Amanda de Souza

Variabilidade dos óleos voláteis de
espécies de Myrtaceae nativas da Mata
Atlântica

São Paulo

2009

Amanda de Souza

Variabilidade dos óleos voláteis de
espécies de Myrtaceae nativas da Mata
Atlântica

Tese apresentada ao Instituto de
Biociências da Universidade de São
Paulo, para a obtenção de Título de
Doutor em Ciências, na Área de
Botânica.

Orientador: Prof. Dr. Paulo Roberto
Hrihorowitsch Moreno

São Paulo

2009

Souza, Amanda de
Variabilidade dos óleos voláteis de
espécies de Myrtaceae nativas da Mata
Atlântica
351 páginas

Tese (Doutorado) - Instituto de
Biociências da Universidade de São Paulo.
Departamento de Botânica.

1. Óleos Voláteis 2. Myrtaceae 3.
Mata Atlântica I. Universidade de São
Paulo. Instituto de Biociências.
Departamento de Botânica.

Comissão Julgadora:

Prof(a). Dr(a).

Prof(a). Dr(a).

Prof(a). Dr(a).

Prof(a). Dr(a).

Prof(a). Dr(a). Paulo Roberto Hrihorowitsch Moreno

Orientador(a)

***Aos meus queridos pais, Hlio e
Neuza, e ao meu irmo,
Leonardo, pela pacincia, pelo
estmulo e incentivo em todos os
momentos.***

Era preciso saber quando o heliotrópio deve ser colhido e quando o gerânio floresce e saber que a flor do jasmim perde seu perfume com o sol nascente.

Patrick Süskind, *O Perfume*
(trad. Flávio R. Kothe)

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Paulo Roberto H. Moreno, pela orientação dedicada, por todos os ensinamentos, pelo apoio indispensável em todas as etapas de realização deste trabalho e pela amizade construída durante esses quatro anos.

Ao Instituto de Biociências da Universidade de São Paulo, pela oportunidade de realização deste curso.

À CAPES, pela bolsa concedida.

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo pelos recursos disponibilizados através do Programa Biota/FAPESP.

A todos os funcionários e pesquisadores da Seção de Fisiologia e Bioquímica de Plantas, em especial à querida PqC Dra. Maria Cláudia Marx Young, pela oportunidade de utilizar a infra-estrutura do laboratório e, principalmente, pelo agradável convívio e por ser um exemplo de pessoa e de profissional.

Ao Dr. Marcos Sobral, da Universidade Federal de Minas Gerais, e à Dra Inês Cordeiro, do Instituto de Botânica de São Paulo, pela identificação das espécies estudadas.

Ao Biólogo Marcos Enoque Leite Lima, pelo auxílio com a realização dos ensaios antimicrobianos.

À Dra. Elaine Cardoso Monteiro e à Bióloga Michelle Cristina da Silva, pelo auxílio com os ensaios anticolinesterásicos.

À MsC. Cynthia Murakami e MsC. Ludmila Raggi pelo auxílio com a realização dos ensaios antifúngicos.

Aos amigos biólogos Marcos E. L. Lima, Fabiano Brumati, Ricardo Matos e Ailton Muniz Santo Jr. pela ajuda indispensável nas coletas.

Ao Prof. Dr. Marcus T. Scotti, da Universidade Federal da Paraíba, pelo auxílio com a análise estatística.

Ao biólogo Anderson Luiz do Nascimento, pela constante ajuda com as coletas e extrações e pela amizade.

Às minhas queridas Lud, Cyn, De e Mi, com quem compartilhei não somente a bancada, mas muitos bons momentos. Obrigada por toda a ajuda.

À Valéria e à Rosi, que em meio a extrações e espectros de massas, se tornaram grandes e inesquecíveis amigas.

À “minha amiga PqC”, Dra Vanessa Rebouças, pelas caminhadas e conversas no Jardim Botânico.

À Mary Pereira Monteiro, pela profunda amizade consolidada nestes dez anos de Botânico, pela força e pelo apoio nos momentos mais complicados.

Aos amigos corajosos que me acompanharam nas coletas noturnas, Anderson, Lud, Rosi, Ailton e Fabiano.

À Elaine, pela amizade e valiosos conselhos.

Às Dras Rosana Carreira e Márcia Débora, amigas queridas que fazem muita falta no Botânico.

Aos amigos do laboratório, Fernanda K., Fernanda Macedo, Vanessa Mammal, Vanessa Costa, Kellyta, Mandy, Paola, Roberta, Juju, Rodrigo, Maura, Hugo... Sentirei muita falta de todos vocês.

Ao Sérgio, pelo incentivo.

Às grandes amigas Bianca, Carla e Solange (minha irmãzinha do coração), que mesmo sem entender muito bem o que faz uma doutoranda em Botânica, estiveram sempre ao meu lado quando mais precisei.

À minha família, em especial à minha querida avó Benedicta (in memoriam), por todo amor, apoio e compreensão.

Enfim, a todos aqueles que fizeram parte deste período de aprendizado.

Índice

Capítulo 1	10
<hr/>	
Introdução Geral	
1. Introdução Geral	11
2. Referências Bibliográficas	22
Capítulo 2	32
<hr/>	
Variações diuturnas nos óleos voláteis de <i>Campomanesia guaviroba</i> (DC.) Kiaersk. e <i>Myrcia splendens</i> (Sw.) DC. (Myrtaceae)	
<i>Abstract</i>	33
Resumo	34
1. Introdução	35
2. Material e Métodos	37
3. Resultados e Discussão	39
4. Referências Bibliográficas	67
Capítulo 3	73
<hr/>	
Variações sazonais nos óleos voláteis de quatro espécies de Myrtaceae do Parque Estadual das Fontes do Ipiranga (São Paulo, SP)	
<i>Abstract</i>	74
Resumo	75
1. Introdução	76
2. Material e Métodos	78
3. Resultados e Discussão	80
4. Referências Bibliográficas	108

Capítulo 4 114

Variações geográficas nos óleos voláteis de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk., *Eugenia cuprea* (O. Berg) Nied. e *Calyptranthes lucida* Mart. ex DC. (Myrtaceae)

<i>Abstract</i>	115
Resumo	116
1. Introdução	117
2. Material e Métodos	119
3. Resultados e Discussão	121
4. Referências Bibliográficas	139

Capítulo 5 145

Atividades Biológicas de Óleos Voláteis Espécies de Myrtaceae Nativas da Mata Atlântica

<i>Abstract</i>	146
Resumo	147
1. Introdução	148
2. Material e Métodos	150
3. Resultados e Discussão	153
4. Referências Bibliográficas	167

Capítulo 6 173

Discussão Geral e Conclusões

1. Discussão Geral	174
2. Conclusões	177
3. Referências Bibliográficas	178

Resumo	180
<hr/>	
<i>Abstract</i>	181
<hr/>	
Anexos	182
<hr/>	
Anexo I	182
Anexo II	186
Anexo III	234
Anexo IV	277
Anexo V	317
Anexo VI	331
Anexo VII	334
Anexo VIII	338
Anexo IX	343
Anexo X	347

CAPÍTULO 1

Introdução Geral

1. INTRODUÇÃO GERAL

O Domínio da Mata Atlântica compreende a segunda maior floresta pluvial tropical do continente americano. Estendendo-se de 4 a 32°S, esta formação cobre uma ampla faixa de zonas climáticas e formações vegetais, de tropicais a subtropicais. Sua elevação vai do nível do mar a 2.900m, com mudanças abruptas no tipo profundidade dos solos e na temperatura média do ar (MANTOVANI, 2003). Tais características resultam em um grande mosaico florestal, formado por diferentes fitofisionomias: Florestas Ombrófilas Densa, Aberta e Mista, Florestas Estacionais Decidua e Semidecidua, Formações Pioneiras e Campos de Altitude (FIBGE, 2009).

A Floresta Ombrófila Densa caracteriza-se por ser perenifolia e situa-se em elevações montanhosas com variações fisionômicas e elevadas riqueza e diversidade de espécies, com dossel formado por árvores de 20 a 30 m de altura, apresentando abundância de lianas, epífitas e palmeiras. Esta fisionomia pode ainda ser subdividida em Floresta Pluvial Baixa Montana (ou sub-montana), que ocorre a base e nos contrafortes da cadeia de montanhas ao longo do litoral, entre cerca de 300-800 m, e Floresta Pluvial Montana, localizada na parte mediana (montana) e superior (alto-montana) da cadeia de montanhas, revestindo as serras entre 800 e 1500-1700 m de altitude.

A Floresta Ombrófila Aberta situa-se entre 100 e 600 m de altitude e apresenta predominância de palmeiras. Já a Floresta Ombrófila Mista ocorre principalmente nos planaltos dos estados da Região Sul (Rio Grande do Sul, Santa Catarina e Paraná) e nos maciços descontínuos de São Paulo e Rio de Janeiro (Serras de Pararanapiacaba, Mantiqueira e Bocaina). Nestas regiões, a Floresta Atlântica combina-se com o pinheiro do Paraná (*Araucaria angustifolia* (Bertol.) Kuntze) e dá origem à Floresta Pluvial de Araucária (ou Mata de Araucária). Este tipo de vegetação apresenta uma predominância desta espécie no estrato superior, com muitas espécies típicas da Floresta Pluvial Tropical Atlântica nos estratos inferiores. Apresenta árvores com 25 a 30 m de altura e um grande número de epífitas.

A Floresta Estacional Decidua é caracterizada por possuir grande número de espécies vegetais (principalmente as árvores do dossel e as emergentes) que perdem as suas folhas no período de seca. Encontra-se no agreste nordestino, no entorno da caatinga, e é formada de elevadas arvores da caatinga comum, ao longo de uma faixa mais úmida

localizada junto ao litoral e por isso chamada localmente de agreste. Já na Floresta Estacional Semidecidual a percentagem de espécies caducifólias do conjunto florestal é menor, variando de 20 a 50%.

As formações pioneiras consistem de ecossistemas associados à Mata Atlântica: o mangue (vegetação com influência marinha e fluvial, que estabelece estreita relação com a Floresta Pluvial Tropical Atlântica através das drenagens), as dunas (cordões arenosos), a floresta de várzea (que é periodicamente inundada, apresentando espécies com 20 a 30 m de altura), e a restinga (vegetação arbóreo-arbustiva existente nas encostas baixas ou morros baixos da Serra do Mar). Os campos de altitude, por sua vez, consistem na vegetação peculiar aos planaltos de cadeia montanhosa marítima, acima de 2000 metros, assentando-se sobre rochas cristalinas (RIZZINI, 1979; VELOSO & GOES-FILHO, 1982).

A história da Mata Atlântica é marcada por períodos de intercâmbio biológico através de conexão com outras florestas sul-americanas (como a Amazônia e florestas andinas) seguidos por períodos de isolamento, que levaram à especiação geográfica (SILVA *et al.*, 2004). Como consequência, sua biota é composta tanto por espécies antigas (pré-Pleistoceno), quanto por espécies novas (Pleistoceno) (SILVA & CASTELETTI, 2003) e várias áreas de endemismo têm sido identificadas (SILVA *et al.*, 2004). Pelo menos cinco áreas de endemismos podem ser reconhecidas com base na distribuição de vertebrados terrestres e plantas: Brejos Nordestinos, Pernambuco, Bahia Central, Costa da Bahia e Serra do Mar, todas no Brasil (SILVA & CASTELETTI, 2003; SILVA *et al.*, 2004).

A grande taxa de endemismo é um dos fatores que fazem com que este bioma configure entre os vinte e cinco *hotspots* mundiais de biodiversidade. Apesar de ter sido muito devastada, ela ainda abriga mais de 8.000 espécies endêmicas de plantas vasculares, anfíbios, répteis, aves e mamíferos (MYERS *et al.*, 2000).

Originalmente, o Domínio da Mata Atlântica compreendia um contínuo ao longo da costa brasileira, penetrando até o leste do Paraguai e nordeste da Argentina. Abrangia mais de 1,5 milhões de km² e 92% dessa área localizava-se no Brasil, cobrindo cerca de 15% do território nacional. Atualmente, em virtude do alto grau de interferência, restam cerca de 7% da cobertura inicial (FUNDAÇÃO SOS MATA ATLÂNTICA & INPE, 2005; GALINDO-LEAL & CÂMARA, 2003).

