,15-Tetramethyl-2-hexadecen-1-ol # \$\$



Hit#:1 Entry:109352 Library:NIST08.LIB

SI:96 Formula:C20H40O CAS:0-00-0 MolWeight:296 BasePeak:71.00 RetIndex:1899

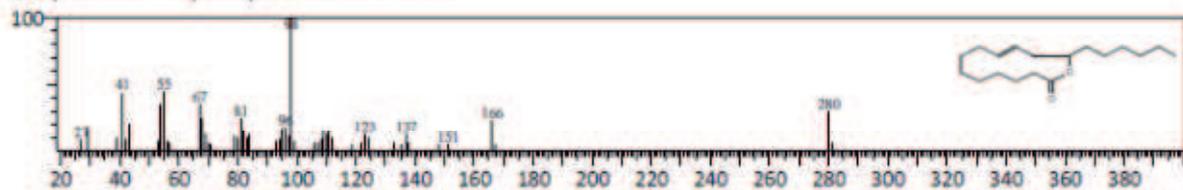
CompName:1-Hexadecen-3-ol, 3,5,11,15-tetramethyl-



Hit#:1 Entry:97699 Library:NIST08.LIB

SI:93 Formula:C18H32O2 CAS:127062-51-5 MolWeight:280 BasePeak:98.00 RetIndex:2325

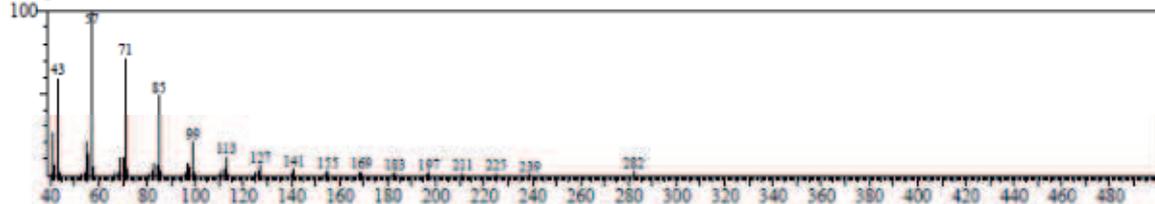
CompName:13-Hexyloxacyclotridec-10-en-2-one



Hit#:1 Entry:923 Library:FFNSC1.3.lib

SI:96 Formula:C20H42 CAS:112-95-8 MolWeight:282 BasePeak:57.00 RetIndex:2000

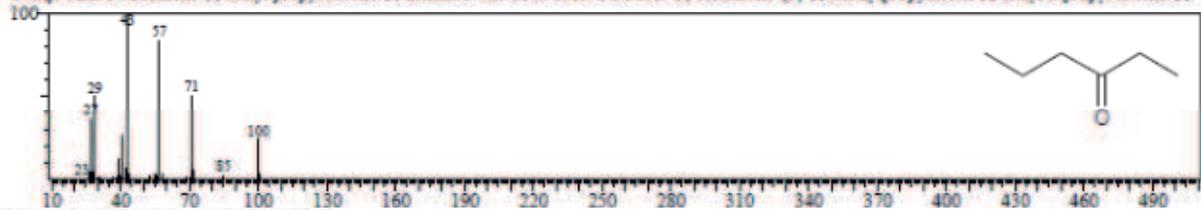
CompName:Eicosane <n->



Hit# 2 Entry: 1990 Library: NIST08.LIB

SI: 97 Formula: C₆H₁₂O CAS: 589-38-8 MolWeight: 100 BasePeak: 43.00 RetIndex: 754