A degradação da Mata Atlântica vem ocorrendo desde o início da colonização europeia, com a ocupação dos primeiros espaços territoriais próximos à região costeira e o

extrativismo do pau-brasil. A essa exploração, seguiram-se os impactos dos diferentes ciclos de exploração, como o do ouro, o da cana-de-açúcar e, posteriormente, o do café. Novos ciclos econômicos, de desenvolvimento e de integração nacional surgiram e, com o processo de industrialização e conseqüente urbanização, a vegetação natural foi reduzida drasticamente. As principais cidades e metrópoles brasileiras situam-se nas áreas originalmente ocupadas pela Mata Atlântica. A dinâmica da destruição foi mais acentuada nas últimas três décadas, resultando em alterações severas para os ecossistemas pela alta fragmentação do habitat e perda de sua biodiversidade. O resultado atual é a perda quase total das florestas originais intactas e a contínua devastação dos remanescentes florestais existentes, que coloca a Mata Atlântica em péssima posição de destaque no mundo: como um dos conjuntos de ecossistemas mais ameaçados de extinção (FUNDAÇÃO SOS MATA ATLÂNTICA & INPE, 2005).

Mais de 67% da população brasileira vive atualmente nessa extensa área do Domínio da Mata Atlântica. São mais de 120 milhões de habitantes em mais de 3.400 municípios, que correspondem a 61% dos existentes no Brasil. Destes, 2.528 municípios possuem a totalidade dos seus territórios no bioma (FIBGE, 2009).

TABARELLI *et al.* (2005) propõem uma série de medidas a fim de se garantir a conservação da biodiversidade dos remanescentes de Mata Atlântica. Para os autores, são imprescindíveis o controle e fiscalização efetivos, a implantação do Código Florestal e, principalmente, a integração dos diversos instrumentos regulatórios, políticas públicas e programas independentes desenvolvidos por organizações não-governamentais em uma estratégia abrangente para o estabelecimento de redes de paisagens sustentáveis na região, os chamados corredores de biodiversidade. JOLY *et al.* (2008) apontam, ainda, a necessidade de criação de um sistema de informação ambiental que permita, concomitantemente, aumentar o conhecimento acadêmico sobre a biodiversidade e estabelecer mecanismos e estratégias para utilizar este patrimônio de forma sustentável.

Uma imensa barreira para a conservação de florestas tropicais é a lacuna de conhecimentos sobre essas regiões. A cada ano são descritas inúmeras novas espécies, porém ainda existem áreas pouco conhecidas, e os recursos humanos e investimentos continuam limitados. Além disso, faltam políticas claras que definam prioridades das ações no que se refere à aplicação dos recursos humanos e financeiros, de forma que eles

atendam à urgência de reverter o processo de degradação (CONSERVATION INTERNATIONAL DO BRASIL *et al.*, 2000).

Na Mata Atlântica, Myrtaceae destaca-se entre as famílias com grande potencial econômico a ser explorado. As espécies brasileiras da família geralmente não produzem madeiras valiosas, restringindo-se ao fornecimento de lenha, à utilização em pequenas peças ou objetos e outras formas de uso local (MARCHIORI & SOBRAL, 1997). Por outro lado, há numerosas espécies frutíferas, algumas comercialmente importantes, como a goiabeira, *Psidium guajava* L., a jabuticabeira, *Plinia cauliflora* (Mart.) O. Berg, e a pitangueira, *Eugenia uniflora* L. Essas espécies representam apenas uma pequena fração do grande potencial econômico da família, tendo em vista o grande número de frutos comestíveis produzidos por espécies não comerciais. Algumas delas estão desaparecendo da natureza antes mesmo que se tenha conhecimento básico de sua biologia (KAWASAKI & LANDRUM, 1997). Recentemente, 38 espécies de Myrtaceae, predominantemente dos gêneros *Eugenia* Mich. Ex L., *Myrceugenia* O. Berg e *Myrcia* DC. ex Guill., foram incluídas em uma lista de espécies-alvo para a conservação e restauração da biodiversidade do estado de São Paulo (RODRIGUES *et al.*, 2008). A seleção foi feita com base em listas de espécies ameaçadas de extinção (BIODIVERSITAS, 2006).

Myrtaceae possui 131 gêneros e cerca de 4.620 espécies (ANGIOSPERM PHYLOGENY GROUP, 2009) distribuídas por todo o globo, em especial em regiões tropicais e temperadas. Entre as generalidades morfológicas da família, podemos destacar folhas inteiras, opostas ou alternas, com glândulas oleíferas no limbo, nervura submarginal, com estípulas muito pequenas. As flores geralmente são hermafroditas, polistêmones, brancas e de simetria radial. A família tem sido tradicionalmente dividida em duas subfamílias, Leptospermoideae e Myrtoideae, esta última incluindo todas as espécies americanas, exceto o gênero monotípico *Tepualia* Griseb. (MARCHIORI & SOBRAL, 1997). Atualmente, a nova classificação infra-família proposta por WILSON *et al.* (2005) reconhece duas subfamílias, Myrtoideae e Psiloxylloideae, e 17 tribos. Todas as espécies brasileiras estão incluídas na Tribo Myrteae (*sensu* WILSON *et al.*, 2005). Representada no Brasil por aproximadamente 1.000 espécies, Myrtaceae é uma das famílias mais importantes do país (LANDRUM & KAWASAKI, 1997) destacando-se, com mais de uma centena de espécies, os gêneros *Eugenia* L., *Myrcia* DC. ex Guill. e *Calyptanthus* Sw., enquanto o restante dos gêneros possui menos de 60 espécies brasileiras (BARROSO & PERÓN, 1994; LANDRUM & KAWASAKI, 1997). Myrtaceae é uma das

famílias lenhosas dominantes em várias formações vegetais do Brasil, especialmente na Floresta Atlântica, onde mais de 50 espécies podem ocorrer sintopicamente (PEIXOTO & GENTRY, 1990; LANDRUM & KAWASAKI, 1997; TABARELLI & MANTOVANI, 1999; OLIVEIRA FILHO & FONTES, 2000; GUILHERME *et al.*, 2004). Em muitos dos remanescentes desse ecossistema, ela é a família com maior número de espécies e indivíduos e com maior área basal total (MORI *et al.*, 1983; TABARELLI & MATONVANI, 1999). Assim, o conhecimento das Myrtaceae é indispensável para o entendimento da ecologia e da história natural do Domínio Atlântico (GRESSLER *et al.*, 2006).

Uma das características importantes de Myrtaceae é a produção de óleos voláteis. Também chamados de óleos essenciais, eles constituem-se de uma mistura complexa de substâncias voláteis, lipofílicas e geralmente odoríferas que, de acordo com a definição da *International Standard Organization*, são extraídas de partes vegetais por hidrodestilação. Possuem viscosidade semelhante à dos óleos, e sua composição envolve uma ampla gama de compostos, como hidrocarbonetos terpênicos, álcoois simples e terpênicos, aldeídos, cetonas, fenóis, ésteres, éteres, óxidos, peróxidos, furanos, ácidos orgânicos, lactonas, cumarinas, até compostos contendo enxofre (SIMÕES & SPITZER, 2004).

Em geral, os componentes dos óleos voláteis podem ser classificados em derivados fenilpropanoídicos (aromáticos) ou terpenoídicos (formados por unidades de isopreno), de acordo com a sua origem biossintética. O primeiro grupo caracteriza-se por compostos com uma cadeia lateral de três átomos de carbono derivados de ácidos aminados aromáticos. Eles são formados via ácido chiquímico (Figura 1) que, por sua vez, é formado a partir da condensação do fosfoenolpiruvato e da eritrose-4-fosfato. O ácido chiquímico é responsável pela formação dos ácidos cinâmico e *p*-cumárico que, por meio de reduções, oxidações e ciclizações, formam os alilbenzenos (como safrol e eugenol), aldeídos aromáticos, propenilbenzenos (como isoeugenol e isosafrol) e cumarinas.

Os terpenóides, por sua vez, são substâncias cuja origem biossintética deriva de unidades do difosfato de isopentenila (IPP), que se origina a partir do ácido mevalônico (via do mevalonato - MVA), ou através de uma rota alternativa, 5-fosfato-1-desóxi-xilulose (DXP), também denominada de independente do MVA ou de fosfato de metileritritol (MEP) (ADAM & ZAPP, 1998).

Mais especificamente, animais e fungos biossintetizam IPP pela via MVA, enquanto que em vegetais superiores e eubactérias ele é produzido por ambas as rotas, simultaneamente (ADAM & ZAPP, 1998), porém em compartimentos celulares diferentes (BOUVIER *et al.*, 2005). Na via MVA, as reações biossintéticas ocorrem no citosol, enquanto a via DXP ocorre nos plastídios (DEWICK, 1997; DEWICK, 2002; DUDAREVA *et al.*, 2004).

Figura 1. Ciclo biossintético dos metabólitos secundários (adaptada de SIMÕES & SPITZER, 2003).

Os terpenos são sintetizados da condensação do IPP e seu isômero alílico DMAPP (difosfato de dimetilalila). A adição seqüencial cabeça-cauda de unidades de IPP com DMPP forma o difosfato de geranila (GPP) e difosfato de farnesila (FPP), sendo aceito que a formação do GPP ocorre em plastídeos e do FPP, no citosol. Esses dois componentes servem como precursores dos monoterpenos e sesquiterpenos, respectivamente (Figura 2).

Terpenos sintetases ou ciclases catalisam as reações em que os esqueletos primários de terpenos são formados a partir destes substratos (AHARONI *et al.*, 2006).

Figura 2. Biossíntese de compostos terpênicos. Via clássica e a via alternativa (OWEN & PEÑUELAS, 2005).

Mono- e sesquiterpenos apresentam uma grande variedade estrutural, podendo ser acíclicos, monocíclicos ou bicíclicos, bem como apresentar diferentes grupos funcionais, podendo ser hidrocarbonetos insaturados, álcoois, aldeídos, cetonas, lactonas e tropolonas (BRUNETON, 2001; SIMÕES & SPITZER, 2004). Alguns exemplos destas estruturas são mostrados na Figura 3.

A atividade das enzimas que atuam na síntese de terpenos pode ser regulada indiretamente por fatores ambientais como temperatura, luz, umidade e altitude, e também pode ser estimulada por herbivoria. (AHARONI *et al.*, 2006; CHENG *et al.*, 2007; DUDAREVA

Figura 3. Exemplos de estruturas químicas de mono- e sesquiterpenos (em negrito) (modificado de SIMÕES & SPITZER, 2004).

et al., 2003; MAHMOUD & CROTEAU, 2001; BROUN *et al.*, 2006; PHILLIPS, BOHLMANN & GERSHENZON, 2006).

A síntese de óleos voláteis é relativamente restrita em gimnospermas (com exceção das coníferas) e em angiospermas monocotiledôneas (com exceção de gramíneas e Zingiberaceae). A maior parte das espécies que produzem tais compostos são angiospermas eudicotiledôneas, principalmente pertencentes a Lauraceae, Rutaceae, Asteraceae, Rosaceae, Pinaceae, Apiaceae, Myristicaceae, Lamiaceae e Myrtaceae (SIMÕES & SPITZER, 2004). Estes metabólitos podem ocorrer em estruturas especializadas, como células parenquimáticas diferenciadas (Lauraceae, Myrtaceae, Piperaceae, Poaceae), em tricomas glandulares (Lamiaceae) ou canais oleíferos (Apiaceae e Asteraceae). Eles podem também estar estocados em certos órgãos, como flores (como na rosa), folhas (como em louro, melissa e eucalipto), cascas do caule (como em canelas), madeira (como no pau-rosa), rizomas (como no gengibre), frutos (como no anis-estrelado) ou sementes (como na noz-noscada).

Durante muito tempo, a produção de substâncias odoríferas foi considerada um desperdício fisiológico, assim como os outros produtos do metabolismo secundário vegetal. Atualmente, sabe-se que estes compostos possuem funções fisiológicas e ecológicas específicas e estão diretamente envolvidos na interação da planta com os fatores bióticos e abióticos de seu ambiente (SIMÕES & SPITZER, 2004; HARBORNE, 2001). Diversos estudos demonstram o envolvimento das substâncias voláteis na atração e orientação de polinizadores (DUDAREVA *et al.*, 2003; HARBORNE, 2001), proteção de folhas e meristemas contra perda de água e aumento da temperatura (HOLZKE *et al.*, 2006;), proteção contra predadores e infestantes (AIMURA *et al.*, 2008; EFFERMET *et al.*, 2008; KELSEY *et al.*, 1984), entre outras.

Além de seu significado ecológico, o interesse no estudo de óleos essenciais está relacionado à sua importância econômica. Diversos componentes são utilizados em escala industrial para a produção de perfumes, cosméticos, produtos alimentares, farmacêuticos e de higiene, devido às suas ações terapêuticas, flavorizantes e aromatizantes. O uso de plantas aromáticas na medicina popular também é bastante difundido, em especial no tratamento de infecções microbianas, inflamações, dores, eczemas. Entre as propriedades farmacológicas encontradas em óleos voláteis estão a atividade antifúngica (RASOOLI &

ABYANEH, 2004), repelente (LWANDE *et al.*, 1999; CHENG *et al.*, 2004), anti-inflamatória (JUERGENS *et al.*, 1998), analgésica (SILVA *et al.*, 2003), etc.

Muitas espécies de Myrtaceae são exploradas economicamente em função de seus óleos voláteis, como vários representantes do gênero *Eucalyptus* L'Hér., que produzem monoterpenos como o citronelal, com propriedades antissépticas, e o cravo-da-índia (*Syzygium aromaticum* (L.) Merr. & Perry), que produz o fenilpropanóide eugenol, cujas propriedades antimicrobianas e anestésicas justificam seu amplo uso na odontologia (POURGHOLAMI *et al.*, 1999; JUERGENS *et al.*, 1998).

Existe, porém, um grande número de espécies aromáticas cujos óleos não foram investigados quanto ao potencial farmacológico. Neste aspecto, um grande problema envolvido na perda da biodiversidade é a conseqüente perda de recursos, antes mesmos que estes tenham sido estudados. As florestas tropicais contêm mais da metade das espécies de plantas, estimadas por alguns autores em cerca de 500.000 (CONTE, 1996). Estima-se que menos de 5% das espécies vegetais já foram estudadas a fim de se verificar seu potencial medicinal, e uma porcentagem ainda menor foi avaliada sob aspectos biológicos (CONTE 1996, CECHINEL FILHO & YUNES, 1998).

Embora seja determinada geneticamente, sendo em geral específica para um determinado órgão e para um determinado estágio de desenvolvimento, a composição química dos óleos voláteis pode variar significativamente em função de fatores ambientais (BYLAITÈ *et al.*, 2000; JAKOBSEN & OLSEN, 1994; OMATA *et al.*, 1991).

Considerando-se a relação intrínseca entre as rotas biossintéticas dos óleos voláteis e o metabolismo primário, é esperado que fatores que afetam a fotossíntese, como luz e temperatura, promovam alterações na síntese desses metabólitos secundários. Em *Quercus ilex* L., parece haver uma correlação positiva entre produção de monoterpenos e intensidade luminosa e temperatura (STAUDT, *et al.*, 2003).

Da mesma forma, é sabido que injúrias mecânicas, reconhecimento de patógeno, herbivoria e sinalização planta-a-planta podem desencadear mudanças no vegetal, promovendo alterações no metabolismo e alocação de metabólitos secundários. Alterações significativas foram observadas na síntese de óleos essenciais de *Pinus ponderosa* Dougl. após ataque de herbívoros (BARNOLA *et al.*, 1994), assim como em *Zea mays* Vell. (DEGENHARDT *et al.*, 2003; RASMANN *et al.*, 2005). Em Myrtaceae, este fenômeno ainda não foi relatado, mas isto não significa que ele não ocorra (KESZEI *et al.*, 2008).

Além das variações promovidas por fatores extrínsecos, a existência de quimiotipos, ou raças químicas, é muito freqüente em plantas com óleos voláteis. O tomilho (*Thymus vulgaris* L.) na Europa, por exemplo, apresenta oito quimiotipos diferentes, sendo encontrados sete quimiotipos na França, os quais apresentam como constituinte majoritário timol, carvacrol, geraniol, linalol, α -terpineol, trans-4-tuanol ou cis-8-mircenol e um na Espanha, rico em cineol (THOMPSON *et al.*, 2003). A existência de quimiotipos também já foi observada em algumas Myrtaceae, como na espécie australiana *Melaleuca alternifolia* Cheel: em um quimiotipo predomina o 1,8-cineol, um segundo contém níveis mais elevados de terpinoleno e um terceiro acumula o terpinen-4-ol. Existem ainda outros dois quimiotipos que acumulam tanto terpinoleno quanto terpinen-4-ol, em proporções inversas (RUSSEL & SOUTHWELL, 2003). A análise do óleo essencial de *Eugenia uniflora* L. também revelou três quimiotipos: o primeiro, ocorrendo no noroeste do Brasil e na Nigéria, apresenta como constituinte majoritários selina-1,3,7(11)-trien-8-ona e oxidoselina-1,3,7(11)-trien-8-ona; no segundo, encontrado no sudeste do Brasil, predominam α - e β -selineno e o nerolidol e o terceiro, ocorrendo na Argentina, acumula em maiores níveis pulegona, carvona, limoneno e nerolidol (WEYERSTAHL *et al.*, 1988; HENRIQUES *et al.*, 1993). Em *Chamelaucium uncinatum* Schauer, endêmica da região sudoeste da Austrália, a presença de citronelal é associada ao ecotipo considerado mais evoluído (EGERTON-WARBURTON *et al.*, 1998). Em alguns exemplos de *Eucalyptus* L'Hér., a presença de um único composto ou de um grupo de compostos pode ser característica de unidades taxonômicas bem definidas, tais como piperitol e piperitona em Piperitae (BIGNELL *et al.*, 1998).

Variações infra-específicas já foram observadas em algumas espécies de Myrtaceae brasileiras, como *Eugenia brasiliensis* Lam., para qual variedades diferentes apresentaram dois perfis químicos distintos, um com predomínio de α -selineno e o outro, de β -selineno (FISCHER *et al.*, 2005). Em diferentes morfo-tipos de *Pimenta pseudocaryophyllus* (Gomes) Landrum, já foram identificados um quimiotipo rico em eugenol e outro rico em metil-eugenol (LIMA *et al.*, 2006). Em *Myrceugenia cucullata* D. Legrand, LIMBERGER *et al.* (2005) identificaram dois quimiotipos, um rico em *E*-nerolidol e outro em (-)- α - e (-)- β -pinenos. A presença destes constituintes químicos indica a presença de enzimas biossintéticas específicas, podendo, assim, ter grande importância taxonômica.

Variabilidades no teor e na composição de óleos voláteis observadas em diferentes populações de uma determinada espécie englobam, portanto, muitos aspectos.

Freqüentemente, a dissociação entre o componente genético e a influência das características ambientais não é simples e requer estudos com espécimes de diferentes origens cultivadas sob as mesmas condições (LEE *et al.*, 2002).

A despeito da ampla variabilidade dos óleos voláteis e do grande número de fatores que a influenciam, estudos relacionando aspectos como fenologia e características ambientais a variações no conteúdo e composição destes compostos em Myrtaceae ainda são escassos. A grande maioria dos trabalhos nesta área foi realizada com espécies australianas (Leptospermoidae), em especial dos gêneros *Eucalyptus* e *Melaleuca* L., os quais são de grande importância econômica para a região. A existência de variabilidade nos óleos voláteis de Myrtaceae nativas de ecossistemas brasileiros ainda é praticamente desconhecida.

Dessa forma, tendo em vista o potencial econômico de óleos voláteis e a grande importância de Myrtaceae no que diz respeito à conservação da Mata Atlântica, o objetivo geral deste estudo foi analisar a variação do rendimento e da composição de óleos voláteis em espécies da família ocorrentes em áreas remanescentes do bioma.

O trabalho está dividido em capítulos, nos quais foram abordados diferentes fatores de variabilidade. O Capítulo 2 trata da análise diuturna de óleos voláteis em Myrtaceae; o Capítulo 3, da variabilidade sazonal destes compostos e o Capítulo 4, das variações entre populações de dois diferentes fragmentos de Mata Atlântica. Finalmente, no Capítulo 5 são apresentadas as análises de atividades biológicas de alguns destes óleos voláteis.

2. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ADAM, K.; ZAPP, J. Biosynthesis of the isoprene units of chamomile sesquiterpenes. *Phytochemistry*, v.48, n.6, p.953-959, 1998.

AHARONI, A.; JONGSMA, M.A.; KIM, T.Y.; RI, M.B.; GIRI, A.P.; VERSTAPPEN, F.W.A.; SCHWAB, W.; BOUWMEESTER, H.J. Metabolic engineering of terpenoid biosynthesis in plants. *Phytochemistry Reviews*, v.5, n.1, p.49-58, 2006.

AIMURA, G.I.; KÖPKE, S.; KUNERT, M.; VOLPE, V.; DAVID, A.; BRAND, P.; DABROWSKA, P.; MEFFEI, M.E.; BOLAND, W. effects of feeding *Spodoptera littoralis* on lima bean leaves: IV.

Diurnal and nocturnal damage differentially initiate plant volatile emission. *Plant Physiology*, v.146, p.965-973, 2007.

ANGIOSPERM PHYLOGENY GROUP. *Myrtales. Myrtaceae*. Disponível em <http://www.mobot.org/MOBOT/research/APweb/>. Acesso em 10 jan. 2009.

BARNOLA, L.F.; HASEGAWA, M; CEDEÑO, A. Intraindividual variations of volatile terpene contents in *Pinus caribea* needles and its possible relationship with *Alta laevigata* herbivory. *Biochemical Systematics and Ecology*, v.25, p.707-715, 1997.

BARROSO, G.M. & PERÓN, V. *Myrtaceae*. In: Reserva Ecológica de Macaé de Cima, Nova Friburgo, RJ. Aspectos florísticos das espécies vasculares. (M.P.M. Lima & R.R. Guedes-Bruni, eds.). Rio de Janeiro: Jardim Botânico do Rio de Janeiro, 1994, v.1, p.261-302.

BIGNELL, C.M.; DUNLOP, P.J.; BROPHY, J.J. Volatile leaf oils of some south-western and southern Australian species of the genus *Eucalyptus* (series 1). Part XIX. *Flavour and Fragrance Journal*, v.13, n.2, 131-139, 1998.

BIODIVERSITAS. *Boletim de espécies ameaçadas - 2006*. Disponível em <http://www.biodiversitas.org.br/boletim/EAO/>. Acesso em 10 jan. 2009.

BOUVIER, F.; RAHIER, A.; CAMARA, B. Biogenesis, molecular regulation and function of plant isoprenoids. *Progress in Lipid Research*, v.44, p.357-429, 2005.

BROUN, P.; LIU, Y.; QUEEN, E.; SCHWARZ, Y.; ABENES, M.L.; LEIBMAN, M. Importance of transcription factors in the regulation of plant secondary metabolism and their relevance to the control of terpenoid accumulation. *Phytochemistry Reviews*, v.5, p.27-38, 2006.

BRUNETON, J. *Farmacognosia Fitoquímica Plantas medicinales*. 2. ed. Zaragoza: Editora Acribia, 2001, 1099p.

BYLAITÈ, E.; VENSKUTONIS, R.; ROOZEN, J.; POSTHUMNUS, M. A. Composition of essential oil of costmary [*Balsamita major* (L.) Desf.] at different growth phases. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, v.48, p.2409-2414, 2000.

CECHINEL FILHO, V.; YUNES, R.A. Estratégias para a obtenção de compostos farmacologicamente ativos a partir de plantas medicinais. Conceitos sobre modificação estrutural para otimização da atividade. *Química Nova*, v.21, p.99-105, 1998.

CHENG, A.X.; LOU, Y.G.; MAO, Y.B.; LU, S.; WANG, L.J.; CHEN, X.Y. Plant terpenoids: biosynthesis and ecological functions. *Journal of Integrative Plant Biology*, v.49, n.2, p.179-186, 2007.

CHENG, S.; LIU, J.; TSAI, K.; CHEN, W.; CHANG, S. Chemical composition and mosquito larvicidal activity of essential oils from leaves of different *Cinnamomum osmophloeum* provenances. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, v52, p4395-4400, 2004.

CONSERVATION INTERNATIONAL DO BRASIL; FUNDAÇÃO SOS MATA ATLÂNTICA; FUNDAÇÃO BIODIVERSITAS INSTITUTO DE PESQUISAS ECOLÓGICAS; SECRETARIA DO MEIO AMBIENTE DO ESTADO DE SÃO PAULO SEMAD/INSTITUTO ESTADUAL DE FLORESTAS-MG. 2000. In: Helenice Heringer e Magda Maciel Montenegro (eds.). *Avaliação e ações prioritárias para a conservação da biodiversidade da Mata Atlântica e Campos Sulinos*. Ministério do Ambiente, Brasília, DF. 42 p.

CONTE, L.A. *Shaman pharmaceuticals' approach to drug development*. In: M.J. Balick, E. Elisabetsky & A.S. Laird (eds.). *Medicinal resources of the Tropical Forest - biodiversity and its importance to human health*. New York: Columbia University Press, 1996, p. 94-100.