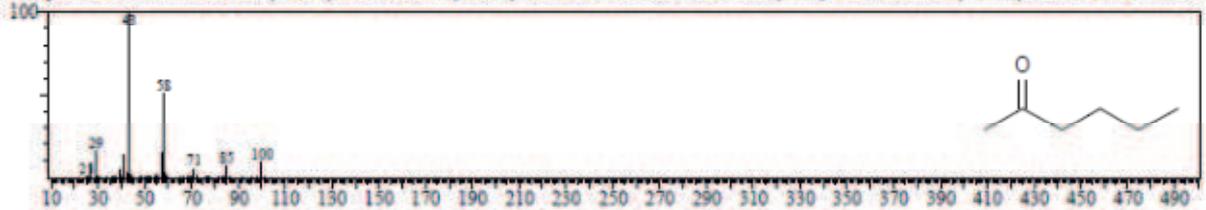
CompName: 3-Hexanone \$\$ Ethyl propyl ketone \$\$ Hexan-3-one \$\$ n-C₃H₇COC₂H₅ \$\$ Hexanone-(3) \$\$ Aethylpropylketon \$\$ Ethyl n-propyl ketone \$\$



Hit# 1 Entry: 1786 Library: NIST08.LIB

SI: 97 Formula: C₆H₁₂O CAS: 591-78-6 MolWeight: 100 BasePeak: 43.00 RetIndex: 754

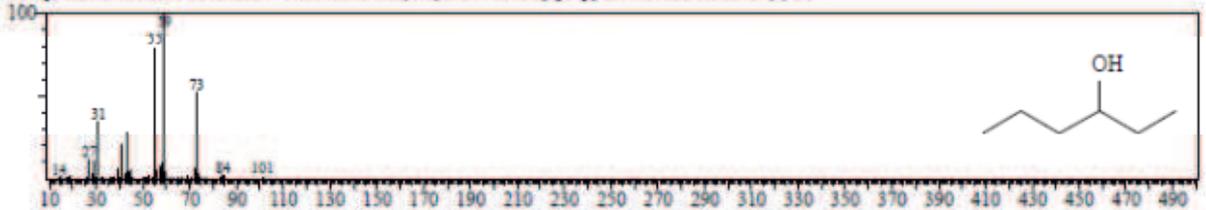
CompName: 2-Hexanone \$\$ n-Butyl methyl ketone \$\$ Butyl methyl ketone \$\$ Hexan-2-one \$\$ Methyl butyl ketone \$\$ Methyl n-butyl ketone \$\$ 2-Octobenz



Hit# 1 Entry: 2344 Library: NIST08.LIB

SI: 97 Formula: C₆H₁₄O CAS: 623-37-0 MolWeight: 102 BasePeak: 59.00 RetIndex: 780

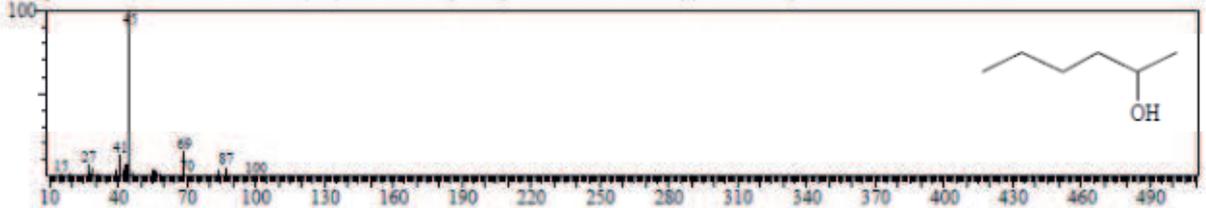
CompName: 3-Hexanol \$\$ Hexan-3-ol \$\$ C₂H₅CH(OH)C₃H₇ \$\$ Ethylpropylcarbinol \$\$ Hexanol-(3) \$\$



Hit# 2 Entry: 2326 Library: NIST08.LIB

SI: 96 Formula: C₆H₁₄O CAS: 626-93-7 MolWeight: 102 BasePeak: 45.00 RetIndex: 780