DEGENHARDT, J.; GERSHENZON J.; BALDWIN, I.T.; KESSLER, A. Attracting friends to feast on foes: engineering terpene emission to make crop plants more attractive to herbivore enemies. *Current Opinion in Biotechnology*, v.14, p.169-176, 2003.

DEWICK, P. M. The biosynthesis of C5-C25 terpenoid compounds. *Natural Products Reports*, v.19, p.181-222, 2002.

DEWICK, P.M. *Medicinal natural products: a biosynthetic approach*. Chichester, New York: Wiley, 1997. p.152-194.

DUDAREVA, N.; MARTIN, D.; KISH, C.M.; KOLOSOVA, N.; GORENSTEIN, N.; FÄLDT, J.; MILLER, B.; BOHLMANN, J. (E)- β -ocimene and myrcene synthase genes of floral scent biosynthesis in Snapdragon: function and expression of three terpene synthase genes of a new terpene synthase subfamily. *Plant Cell*, v.15, n.5, p.1227-1241, 2003.

DUDAREVA, N.; PICHERSKY, E.; GERSHENZON, J. Biochemistry of Plant Volatiles. *Plant Physiology*, v.135, p.1893-1902, 2004.

EFFEMERT, U.; DINSE, C.; PIECHULLA, B. Influence of green leaf herbivory by *Manduca sexta* floral volatile emission by *Nicotiana suaveolens*. *Plant Physiology*, v.146, p.1996-2007, 2008.

EGERTON-WARBURTON, L. M.; GHISALBERTI, E. L.; CONSIDINE, J. A.; Infraespecific variability in the volatile leaf oils of *Chamelaucium uncinatum* (Myrtaceae). *Biochemical Systematics and Ecology*, v.26, p.973-888, 1998.

FISCHER, D.C.H.; LIMBERGER, R.P.; HENRIQUES, A.T.; MORENO, P.R.H. Essential oils from leaves of two *Eugenia brasiliensis* specimens from southeastern Brazil. *Journal of Essential Oil Research*, v.17, n.5, 499-500, 2005.

FUNDAÇÃO IBGE - INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA. *Mapa de vegetação do Brasil*. Disponível em <http://mapas.ibge.gov.br/vegetacao/viewer.htm>. Acesso em 10 jan. 2009.

FUNDAÇÃO SOS MATA ATLÂNTICA E INPE (INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS). *Atlas dos remanescentes florestais da Mata Atlântica e ecossistemas associados no período de 2000–2005*. São Paulo: Fundação SOS Mata Atlântica e INPE, 2005, 472p.

GALINDO-LEAL, C. & CÂMARA, I.G. *Atlantic forest hotspots status: an overview*. In: C. Galindo-Leal & I.G. Câmara (eds.). *The Atlantic Forest of South America: biodiversity status*,

threats, and outlook. Washington, D.C.: Center for Applied Biodiversity Science e Island Press, 2003, p.3-11.

GRESSLER, E.; PIZO, M.A.; MORELLATO, L.P.C. Polinização e dispersão de sementes em Myrtaceae do Brasil. *Revista Brasileira de Botânica*, v.29, n.4, p.509-530, 2006.

GUILHERME, F.A.G., MORELLATO, L.P.C. & ASSIS, M.A. Horizontal and vertical tree community structure in a lowland Atlantic rain forest, Southeastern Brazil. *Revista Brasileira de Botânica*, v.27, p.725-737, 2004.

HARBONE, J.B. Twenty-five years of chemical ecology. *Natural Products Reports*, v.18, n.4, p.361-379, 2001.

HENRIQUES, A.T.; SOBRAL, M.E.; CAUDURO, A.D.; SCHAPOVAL, E.E.S.; BASSANI, V.L.; LAMATY, G.; MENUT, C.; BESSIERE, J.M. Aromatic plants from Brazil II. The chemical composition of some *Eugenia* essential oils. *Journal of essential oil research*, v.5, n.5, 501-505, 1993.

HOLZKE, C., HOFFMANN, T., JAEGER, L., KOPPMANN, R., ZIMMER, W., 2006. Diurnal and seasonal variation of monoterpene and sesquiterpene emissions from Scots pine (*Pinus sylvestris* L.). *Atmospheric Environment*, v.40, p.3174-3185, 2006.

JAKOBSEN, H. B.; OLSEN, C. E. Influence of climatic factors on emission of flower volatiles in situ. *Planta*, v.192, p.365-371, 1994.

JOLY, C.A.; CASATI, L., BRITO, M.C.W.; MENEZES, N.A.; RODRIGUES, R.R., BOLZANI, W.S. 2008. *Histórico do Programa Biota/FAPESP*. In: Governo do Estado de São Paulo, Secretaria do Meio Ambiente, FAPESP (eds.) Diretrizes para a conservação e restauração da biodiversidade no Estado de São Paulo. São Paulo: Governo do Estado de São Paulo, p.44-55.

JUERGENS, U. R.; STOBBER, M.; VETTER, H. Inhibition of cytokine production and arachidonic acid metabolism by eucalyptol (1,8-cineole) in human blood monocytes in vitro. *European Journal of Medical Research*, v.3, p.407-412, 1998.

KAWASAKI, M.L. & LANDRUM, L.R. A rare and potentially economic fruit of Brazil cambuci, *Campomanesia phaea* (Myrtaceae). *Economic Botany*, v.51, p.403-407, 1997.

KELSEY, R. G.; REYNOLDS, G. W, RODRIGUEZ, E. The chemistry of biologically active constituents secreted and stored in plant glandular trichomes. In: E. Rodrigues; P. L. Healey; I. Mentha (eds.). *Biology and chemistry of plant trichomes*. New York: Plenum Press, 1984, p.113-132.

KESZEI, A.; BRUBAKERB, C.L.; FOLEY, W.J. A molecular perspective on terpene variation in Australian Myrtaceae. *Australian Journal of Botany*, v.56, p.197–213, 2008.

LANDRUM, L.R.; KAWASAKI, M.L. The genera of Myrtaceae in Brazil: an illustrated synoptic treatment and identification keys. *Brittonia*, v.49, n.4, p.508-536, 1997.

LEE, L.S.; BROOKS, L.O.; HOMER, L.E.; ROSETTO, M.; HENRY, R.J. & BAVERSTOCK, P.R. Geographic variation in the essential oils and morphology of natural populations of *Melaleuca alternifolia* (Myrtaceae). *Biochemical Systematics and Ecology*, v.30, p.343-360, 2002.

LIMA, M.E.L.; CORDEIRO, I.; YOUNG, M.C.M.; SOBRAL, M.E.G., MORENO, P.R.H. Antimicrobial activity of the essential oil from two specimens of *Pimenta pseudocaryophyllus* (Gomes) L. R. Landrum (Myrtaceae) native from São Paulo State- Brazil, *Pharmacologyonline*, v.3, p.589-593, 2006.

LIMBERGER, R.P.; SIMÕES-PIRES, C.; SOBRAL, M.G.E.; MENU, C.; BESSIERE, J.M.; HENRIQUES, A.T. Essential oils from some *Myrceugenia* species (Myrtaceae). *Flavor and Fragrance Journal*, v.17, n.5, 341-344, 2002.

LWANDE, W.; NDAKALA, A.J.; HASSANALI, A.; MOREKA, L.; NYANDAT, E. NDUNGU, M.; GITU, P., M.; MALONZA, M.M.; PUNYUA, D.K. *Gynandropsis gynandra* essential oil and its constituents as tick (*Rhipicephalus appendiculatus*) repellents. *Phytochemistry*, v.50, p.401-405, 1999.

MAHMOUD, S.S.; CROTEAU, R.B. Metabolic engineering of essential oil yield and composition in mint by altering expression of deoxyxylulose phosphate reductoisomerase and menthofuran synthase. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, v.98, p.8915-8920, 2001.

MANTOVANI, W. *A degradação dos biomas brasileiros*. In: W.C. Ribeiro (ed.). Patrimônio ambiental brasileiro. São Paulo: Editora Universidade de São Paulo, 2003, p.367- 439.

MARCHIORI, J.N.C. & SOBRAL, M. *Dendrologia das angiospermas: Myrtales*. Santa Maria: Editora da UFSM. 1997, 304p.

MORI, S.A.; BOOM, B.M.; DE CARVALINO, A.M.; SANTOS, T.S. Ecological Importance of Myrtaceae in an Eastern Brazilian Wet Forest *Biotropica*, v.15, p.68-70, 1983.

MYERS, N.; MITTERMEIER, R.A.; MITTERMEIER, C.G.; FONSECA, G.A.B.; KENT, J. Biodiversity hotspots for conservation priorities. *Nature*, v.403, p.853-845, 2003.

OLIVEIRA FILHO, A.T. & FONTES, M.A. Patterns of floristic differentiation among Atlantic forests in southeastern Brazil, and the influence of climate. *Biotropica*, v.32, p.793-810, 2000.

OLIVEIRA-FILHO, A.T. & M.A.L. FONTES. Patterns of floristic differentiation among Atlantic Forests in southeastern Brazil and the influence of climate. *Biotropica*, v.2, n.4b, p.793-810, 2000.

OMATA, A.; YOMOGIDA, S.; NAKAMURA, S. OHTA; T.; IZAWA, Y.; WATANABE, Y. (1991) The scent of lotus flowers . *Journal of Essential Oil Research*, v.3, p.435-440, 1991.

OWEN, S.M.; PEÑUELAS, J. Opportunistic emissions of volatile isoprenoids. *Trends in Plant Science*, v.10, n.9, p.420-426, 2005.

PEIXOTO, A.L. & GENTRY, A.H. Diversidade e composição florística da mata de tabuleiro na Reserva Florestal de Linhares (Espírito Santo, Brasil). *Revista Brasileira de Botânica*, v.13, p.19-25, 1990.

PHILLIPS, M.A.; BOHLMANN, J.; GERSHENZON, J. Molecular regulation of induced terpenoid biosynthesis in conifers. *Phytochemistry Reviews*, v.5, p.179-189, 2006.

POURGHOLAMI, M.H.; KAMALINEJAD, M.; JAVADI, M.; MAJZOUB, S.; SAYYAH, M. Evaluation of the anticonvulsant activity of the essential oil of *Eugenia caryophyllata* in male mice. *Journal of Ethnopharmacology*, v.64, p.167-171, 1999.

RASMANN, S.; KOLLNER, T.G.; DEGENHARDT, J.; HILTPOLD, I.; TOEPFER, S.; KUHLMANN, U.; GERSHENZON, J.; TURLINGS, T.C.J. Recruitment of entomopathogenic nematodes by insect-damaged maize roots. *Nature*, v.434, p.732-737, 2005.

RASOOLI, I.; ABYANEH, M.R. Inhibitory effects of Thyme oils on growth and aflatoxin production by *Aspergillus parasiticus*. *Food Control*, v.15, p.479-483, 2004.

RIZZINI, C.T. Tratado de fitogeografia do Brasil. São Paulo: Ed. Da Universidade de São Paulo, 1979, v.2, 374p.

RODRIGUES, R.R.; JOLY, C.A.; BRITO, M.C.W.; PAESE, A.; METZGER, J.P.; CASATTI, L.; NALON, M.A.; MENEZES, N.; IVANAUSKA, N.M.; BOLZANI, V. & BONONI, V.L.R. *Diretrizes para conservação e restauração da biodiversidade no Estado de São Paulo*. Governo do Estado de São Paulo, São Paulo, 2008, 238p.

RUSSEL, M.F.; SOUTHWELL, I. A. Monoterpenoid accumulation in 1,8-cineole, terpinolene and terpinen-4-ol chemotypes of *Melaleuca alternifolia* seedlings. *Phytochemistry*, v.62, p.683-689, 2003.

SILVA, J.; ABEBE, W.; SOUSA, S. M.; DUARTE, V.G; MACHADO, M. I. L.; MATOS, F. J. A. Analgesic and anti-inflammatory effects of essential oils of Eucalyptus. *Journal of Ethnopharmacology*, v.89, p.277-283, 2003..

SILVA, J.M.C & C.H.M. CASTELETI. 2003. *Status of the biodiversity of the Atlantic Forest of Brazil*. In: C. Galindo-Leal & I.G. Câmara (eds.). The Atlantic Forest of South America: biodiversity status, trends, and outlook. Washington, D.C.: Center for Applied Biodiversity Science e Island Press, p.43-59.

SILVA, J.M.C.; C.H.M. CASTELETI. *Status of the biodiversity of the Atlantic Forest of Brazil*. In: C. Galindo-Leal & I.G. Câmara (eds.). The Atlantic Forest of South America: biodiversity status, trends, and outlook. Washington, D.C.: Center for Applied Biodiversity Science e Island Press, 2003, p. 43-59.

SILVA, J.M.C.; SOUSA, M.C.; CASTELLETTI, C.H.M. Areas of endemism for passerine birds in the Atlantic Forest. *Global Ecology and Biogeography*, v.13, p.85-92, 2004.

SIMÕES, C.M.O.; SPITZER, V. Óleos voláteis. In: SIMÕES, C.M.O.; SCHENKEL, E.P.; GOSMANN, G.; MELLO, J.C.P.; MENTZ, L.A.; PETROVICK, P.R., orgs. *Farmacognosia: da planta ao medicamento*. 3.ed. Porto Alegre: UFRGS; Florianópolis: UFSC, 2001. cap.18, p.397-420.

STAUDT, M., MANDEL, N., JOFFRE, R., RAMBAL, S., Intraspecific variability of monoterpene composition emitted from *Quercus ilex* leaves. *Canadian Journal of Forestry Research*, v.31, p.174-180, 2001.

TABARELLI, M. & MANTOVANI, W. A riqueza de espécies arbóreas na floresta atlântica de encosta no estado de São Paulo (Brasil). *Revista Brasileira de Botânica*, v.22, p.217-223, 1999.

TABARELLI, M.; PINTO, L.P.; SILVA, J.C.C.; HIROTA, M.M.; BEDÊ, L.C. Desafios e oportunidades para a conservação da Mata Atlântica brasileira. *Megadiversidade*, v.1, n.1, p.132-138.

TABARELLI, M.; PINTO, L.P.; SILVA, J.M.C.; HIROTA, M.M.; BEDÊ, L.C. Desafios e oportunidades para a conservação da Mata Atlântica brasileira. *Megadiversidade*, v.1, n.1, p.132-138, 2005.

THOMPSON, J.D., CHALCHAT, J.C., MICHET, A., LINHART, Y.B. & EHLERS, B. Qualitative and quantitative variation in monoterpene co-occurrence and composition in the essential oil of *Thymus vulgaris* chemotypes. *Journal of Chemical Ecology*, v.29, p.859-880, 2003.

VELOSO, H.P.; GOES-FILHO, L. Fitogeografia brasileira, classificação fisionômica ecológica da vegetação neotropical. Salvador: Projeto RADAMBRASIL, 1982, 80 p.

WEYERSTAHL, P.; MARSCHALL-WEYERSTAHL, H.; CHRISTIANSEN, C.; OGUNTIMEN, B. O.; ADEOYE, A.O. Volatile constituents of *Eugenia uniflora* leaf oil. *Planta Medica*, v.54, p.546-549, 1988.

WILSON, P.G., O'BRIEN, M.M., HESLEWOOD, M.M. & QUINN, C.J. Relationships within Myrtaceae sensu lato based on a matK phylogeny. *Plant Systematics and Evolution*, v.251, p.3-19, 2005.

CAPÍTULO 2

Variações diuturnas nos óleos voláteis
de *Campomanesia guaviroba* (DC.)
Kiaersk. e *Myrcia splendens* (Sw.) DC.
(Myrtaceae)

ABSTRACT

Volatile oil yield and chemical composition may present fluctuations during the day. However, there is little scientific information about diurnal variability in Myrtaceae species essential oils. Thus, the present study aimed at evaluating chemical composition of volatile oils of *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. and *Myrcia splendens* (Sw.) DC. during 24 hours, in two different seasons of the year. Sesquiterpenes were the major constituents for both species. For *C. guaviroba*, the major compounds were α -cadinol and δ -cadinene, whilst for *M. splendens* the most abundant components were β -elemene, α -amorphene and α -cadinol. No significant variations were verified during the day for the volatile oil yield or for the proportions of the mains constituents in *M. splendens* and *C. guaviroba*, neither in the summer nor in the winter. However, for both species, great individual variability was observed. Significant difference was found only for the increase of the oil yield in the summer for both analyzed species. The obtained results indicate that there is no diurnal pattern of variation for the volatile oils of *M. splendens* and *C. guaviroba*.

RESUMO

A composição e o rendimento de óleos voláteis podem sofrer flutuações ao longo do dia. No entanto, a existência de variabilidade diuturna é pouco conhecida para óleos voláteis de Myrtaceae. Assim, este estudo teve por objetivo a avaliação da composição dos óleos voláteis de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. e *Myrcia splendens* (Sw.) DC. ao longo de 24 h, em duas épocas do ano. Os sesquiterpenos foram os constituintes mais abundantes para as duas espécies. Para *C. guaviroba*, os compostos majoritários foram α -cadinol e δ -cadineno, enquanto para *M. splendens*, estes foram β -elemeno, α -amorfeno e α -cadinol. Não foram verificadas variações significativas ao longo do dia no rendimento do óleo ou no teor dos constituintes majoritários, no verão ou no inverno, em nenhuma das espécies. Entretanto, para as duas espécies, observou-se grande variabilidade individual. A única diferença significativa observada foi o aumento no rendimento de óleos voláteis no verão, tanto para *C. guaviroba* quanto para *M. splendens*. Os resultados obtidos indicam que não existe um padrão de variação diuturna na síntese de componentes voláteis de folhas de *M. splendens* e *C. guaviroba*.

1. INTRODUÇÃO

Variações diuturnas no rendimento e na composição de óleos voláteis já foram observadas em diversas espécies vegetais (RAMEZANI *et al.*, 2009; ASHGARI *et al.*, 2002; YALDIZ *et al.*, 2005, AYANOGLU *et al.*, 2005).

As alterações nos compostos voláteis podem ser resultantes das mudanças nos fatores ambientais que ocorrem ao longo do dia, como as diferenças de temperatura e irradiância (JAKOBSEN & OLSEN, 1994) ou de um controle endógeno do ritmo de produção. Neste caso, a variação se mantém quando a planta é submetida a condições controladas, sob luz ou escuro contínuo. O período de duração de um ciclo é de aproximadamente 24h, sendo chamado, portanto, de ritmo circadiano (ZHUANG *et al.*, 2008; PICCONE *et al.*, 2004; ALTENBURGER & MATILE, 1988; MATILE & ALTENBURGER, 1988).

Muitos são os estudos realizados acerca das alterações do aroma emitido pelas flores ao longo do dia, fenômeno que está relacionado ao ciclo de atividade do polinizador, uma vez que os voláteis florais desempenham papel fundamental na atração destes agentes (HARBORNE, 1993; 2001). Os mais recentes têm demonstrado a complexidade da emissão diurna do aroma floral: Embora ela seja sincronizada para a maior parte dos componentes, vários mecanismos independentes controlam a produção, o acúmulo e a liberação dos diferentes compostos. Em alguns casos, o aroma constitui-se tanto de substâncias cuja regulação se dá pelo ritmo circadiano, quanto por outras reguladas pelas condições ambientais, em especial pela luz (HENDEL-RAHMANIM *et al.*, 2007).

Apesar de ter sido mais amplamente investigada para os voláteis florais, a variação diuturna também já foi observada em óleos essenciais de outros órgãos vegetais. LOPES *et al.* (1997) observaram diferenças na composição dos óleos de folhas de *Virola surinamensis* Warb. (Myristicaceae) ao longo de 24 horas. Em folhas de *Ocimum gratissimum* L. (Lamiaceae) também foi observada apresenta variação diuturna na produção de eugenol, componente majoritário do óleo (SILVA *et al.*, 1999). Em *Citrus sinensis* (L.) Osbeck (Rutaceae), foram observadas diferenças significativas somente no rendimento do óleo das folhas, não havendo alterações em sua composição (HOPFINGER *et al.*, 1979). Por outro lado, para a leguminosa *Copaifera trapezifolia* Hayne, não foram observadas variações no

rendimento ou na composição do óleo essencial das folhas ao longo do dia (VEIGA *et al.*, 2006).

Embora seja um fenômeno de ampla ocorrência em espécies produtoras de óleos voláteis, a maioria dos estudos de variação diuturna nessa classe é realizado com espécies herbáceas, em especial aquelas pertencentes a Asteraceae e Lamiaceae com interesse econômico. Apenas mais recentemente as espécies arbóreas vêm sendo investigadas neste aspecto (VEIGA & PINTO, 2006; HOLZKE *et al.*, 2006; PIO *et al.*, 2005). Adicionalmente, ainda existe uma escassez de estudos visando à investigação das variações diuturnas de espécies de Myrtaceae, em especial Myrtoideae. Embora algumas espécies já tenham tido a composição química de seus óleos analisada, a questão da variabilidade tem sido pouco estudada, como é o caso de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. e *Myrcia splendens* (Sw.) DC., ambas da subtribo Myrciinae.

C. guaviroba, assim como as outras espécies do gênero, ocorre principalmente na América tropical e subtropical. A maioria das espécies do gênero é conhecida como guabiroba e são cultivadas pelos seus frutos (MARCHIORI & SOBRAL, 1997; LANDRUM, 1986). Já *M. splendens*, conhecida como guamirim ou folha-miúda, distribui-se desde o México até o sul do Brasil (MORAIS & LOMBARDI, 2006; OLIVEIRA-FILHO & FONTES, 2000). É uma árvore de característica pioneira, recomendada para a recuperação de áreas degradadas e para a arborização urbana (LORENZI, 1998). Além disso, os frutos são bastante apreciados pela fauna, em especial espécies de Psittacidae (BRANDÃO, 2008). Não existem estudos da composição química do óleo volátil de *C. guaviroba*. Já para *M. splendens*, a composição química do óleo de um espécime da Costa Rica já foi avaliada (COLE *et al.*, 2007), porém variações na composição ainda não foram verificadas.

Dessa forma, tendo em vista a ampla ocorrência destas duas espécies de Myrtaceae em ecossistemas brasileiros e a escassez de informações sobre a variabilidade de seus óleos voláteis, o presente estudo teve como objetivo analisar a variação diuturna do conteúdo e da composição destes compostos em espécimes de *C. guaviroba* e *M. splendens* ocorrentes Parque Estadual das Fontes do Ipiranga (São Paulo, SP).

2. MATERIAL E MÉTODOS

2.1. Material vegetal

Folhas frescas de três indivíduos de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. e *Myrcia splendens* (Sw.) DC. foram coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga a cada três horas, de das 12h de 01/06/06 às 12h de 02/06/06 e das 12h de 03/12/06 às 12h de 04/12/06. Uma parte das folhas foi seca em estufa a 60°C até peso constante para a determinação do teor de água das folhas para o cálculo do rendimento dos óleos voláteis em função da massa seca (MS).

Exsicatas destes espécimes foram depositadas no Herbário do Instituto de Botânica de São Paulo sob os seguintes números de registro: Souza 04, Souza 80 e Souza 83, para *C. guaviroba*, e Árvore 774, Souza 81 e Souza 82 para *M. splendens*.

2.2. Análise química dos óleos voláteis

Os óleos voláteis obtidos foram obtidos das folhas frescas por hidrodestilação durante 4 horas em Aparelho tipo Clevenger (FARMACOPÉIA, 2001). O óleo foi separado da água no frasco florentino do aparelho de Clevenger, o qual foi lavado com pentano. Ao pentano adicionou-se sulfato de sódio anidro para a eliminação de eventuais resíduos de água. O pentano foi eliminado em evaporador rotatório a temperatura ambiente sob vácuo e o óleo foi pesado para determinação do rendimento.

Para a análise da composição química do óleo volátil, o óleo foi diluído em acetona na proporção 1:100, V:V e submetido à cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG-EM), utilizando-se cromatógrafo a gás Agilent (6890 Series) acoplado a espectrômetro de massas quadrupolo (5973), com uma coluna capilar DB-5 (30 m x 0,25 mm x 0,25 µm), operando a 70 eV. As temperaturas do injetor e do detector foram 250°C. A programação de temperatura do forno foi de 40°C por 1 min, 40 - 240°C a 3°C.min⁻¹, tendo hélio como gás de arraste (1 mL.min⁻¹), com tempo total de análise de 78 minutos.

2.3. Identificação dos componentes

A identificação dos componentes do óleo foi baseada na comparação entre o índice de retenção e o espectro de massas com amostras autênticas e dados retirados da literatura (ADAMS, 2007) ou, ainda, por comparação com espectros de massas registrados em banco de dados (Wiley 275). Exemplos de cromatogramas de íons totais e de espectros de massas dos constituintes químicos das espécies analisadas, bem como espectros dos bancos de dados, podem ser vistos nos Anexos II a X.