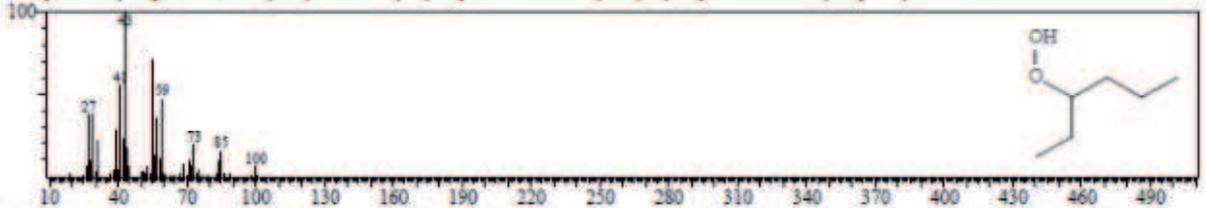
CompName: 2-Hexanol \$\$ n-C₄H₉CH(OH)CH₃ \$\$ n-Butylmethylcarbinol \$\$ Hexanol-(2) \$\$ sec-Hexyl alcohol \$\$ n-Hexan-2-ol \$\$



Hit# 1 Entry: 4947 Library: NIST08.LIB

SI: 86 Formula: C₆H₁₄O₂ CAS: 24254-56-6 MolWeight: 118 BasePeak: 43.00 RetIndex: 914

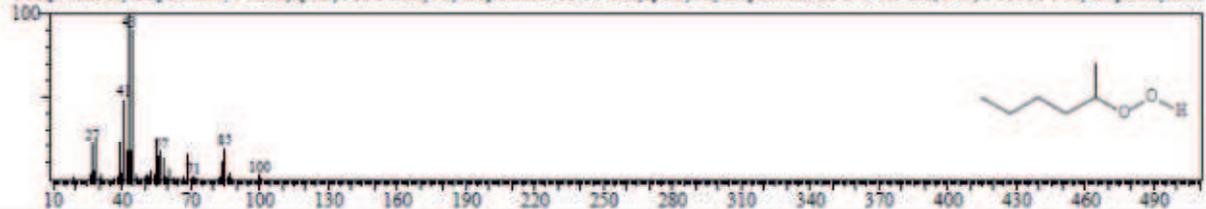
CompName: Hydroperoxide, 1-ethylbutyl \$\$ 3-Hexyl hydroperoxide \$\$ 1-Ethylbutyl hydroperoxide \$\$ 3-Hydroperoxyhexane \$\$



Hit# 1 Entry: 4945 Library: NIST08.LIB

SI: 89 Formula: C₆H₁₄O₂ CAS: 24254-55-5 MolWeight: 118 BasePeak: 43.00 RetIndex: 914

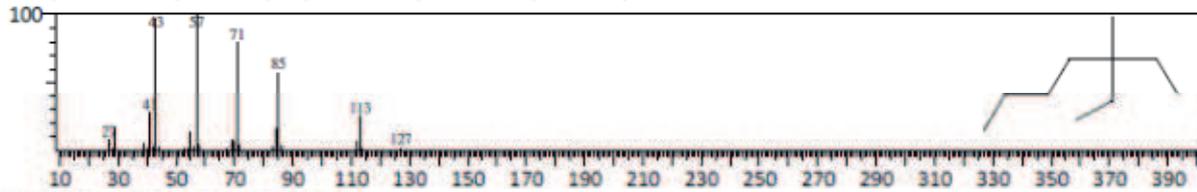
CompName: Hydroperoxide, 1-methylpentyl \$\$ 2-Hexyl hydroperoxide \$\$ 1-Methylpentyl hydroperoxide \$\$ n-C₄H₉CH(CH₃)OOH \$\$ 2-Hydroperoxyhexa