A fim de permitir uma comparação entre os tempos de retenção dos diferentes compostos obtidos com os dados da literatura, amostras autênticas e banco de dados, foi utilizado o índice de retenção de Kováts, que utiliza uma série de alcanos saturados de cadeia normal (C5 a C29), para evitar erros devidos a variações do tempo de retenção dos compostos decorrentes de alterações como temperatura, fluxo e operador. O índice de retenção corrigido varia muito pouco e de maneira linear com a temperatura. Os índices de retenção calculados foram, então, comparados com os da literatura ou com amostras autênticas (SANDRA & BICCHI, 1987; COLLINS & BRAGA, 1988).

O índice de retenção será obtido através da seguinte equação:

$$I = 100z + \frac{100(\log t'_{RX} - \log t'_{RZ})}{(\log t'_{R(Z+1)} - \log t'_{RZ})}$$

Onde: z = número de átomos de carbono com menor peso molecular.

t'_{RX} = tempo de retenção do composto x, sendo que t'_{RX} é intermediário a t'_{RZ} e $t'_{R(Z+1)}$.

t'_{RZ} e $t'_{R(Z+1)}$ = tempos de retenção ajustados de alcanos de cadeia normal.

2.4. Análise estatística

Os dados de rendimento dos óleos voláteis e dos teores de seus componentes foram submetidos a análise de variância das médias, utilizando-se o teste de Tukey ($p \leq 0,05$). Para isso, os dados de porcentagem foram transformados em $\log(x+1)$.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Considerando-se os diversos papéis dos óleos voláteis em interações ecológicas, bem como sua ampla utilização comercial, a compreensão dos fatores de variabilidade em óleos essenciais de Myrtaceae é de grande importância para taxonomistas, ecólogos e para a indústria de produtos naturais, uma vez que esta família é uma reconhecida produtora destes compostos, em especial aos que pertencem à classe dos terpenos (KESZEI *et al.*, 2008).

No presente estudo, o rendimento e a composição dos óleos voláteis de duas espécies de Myrtaceae ocorrentes em uma área remanescente da Mata Atlântica foram analisados em intervalos de 3 horas, durante vinte e quatro horas, em dois períodos, um correspondente ao inverno (junho/06) e outro, ao verão (dezembro/06), a fim de se identificar possíveis padrões de variação diuturna nos óleos dessas espécies.

A Figura 1 mostra o rendimento ($\text{mg.g}^{-1}\text{MS}$) dos óleos voláteis de *C. guaviroba* no primeiro e no segundo pontos de análise, bem como a variação da temperatura nas duas datas. Os valores foram similares aos rendimentos obtidos para outras espécies do gênero *Campomanesia* Ruiz & Pav. por LIMBERGER *et al.* (2001), variando de 1,8 a 3,0 $\text{mg.g}^{-1}\text{MS}$ em junho (Figura 1A), e de 2,5 a 4,0 $\text{mg.g}^{-1}\text{MS}$ em dezembro (Figura 1B).

Em *M. splendens*, o rendimento variou entre 2,1 e 5,2 $\text{mg.g}^{-1}\text{MS}$ em junho (Figura 2A) e entre 3,9 e 6,2 $\text{mg.g}^{-1}\text{MS}$ em dezembro (figura 2B), valores que também foram semelhantes aos resultados obtidos previamente para outra espécie do gênero por LIMBERGER *et al.* (2004).

No entanto, a análise de variância das médias e a aplicação do teste de Tukey ($p \leq 0,05$) demonstraram que a variação ao longo do dia não foi significativa em nenhum dos dois períodos analisados, para nenhuma das duas espécies estudadas. A variabilidade entre os valores de rendimento obtidos para os três indivíduos de ambas as espécies foi mais acentuada do que o padrão de variação diuturna. Em *Juniperus scopulorum* Sarg., ADAMS (1979) também observou que, embora houvesse uma variação diuturna nos terpenóides produzidos, a variabilidade genética entre os espécimes analisados era maior. Em *Angophora costata* Britten (Myrtaceae, Leptospermoideae), os autores verificaram que as variações diuturnas e sazonais encontradas nos óleos voláteis mostraram-se menores do

que a variação genotípica, mesmo quando os indivíduos eram geneticamente similares (LEACH & WHIFFIN, 1989).

Contudo, embora a variação diurna dos rendimentos dos óleos de *C. guaviroba* e de *M. splendens* não tenha sido significativa, a média dos rendimentos obtidos em dezembro foi significativamente mais elevada do que a média obtida em junho (Figura 3). Como a temperatura foi semelhante nos dois períodos de coleta (Figuras 1 e 2), é possível que outros fatores estejam envolvidos nessa variação, como os níveis de precipitação média, que foram de 50,7 mm em junho e 181,3 mm em dezembro (dados fornecidos pelo Instituto Agrônomo e Geofísico da Universidade de São Paulo).

Os estudos de variações diurnas em óleos voláteis demonstram que estas podem ser quantitativas e/ou qualitativas. Em folhas de *Eucalyptus nicholii* Maiden & Blakely, *Rosmarinus officinalis* L. e *Thuja occidentalis* L., por exemplo, RAMEZANI *et al.* (2009) observaram variações diurnas somente no rendimento dos óleos voláteis, enquanto em folhas *Virola surinamensis* Warb., LOPES *et al.* (1997) observaram um ritmo diurno na produção de monoterpenos e de elimicina, enquanto a produção sesquiterpenos permanecia constante. Dessa forma, a composição química dos óleos voláteis de folhas de *C. guaviroba* e *M. splendens* também foi analisada ao longo do dia. As duas espécies apresentaram óleos voláteis com composição semelhante. Em *C. guaviroba* (Tabelas 1 e 2), as classes predominantes de compostos foram a dos hidrocarbonetos sesquiterpênicos e sesquiterpenos oxigenados, nos dois períodos analisados, sendo que os monoterpenos foram praticamente ausentes, de forma semelhante ao que foi observado para *C. guazumifolia* Blume e diferentemente do observado para *C. rhombea* O. Berg, *C. aurea* O. Berg, e *C. xanthocarpa* O. Berg in Mart. (LIMBERGER *et al.*, 2001). Em *M. splendens* as mesmas classes de compostos foram observadas (Tabelas 3 e 4).

Figura 1. Rendimento (mg.g⁻¹MS) (linhas contínuas) dos óleos voláteis de folhas frescas de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga a cada três horas, das 12h de 01/06/06 às 12h de 02/06/06 (A) e das 03/12/06 às 12h de 04/12/06 (B) e variação de temperatura (°C) durante o período de análise (linhas pontilhadas).

Figura 2. Rendimento (mg.g⁻¹MS) (linhas contínuas) dos óleos voláteis de folhas frescas de *Myrcia splendens* (Sw.) DC. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga a cada três horas, das 12h de 01/06/06 às 12h de 02/06/06 (A) e das 12h de 03/12/06 às 12h de 04/12/06 (B) e variação de temperatura (°C) durante o período de análise (linhas pontilhadas).

Figura 3. Rendimento (mg.g⁻¹MS) dos óleos voláteis de folhas frescas de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. (A) e *Myrcia splendens* (Sw.) DC. (B) coletadas a cada três horas durante 24 horas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga em junho e dezembro de 2006.

Tabela 1. Composição química do óleo volátil de folhas frescas de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga a cada três horas, das 12h de 01/06/06 às 12h de 02/06/06. IK - Índice de Retenção de Kováts. N.I. - composto não identificado.

Composto	IK	Área (%)								
		12h	15h	18h	21h	0h	3h	6h	9h	12h
trans- β -ocimeno	1056	0,1	-	-	-	-	-	-	-	-
δ -elemeno	1338	1,5	3,6	2,3	3,1	2,6	2,9	2,3	2,1	2,5
α -copaeno	1376	0,1	0,2	-	-	-	0,3	-	0,1	-
β -bourboneno	1384	-	-	-	0,1	-	-	-	0,2	-
β -elemeno	1394	1,4	4,4	2,4	2,7	2,7	2,6	2,6	2,8	2,6
α -gurjuneno	1410	0,2	0,9	-	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2
β -cariofileno	1417	1,5	3,1	2,0	2,3	2,3	2,3	2,1	2,2	2,3
β -copaeno	1429	0,4	0,9	1,0	1,1	1,2	1,1	1,0	1,1	1,1
γ -elemeno	1435	0,5	0,9	0,8	0,9	1,1	1,1	0,9	0,9	0,9
α -guaieno	1438	-	-	-	0,1	-	0,1	0,2	-	-
trans-muurolo-3,5-dieno	1443	0,2	0,2	0,2	0,2	0,6	0,5	-	0,1	0,2
α -humuleno	1452	2,0	0,9	1,3	1,4	1,4	1,5	1,3	1,3	1,4
trans-cadina-1(6),4-dieno	1460	0,3	6,0	0,6	0,7	0,8	0,5	0,6	0,5	0,2
γ -muuroleno	1473	1,7	-	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
α -amorfenos	1475	9,0	9,3	11,0	12,2	12,0	13,6	11,7	11,1	11,5
β -selineno	1484	0,2	0,2	-	0,2	0,2	0,2	0,2	0,5	0,4
δ -selineno	1488	2,0	0,8	1,0	1,0	1,1	1,2	1,0	1,6	1,0
γ -amorfenos	1492	4,2	4,2	5,3	5,8	5,5	5,5	5,3	5,0	5,0
α -muuroleno	1495	1,3	1,4	2,1	1,5	1,5	3,2	1,1	0,3	2,6
δ -amorfenos	1503	2,0	3,4	0,8	2,3	1,4	2,3	1,9	0,6	2,3
γ -cadineno	1508	1,1	0,7	1,6	1,7	1,7	1,6	1,7	1,7	0,6
δ -cadineno	1520	13,6	12,2	5,7	5,7	5,1	6,0	5,9	6,1	6,1
trans-cadina-1,4-dieno	1527	0,5	-	-	-	-	0,2	0,2	0,2	0,2
α -cadineno	1532	-	-	0,2	0,2	0,2	0,3	0,3	0,4	0,3
α -calacoreno	1540	0,4	1,1	1,3	1,0	1,4	0,6	0,9	1,1	0,9

Tabela 1. (Continuação)

Composto	IK	Área (%)								
		12h	15h	18h	21h	0h	3h	6h	9h	12h
selina-3,7(11)-dieno	1544	-	0,6	-	0,2	0,2	-	0,2	-	-
β-calacoreno	1557	0,3	0,8	0,4	0,9	0,8	0,4	0,6	0,7	0,3
palustrol	1560	0,5	0,9	1,6	0,8	1,2	1,0	1,2	1,3	1,4
espatulenol	1571	0,1	0,9	1,5	1,3	1,4	0,6	1,6	2,2	1,1
cis-β-elemenona	1578	0,2	-	-	-	-	-	-	-	-
viridiflorol	1581	1,8	2,5	3,1	2,5	2,5	2,4	2,8	2,6	3,1
carotol	1583	0,1	1,7	2,2	2,0	2,0	1,8	2,0	2,0	2,1
guaiol	1587	2,6	2,5	3,6	3,2	3,2	3,1	3,4	3,3	3,5
rosifoliol	1595	0,6	1,1	1,0	1,1	0,9	0,8	0,9	1,3	1,2
n.i. 1	1601	0,4	1,1	1,4	1,0	1,4	0,8	1,4	1,2	1,2
1,10-di-epi-cubenol	1610	0,5	0,7	0,7	0,3	0,6	0,6	0,6	0,6	0,7
junenol	1611	1,8	5,0	4,1	5,6	3,8	3,7	3,0	4,8	3,6
10-epi-γ-eudesmol	1616	2,5	0,9	3,2	1,9	2,9	2,9	2,9	2,7	3,0
1-epi-cubenol	1627	0,9	2,1	2,1	1,7	2,0	1,5	1,9	2,2	1,6
cis-cadin-4-en-7-ol	1637	4,3	2,0	2,0	1,9	1,8	1,6	1,8	2,0	2,2
epi-α-cadinol	1645	12,5	6,4	10,5	9,4	10,2	9,6	9,4	9,1	9,7
α-cadinol	1652	24,0	9,7	17,6	17,2	17,6	16,7	17,4	16,5	17,9
valerianol	1654	-	1,0	0,4	0,3	1,0	1,5	1,0	1,0	0,8
cis-calamalen-10-ol	1655	0,2	1,7	0,8	1,2	0,6	0,4	0,8	1,1	0,5
trans-calamenen-10-ol	1663	-	0,7	-	0,1	0,2	0,1	-	0,6	0,3
cadaleno	1669	-	0,3	-	-	-	-	0,3	0,5	0,2
n.i. 2	1672	-	0,1	-	-	-	-	0,2	0,2	0,4
eudesma-7(11)-en-4-ol	1688	-	0,2	0,3	-	-	-	0,2	0,5	-
nootkatol	1750	0,3	-	-	0,2	-	0,3	0,6	0,5	0,1
(E)-isovalencenol	1754	-	-	0,3	-	-	-	0,2	0,5	-
n.i. 3	1775	-	0,3	-	-	-	-	0,3	0,3	0,5
n.i. 4	1801	-	0,3	-	0,3	-	-	0,5	0,3	-
n.i. 5	1838	-	0,3	-	-	-	-	-	-	-
n.i. 6	1977	-	0,3	-	0,3	-	-	0,7	0,4	-
n.i. 7	2008	-	0,2	-	-	-	-	-	-	-
hidrocarbonetos monoterpênicos		0,1	-	-	-	-	-	-	-	-

Tabela 1. (Continuação)

Composto	IK	Área (%)								
		12h	15h	18h	21h	0h	3h	6h	9h	12h
hidrocarbonetos monoterpênicos		0,1	-	-	-	-	-	-	-	-
monoterpenos oxigenados		-	-	-	-	-	-	-	-	-
hidrocarbonetos sesquiterpênicos		44,3	55,8	40,7	46,0	44,1	48,7	42,9	41,2	43,2
sesquiterpenos oxigenados		53,3	42,8	56,3	52,4	53,4	49,5	55,2	57,5	55,0
n.i. 1 - m/z: 179, 161, 204, 109, 119, 135, 43, 55, 67, 95, 81, 147, 222.										
n.i. 2 - m/z: 123, 161, 179, 105, 93, 81, 222, 204, 81, 67, 55, 41.										
n.i. 3 - m/z: 157, 200, 141, 115, 91, 69, 43.										
n.i. 4 - m/z: 123, 161, 179, 191, 135, 107, 95, 81, 222, 204, 67, 55, 41.										
n.i. 5 - m/z: 183, 198, 136, 168, 206, 153, 93, 79, 123, 79, 67, 55, 41, 218, 236.										
n.i. 6 - m/z: 252, 185, 134, 171, 146, 157, 237, 119, 105, 91, 77, 65, 53, 41.										
n.i. 7 - m/z: 71, 123, 95, 43, 55, 82, 111.										

Tabela 2. Composição química do óleo volátil de folhas frescas de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga a cada três horas, das 12h de 03/12/06 às 12h de 04/12/06. IK - Índice de Retenção de Kováts. N.I. - composto não identificado.

Composto	IK	Área (%)								
		12h	15h	18h	21h	0h	3h	6h	9h	12h
2-pentanona	687	-	-	-	-	0.2	-	-	-	-
propanoato de butila	907	-	-	-	-	0.8	-	-	-	-
trans- β -ocimeno	1056	0.1	-	-	-	-	-	-	-	-
δ -elemeno	1338	2.3	3.8	3.6	3.2	2.7	2.8	3.2	5.0	4.1
α -copaeno	1376	0.2	0.3	0.3	0.3	0.3	0.2	0.3	0.4	-
β -bourboneno	1384	0.1	-	0.1	-	-	0.1	-	0.1	-
β -elemeno	1394	2.6	3.1	3.3	3.3	3.1	3.0	3.4	3.7	3.5
α -gurjuneno	1410	0.9	1.4	1.7	1.7	0.2	0.4	0.3	0.5	0.5
β -cariofileno	1417	-	0.2	-	-	-	-	-	-	-
β -ylangeno	1420	1.3	-	2.0	2.2	2.9	3.0	3.2	4.0	3.7
β -copaeno	1429	1.2	1.4	1.7	1.7	1.4	1.4	1.6	2.0	1.9
γ -elemeno	1435	0.4	1.1	1.1	1.1	1.1	1.0	1.1	1.7	1.2
α -guaieno	1438	0.2	0.4	0.3	-	0.3	0.2	0.3	0.1	0.3
trans-muurolo-3,5-dieno	1443	0.5	0.7	0.8	0.6	0.5	0.7	0.9	1.0	0.9
n.i. 1	1447	-	0.1	0.2	-	-	-	-	-	-
α -humuleno	1452	1.4	1.4	1.6	1.5	1.3	1.4	1.5	1.7	1.9
allo-aromadendreno	1458	0.6	0.3	0.1	-	0.2	0.2	0.2	0.1	0.1
trans-cadina-1(6),4-dieno	1460	0.7	0.9	0.9	1.1	0.7	0.9	0.7	0.2	0.7
γ -muuroleno	1473	1.3	0.4	0.6	0.7	0.4	0.6	0.5	0.6	0.7
germacreno D	1482	2.3	-	-	-	-	-	-	0.2	1.6

Tabela 2. (Continuação)

Composto	IK	Área (%)								
		12h	15h	18h	21h	0h	3h	6h	9h	12h
α -amorfeno	1475	8.1	13.1	13.4	14.0	13.7	12.6	13.1	16.0	13.7
β -selineno	1484	0.6	0.6	0.5	0.4	0.6	0.7	0.4	-	0.4
δ -selineno	1488	2.8	2.4	1.5	1.3	1.0	1.2	1.0	1.9	1.6
γ -amorfeno	1492	4.7	5.2	5.1	5.0	4.6	4.8	4.9	4.8	4.8
α -muuroleno	1495	0.4	0.7	2.1	2.2	1.9	2.1	1.7	2.1	2.1
δ -amorfeno	1503	2.2	3.4	2.8	2.3	2.0	1.9	1.7	5.2	3.2
γ -cadineno	1508	2.6	1.5	1.8	1.8	1.5	1.6	1.6	1.8	1.8
δ -cadineno	1520	12.8	8.4	8.0	8.7	8.1	7.6	6.8	7.9	8.2
trans-cadina-1,4-dieno	1527	0.4	0.3	0.4	0.2	-	0.4	0.2	0.3	0.3
α -cadineno	1532	1.0	0.7	0.9	0.6	0.7	0.4	0.6	0.8	0.6
α -calacoreno	1540	0.8	1.1	1.6	1.9	0.8	2.0	1.7	1.3	1.5
selina-3,7(11)-dieno	1544	-	0.4	0.2	-	-	-	0.1	-	-
β -calacoreno	1557	0.5	0.7	1.2	1.8	1.4	1.4	1.1	0.9	1.1
palustrol	1560	0.4	0.7	0.8	0.2	0.5	0.8	0.8	0.3	0.4
maaliol	1568	0.4	0.3	0.4	0.3	-	-	-	0.4	0.3
espatulenol	1571	-	-	0.4	-	0.8	1.2	1.7	-	0.2
n.i. 2	1573	0.1	-	-	0.6	-	-	-	-	-
n.i. 3	1576	0.4	-	-	-	0.6	-	-	-	-
cis- β -elemenona	1578	0.1	0.5	0.3	-	0.1	-	0.2	0.1	0.1
viridiflorol	1581	1.2	1.7	1.6	1.5	1.1	2.0	1.8	1.7	1.5
carotol	1583	0.5	0.2	0.3	0.4	0.4	-	-	-	0.4
guaiol	1587	1.6	3.0	3.1	2.8	3.1	3.9	3.5	3.7	3.2
rosifoliol	1595	1.0	0.8	0.9	0.9	1.0	1.1	1.0	0.9	0.9
n.i. 4	1601	-	-	0.1	-	0.2	0.3	0.2	0.1	-

Tabela 2. (Continuação)

Composto	IK	Área (%)								
		12h	15h	18h	21h	0h	3h	6h	9h	12h
1,10-di-epi-cubenol	1610	0.6	0.8	0.9	1.0	0.9	0.8	1.1	0.7	0.6
junenol	1611	0.9	1.4	1.5	1.2	1.5	1.6	1.5	1.4	1.7
10-epi- γ -eudesmol	1616	2.2	4.5	4.4	4.5	4.0	3.6	4.4	4.2	4.3
1-epi-cubenol	1627	1.9	1.2	2.5	1.9	2.4	2.7	3.0	2.4	1.6
cis-cadin-4-en-7-ol	1637	9.1	7.7	6.4	6.6	7.9	7.2	6.9	5.8	6.6
epi- α -cadinol	1645	1.7	4.5	3.9	4.1	4.4	3.9	3.7	2.7	3.2
α -cadinol	1652	12.6	14.0	10.7	12.7	13.1	11.9	11.2	7.7	11.0
valerianol	1654	0.8	1.9	1.7	0.9	1.9	2.2	1.5	-	1.7
cis-calamalen-10-ol	1655	1.3	-	0.3	0.2	0.2	0.3	0.4	0.6	0.2
n.i. 5	1659	-	0.2	-	-	-	-	-	-	-
trans-calamenen-10-ol	1663	6.0	0.2	0.4	0.6	0.7	0.6	0.7	-	0.2
n.i. 6	1666	0.4	0.4	0.5	0.2	0.4	0.4	0.1	-	0.5
cadaleno	1669	0.2	-	0.2	0.3	0.3	0.6	0.9	0.3	0.2
n.i. 7	1672	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.3	0.4	0.1	0.1
eudesma-7(11)-en-4-ol	1688	-	-	-	0.2	-	0.4	0.4	0.1	-
(E)-isovalencenol	1750	-	-	-	-	0.2	0.1	0.1	-	-
nootkatol	1754	-	-	-	0.2	0.2	-	0.2	-	-
n.i. 8	1775	-	-	-	-	0.2	-	0.2	-	-
n.i. 9	1801	-	-	-	-	0.2	0.2	0.4	-	-
n.i. 10	1838	-	-	-	-	0.2	0.1	0.2	-	-
n.i. 11	1977	-	0.1	0.1	0.3	-	0.1	0.3	0.1	0.3
n.i. 12	2008	-	0.3	-	0.2	-	0.3	-	1.0	0.3
hidrocarbonetos monoterpênicos		0.1	-	-	-	-	-	-	-	-
monoterpenos oxigenados		-	-	-	-	-	-	-	-	-

Tabela 2. (Continuação)

Composto	IK	Área (%)								
		12h	15h	18h	21h	0h	3h	6h	9h	12h
hidrocarbonetos sesquiterpênicos		52.8	53.7	57.6	57.6	51.2	52.7	52.5	64.5	60.3
sesquiterpenos oxigenados		43.6	44.4	41.7	42.0	46.2	46.7	46.6	34.2	39.4
outros		-	-	-	-	1.0	-	-	-	-
n.i. 1 - m/z :159, 128, 105, 44, 204, 77.										
n.i. 2 - m/z: 109, 204, 189, 177, 161, 145, 133, 121, 93, 79, 67, 55, 43.										
n.i. 3 - m/z: 161, 189, 204, 107, 93, 147, 122, 13381, 67, 179.										
n.i. 4 - m/z: 161, 179, 204, 119, 105, 95, 81.										
n.i. 5 - m/z: 159, 220, 202, 187, 145, 119, 91, 105, 131, 177.										
n.i. 6 - m/z: 179, 161, 204, 109, 119, 135, 43, 55, 67, 95, 81, 147, 222.										
n.i. 7 - m/z: 123, 161, 179, 105, 93, 81, 222, 204, 81, 67, 55, 41.										
n.i. 8 - m/z: 157, 200, 141, 115, 91, 69, 43.										
n.i. 9 - m/z: 123, 161, 179, 191, 135, 107, 95, 81, 222, 204, 67, 55, 41.										
n.i. 10 - m/z: 183, 198, 136, 168, 206, 153, 93, 79, 123, 79,67, 55, 41, 218, 236.										
n.i. 11- m/z: 252, 185, 134, 171, 146, 157, 237, 119, 105, 91, 77, 65, 53, 41.										
n.i. 12 - m/z: 71, 123, 95, 43, 55, 82, 111.										

Tabela 3. Composição química do óleo volátil de folhas frescas de *Myrcia splendens* (Sw.) DC. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga a cada três horas, das 12h de 01/06/06 às 12h de 02/06/06. IK - Índice de Retenção de Kováts. N.I. - composto não identificado.