Hit#:1 Entry:12279 Library:NIST08.LIB

SI:92 Formula:C10H22 CAS:17302-01-1 MolWeight:142 BasePeak:57.00 RetIndex:931

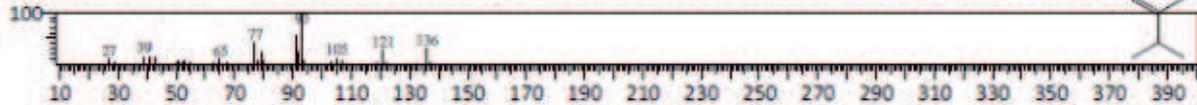
CompName:3-Ethyl-3-methylheptane \$\$ Heptane, 3-ethyl-3-methyl- \$\$



Hit#:1 Entry:6447 Library:NIST08s.LIB

SI:95 Formula:C10H16 CAS:99-85-4 MolWeight:136 BasePeak:93.00 RetIndex:998

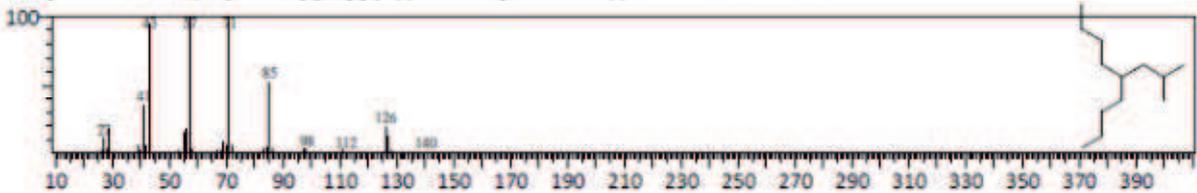
CompName:1,4-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- \$\$ γ -Terpinen \$\$ γ -Terpinene \$\$ p-Mentha-1,4-diene \$\$ Crithmene \$\$ Moslene \$\$ 1-methyl-4-(1-methylethyl)-1,4-cyclohexadiene \$\$ Terpinene, α \$\$ 1-Methyl-4-isopropyl-1,4-cyclohexadiene \$\$ 1-Methyl-4-isopropylcyclohexadiene-1,4 \$\$ 1,4-p-Menthadiene \$\$ 1,4-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-isopropyl- \$\$ 4-Isopropyl-1-methyl-1,4-cyclohexadiene \$\$ Gamma terpinene \$\$ 1-Isopropyl-4-methyl-1,4-cyclohexadiene # \$\$



Hit#:1 Entry:33577 Library:NIST08.LIB

SI:83 Formula:C13H28 CAS:62185-53-9 MolWeight:184 BasePeak:57.00 RetIndex:1185

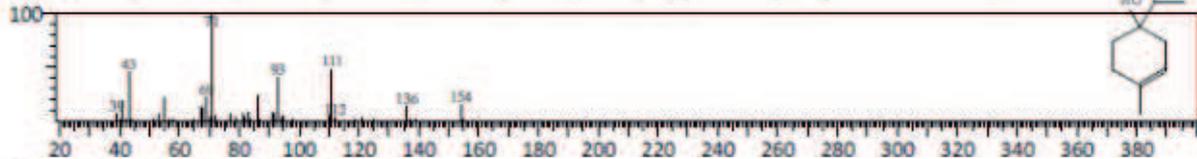
CompName:Nonane, 5-(2-methylpropyl)- \$\$ 5-Isobutylnonane # \$\$



Hit#:1 Entry:17389 Library:NIST08.LIB

SI:97 Formula:C10H18O CAS:20126-76-5 MolWeight:154 BasePeak:71.00 RetIndex:1137

CompName:3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-, (R)- \$\$ p-Menth-1-en-4-ol, (R)-(-)- \$\$ (-)-Terpinen-4-ol (-)-4-Terpineol \$\$ L-terpinen-4-ol \$\$ L-4-terpineneol \$\$ L-4-terpineol \$\$ 1-Isopropyl-4-methyl-3-cyclohexen-1-ol # \$\$



Hit#:1 Entry:19528 Library:NIST08s.LIB

SI:93 Formula:C16H34 CAS:544-76-3 MolWeight:226 BasePeak:57.00 RetIndex:1612

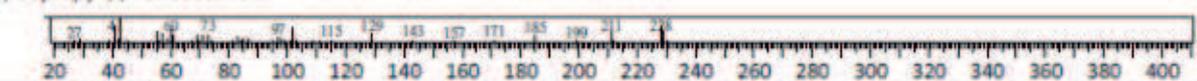
CompName:Hexadecane \$\$ n-Cetane \$\$ n-Hexadecane \$\$ Cetane \$\$



Hit#:1 Entry:22744 Library:NIST08s.LIB

SI:93 Formula:C17H34O2 CAS:110-27-0 MolWeight:270 BasePeak:43.00 RetIndex:1814

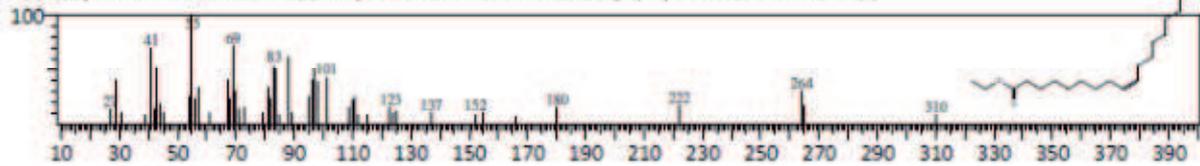
CompName:Isopropyl Myristate \$\$ Tetradecanoic acid, 1-methylethyl ester \$\$ Myristic acid, isopropyl ester \$\$ Bisomel \$\$ Crodamol I.P.M. \$\$ Crodamol IPM \$\$ Deltyl Extra \$\$ Emcol-IM \$\$ Isomyst \$\$ Isopropyl tetradecanoate \$\$ Kessco IPM \$\$ Kesscomir \$\$ Promyr \$\$ Sinnoester MIP \$\$ Stepan D-50 \$\$ Wickenol 101 \$\$ Propyl myristate \$\$ component of Sardo Bath Oil \$\$ Emerest 2314 \$\$ Estergel \$\$ Ja-fa IPM \$\$ Kessco isopropyl myristate \$\$ Plymouth IPM \$\$ Starfol IPM \$\$ Tegester \$\$ tetradecanoic acid, isopropyl \$\$ Tetradecanoic



Hit# 1 Entry:24810 Library:NIST08s.LIB

SI:84 Formula:C20H38O2 CAS:111-62-6 MolWeight:310 BasePeak:55.00 RetIndex:2185

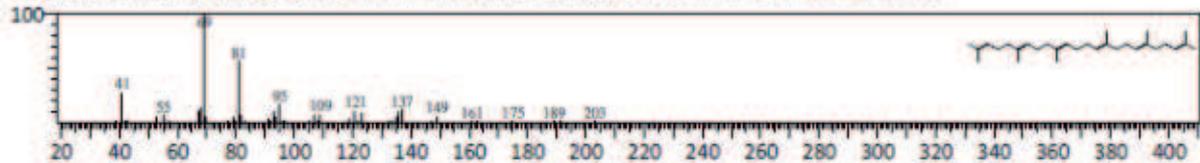
CompName:Ethyl Oleate \$\$ 9-Octadecenoic acid (Z)-, ethyl ester \$\$ Oleic acid, ethyl ester \$\$ (Z)-9-Octadecenoic acid ethyl ester \$\$ Ethyl cis-9-octadecenoate \$\$ Ethyl Z-9-octadecenoate \$\$ Ethyl (9Z)-9-octadecenoate # \$\$



Hit# 1 Entry:27421 Library:NIST08s.LIB

SI:95 Formula:C30H50 CAS:7683-64-9 MolWeight:410 BasePeak:69.00 RetIndex:2914

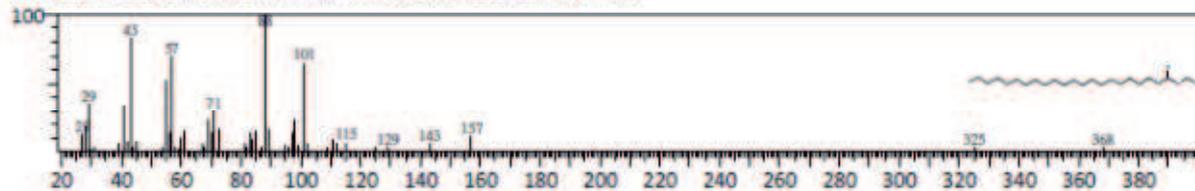
CompName:Squalene \$\$ 2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaene, 2,6,10,15,19,23-hexamethyl- \$\$ Skvalen \$\$ Spinacene \$\$ Supraene \$\$ (6E,10E,14E,18E)-2,6,10,15,19,23-Hexamethyl-2,6,10,14,18,22-tetracosahexaene # \$\$ Squalene \$\$



Hit# 1 Entry:154724 Library:NIST08.LIB

SI:84 Formula:C24H48O2 CAS:5908-87-2 MolWeight:368 BasePeak:88.00 RetIndex:2574

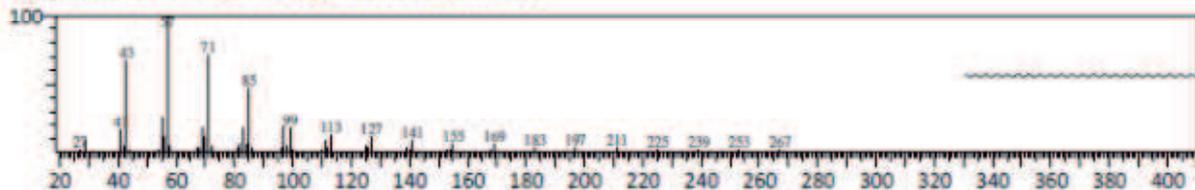
CompName:Docosanoic acid, ethyl ester \$\$ Ethyl docosanoate # \$\$



Hit# 1 Entry:189407 Library:NIST08.LIB

SI:95 Formula:C44H90 CAS:7098-22-8 MolWeight:618 BasePeak:57.00 RetIndex:4395

CompName:Tetratetracontane \$\$ n-Tetratetracontane \$\$



Hit# 2 Entry:27405 Library:NIST08s.LIB

SI:95 Formula:C29H60 CAS:630-03-5 MolWeight:408 BasePeak:57.00 RetIndex:2904

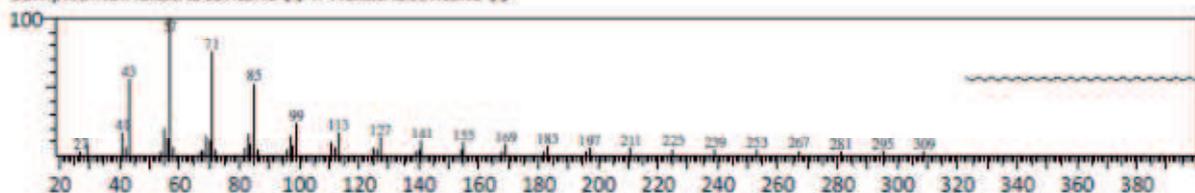
CompName:Nonacosane \$\$ n-Nonacosane \$\$



Hit# 3 Entry:185135 Library:NIST08.LIB

SI:94 Formula:C36H74 CAS:630-06-8 MolWeight:506 BasePeak:57.00 RetIndex:3600

CompName:Hexatriacontane \$\$ n-Hexatriacontane \$\$



Hit#:1 Entry:25723 Library:NIST08.LIB

SI:81 Formula:C₁₂H₂₆ CAS:17312-54-8 MolWeight:170 BasePeak:43.00 RetIndex:1086

CompName:Decane, 3,7-dimethyl- \$\$ 3,7-Dimethyldecane # \$\$