Composto	Área (%)									
	IK	12h	15h	18h	21h	0h	3h	6h	9h	12h
β-elemeno	1394	8,3	19,1	11,4	15,4	11,7	18,7	9,0	11,6	8,7
β-ylangeno	1420	2,0	2,4	2,0	2,3	2,5	2,7	2,7	2,6	2,8
β-copaeno	1429	0,9	1,2	0,8	0,9	1,1	1,1	1,7	0,9	1,3
γ-elemeno	1435	1,4	1,6	1,4	1,1	1,5	1,4	1,8	1,7	2,3
trans-muurola-3,5-dieno	1443	0,8	1,6	0,9	1,3	1,2	1,0	1,5	1,2	1,7
α-amorfenol	1480	12,3	7,6	12,4	16,2	13,6	17,1	12,2	14,2	13,2
β-selineno	1484	1,4	7,4	1,3	2,1	1,6	2,2	2,3	1,8	2,6
α-selineno	1492	2,3	2,2	2,2	2,7	2,2	2,7	1,2	1,5	3,6
α-muuroleno	1495	1,4	1,8	1,5	0,9	1,7	1,0	3,3	2,5	1,5
δ-amorfenol	1503	0,8	0,9	1,1	0,8	1,2	0,9	1,2	0,7	1,4
γ-cadineno	1508	0,8	0,7	0,8	0,6	0,9	0,8	0,8	0,6	1,0
δ-cadineno	1520	4,4	0,7	4,2	3,5	4,4	3,6	4,6	4,1	4,9
α-cadineno	1532	0,9	3,4	1,0	0,7	0,7	0,8	1,1	0,9	0,8
viridiflorol	1581	0,5	1,2	0,6	0,7	1,3	0,9	1,6	0,4	0,8
guaíol	1587	0,5	0,5	1,1	0,5	0,7	0,1	-	0,6	0,8
rosifoliol	1595	1,0	1,2	0,9	0,1	0,4	0,7	0,8	1,0	1,1
1,10-di-epi-cubenol	1610	1,4	1,2	2,2	2,6	2,3	2,8	2,1	1,6	2,4
junenol	1611	2,2	1,4	2,5	0,7	2,6	0,7	1,3	1,2	3,6
1-epi-cubenol	1627	0,7	0,9	0,9	0,5	1,6	0,7	2,1	2,0	1,9
γ-eudesmol	1630	1,5	1,8	3,0	1,3	2,3	1,6	1,6	1,6	1,6
epi-α-cadinol	1645	2,2	3,1	2,6	3,7	5,7	2,4	2,7	2,4	3,8
n.i. 1	1650	5,0	4,3	5,1	1,6	2,5	2,1	2,5	2,6	2,3

Tabela 3. (Continuação)

Composto	IK	Área (%)								
		12h	15h	18h	21h	0h	3h	6h	9h	12h
α -cadinol	1652	24,8	14,8	18,6	19,7	19,7	18,8	15,5	19,2	16,6
valerianol	1654	7,7	2,8	5,7	3,2	2,8	2,7	6,4	5,7	5,4
n.i. 2	1666	1,3	0,4	1,1	0,9	1,4	0,9	2,0	1,5	1,4
5-neo-cedranol	1675	0,7	0,6	0,7	0,5	0,9	0,5	1,2	1,1	1,8
n.i. 3	1678	0,5	0,4	0,6	0,3	0,2	0,8	0,7	-	-
germacra-4(15),5,10(14)-trien-1- α -ol	1679	0,4	0,6	0,7	0,6	0,6	0,5	1,0	1,2	0,9
eudesma-7(11)-em-4-ol	1689	0,5	0,5	0,5	0,4	0,6	0,4	-	0,7	0,4
acetato de guaiolila	1723	0,5	1,2	0,7	0,9	0,8	1,0	0,9	0,6	0,8
γ costol	1755	0,5	0,6	0,5	0,7	0,4	0,6	1,4	1,1	1,1
14-oxy- α -muuroleno	1771	0,3	0,5	0,6	0,5	0,5	0,7	1,2	0,5	0,8
14-hidroxi- α -muuroleno	1778	0,3	0,4	0,5	0,4	0,6	0,4	0,6	0,4	0,7
14-hidroxid- γ -cadineno	1805	0,3	2,4	0,3	0,4	0,3	0,4	0,3	0,4	0,6
n.i. 4	1812	1,5	0,9	1,5	2,2	1,5	2,1	1,7	1,6	1,3
n.i. 5	2042	0,6	0,4	0,6	0,9	0,6	0,7	0,4	0,6	0,6
n.i. 6	2058	0,3	-	0,3	0,4	0,3	1,5	0,3	-	0,3
hidrocarbonetos monoterpênicos		-	-	-	-	-	-	-	-	-
monoterpenos oxigenados		-	-	-	-	-	-	-	-	-
hidrocarbonetos sesquiterpênicos		37,5	50,5	41,0	48,6	44,1	53,9	43,5	44,3	45,7
sesquiterpenos oxigenados		54,1	41,6	50,9	42,4	49,7	41,6	47,5	47,4	50,0
outros		0,9	0,4	0,9	1,3	0,9	2,2	0,6	0,6	0,9
n.i. 1 - m/z: 159, 91, 41, 67, 117, 202.										
n.i. 2 - m/z: 123, 161, 179, 105, 93, 81, 222, 204, 81, 67, 55, 41.										
n.i. 3 - m/z: 159, 220, 202, 187, 145, 119, 91, 105, 131, 177.										
n.i. 4 - m/z: 252, 185, 157, 131, 223, 143, 105, 91, 237.										
n.i. 5 - m/z: 252, 185, 134, 146, 171, 157, 237.										
n.i. 6 - m/z: 252, 185, 134, 146, 171, 157, 237.										

Tabela 4. Composição química do óleo volátil de folhas frescas de *Myrcia splendens* (Sw.) DC. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga a cada três horas, das 12h de 03/12/06 às 12h de 04/12/06. IK - Índice de Retenção de Kováts. N.I. - composto não identificado.

Composto	IK	Área (%)								
		12h	15h	18h	21h	0h	3h	6h	9h	12h
δ-elemeneno	1338	0,4	-	0,1	0,7	0,2	0,2	0,4	-	0,5
α-copaeno	1376	-	-	-	-	-	0,2	0,2	-	-
β-cubebeno	1387	0,4	0,4	0,5	0,8	0,5	0,4	0,5	0,4	0,6
β-elemeneno	1394	6,4	7,3	7,3	8,8	8,5	7,8	9,3	6,9	8,6
β-ylangeno	1420	3,1	2,9	2,9	4,4	3,6	3,4	3,7	3,3	3,4
β-copaeno	1429	1,6	1,3	1,5	2,4	1,7	1,7	1,8	1,8	1,8
γ-elemeneno	1435	1,9	1,9	1,9	2,2	2,1	2,1	2,2	1,6	2,0
aromadendreno	1443	0,9	0,4	0,6	0,9	0,4	0,9	0,6	0,4	0,5
trans-muurola-3,5-dieno	1443	1,4	0,8	0,9	1,8	1,5	0,9	1,6	1,3	1,5
cis-cadina-1(6),4-dieno	1460	0,8	0,9	0,6	0,8	0,2	0,2	0,2	0,4	0,2
γ-muuroleno	1473	0,4	0,3	0,4	0,5	0,3	0,5	0,7	0,3	0,2
γ-gurjuneno	1476	2,2	2,2	2,6	2,3	2,3	2,1	1,9	1,7	2,2
α-amorfeno	1480	12,0	11,7	12,0	16,8	12,6	12,6	13,1	13,7	13,2
β-selineno	1484	1,7	1,5	1,7	2,0	1,9	1,7	2,1	1,5	1,7
δ-selineno	1488	-	-	0,2	0,3	0,5	0,2	0,2	-	-
cis-β-guaieno	1490	-	-	0,4	0,5	-	0,7	0,6	0,3	0,6
α-selineno	1492	3,7	3,0	2,7	3,4	2,6	2,2	2,6	2,0	2,2
α-muuroleno	1495	2,2	2,3	1,9	2,8	2,4	2,3	2,3	1,7	2,3
δ-amorfeno	1503	1,7	1,3	1,5	1,8	1,3	1,4	1,5	1,2	1,5
γ-cadineno	1508	1,2	1,0	1,0	1,3	1,1	1,1	1,2	0,9	1,1
δ-cadineno	1520	6,4	6,2	6,0	7,0	5,7	5,7	5,8	5,1	5,7
(E)-iso-γ-bisaboleno	1525	0,3	-	0,1	0,3	0,3	0,3	0,3	-	-

Tabela 4. (Continuação)

Composto	IK	Área (%)								
		12h	15h	18h	21h	0h	3h	6h	9h	12h
zonareno	1531	-	-	0,4	-	-	-	-	-	0,3
α -calacoreno	1540	0,4	0,2	0,2	-	0,5	0,3	0,4	0,3	0,4
trans-cadina-1,4-dieno	1542	-	0,3	0,2	0,2	0,2	0,3	0,3	-	-
α -cadineno	1544	0,1	0,2	0,2	0,3	0,1	0,6	0,4	0,3	0,5
elemol	1548	0,9	0,2	0,6	0,3	0,6	0,6	0,4	0,4	0,5
E)-veltonal	1559	1,0	1,1	0,5	0,3	1,2	0,9	0,9	0,7	1,0
espatulenol	1571	0,7	0,5	0,7	0,4	0,4	0,4	0,2	0,1	0,2
viridiflorol	1581	0,8	0,2	0,5	0,8	0,7	0,7	0,5	0,4	0,5
cis- β -elemenona	1578	0,9	0,9	0,8	0,8	0,7	0,7	0,7	0,7	0,8
carotol	1581	0,7	0,7	0,8	0,7	0,8	0,9	0,7	0,9	0,7
rosifoliol	1595	0,8	0,6	0,2	0,5	0,6	0,5	0,3	0,5	0,4
1,10-di-epi-cubenol	1610	3,3	3,0	3,3	3,2	2,0	2,5	2,4	2,6	2,7
junenol	1611	2,8	2,7	3,0	2,8	3,0	2,2	2,1	2,6	2,3
1-epi-cubenol	1627	1,6	1,7	1,4	1,1	1,4	1,3	1,3	1,3	1,5
γ -eudesmol	1630	2,5	2,5	2,3	2,1	2,1	2,1	2,2	2,2	2,0
epi- α -cadinol	1645	7,6	7,0	6,9	6,0	5,6	5,9	5,4	5,4	6,3
α -muurolol	1646	1,4	1,1	1,2	0,8	0,8	0,7	-	0,7	1,2
α -cadinol	1652	15,7	17,1	14,2	6,1	13,1	14,3	13,1	15,4	13,3
valerianol	1654	0,9	1,9	3,0	1,7	2,8	2,0	2,4	2,8	2,8
epi-zinanona	1663	0,2	0,8	0,6	0,6	0,9	0,7	1,0	1,0	0,9
n.i. 1	1666	1,8	1,5	1,7	1,5	1,8	0,7	1,3	1,3	1,4
5-neo-cedranol	1675	1,0	0,6	0,6	0,6	1,1	0,6	0,9	0,9	1,0
germacra-4(15),5,10(14)-trien-1- α -ol	1679	-	0,2	0,7	0,7	0,6	0,3	0,5	0,8	0,5
eudesma-7(11)-em-4-ol	1689	0,4	0,7	0,4	0,4	0,7	0,2	0,3	0,5	0,4
guaiol acetato	1723	0,2	0,3	0,3	0,3	0,2	0,3	0,1	0,2	0,3

Tabela 4. (Continuação)

Composto	IK	Área (%)								
		12h	15h	18h	21h	0h	3h	6h	9h	12h
γ costol	1755	0,4	1,4	0,9	0,5	2,3	1,3	1,1	1,1	1,1
14-oxy- α -muuroleno	1771	0,4	0,5	0,6	0,4	0,9	0,7	0,7	0,7	1,0
14-hidroxi- α -muuroleno	1778	0,2	0,6	0,6	0,4	0,9	0,9	1,5	1,0	0,9
14-hidroxi- γ -cadineno	1805	0,2	0,9	0,4	0,4	1,8	1,4	1,1	0,8	1,3
n.i. 2	1812	-	1,6	1,2	0,8	1,2	1,4	1,4	1,7	1,3
n.i. 3	2042	-	1,0	0,8	0,6	0,8	0,9	0,8	1,7	0,9
n.i. 4	2058	0,3	1,0	0,9	0,9	0,9	1,1	0,7	1,5	0,9
n.i. 5	2156	-	0,3	0,5	0,7	0,3	1,5	0,8	1,6	0,5
n.i. 6	2502	-	0,4	0,6	0,5	-	0,6	0,3	0,5	0,3
n.i. 7	2510	-	-	-	0,2	-	0,2	0,5	0,7	-
n.i. 8	2531	-	-	-	0,2	-	-	0,3	0,9	-
hidrocarbonetos monoterpênicos		-	-	-	-	-	-	-	-	-
monoterpenos oxigenados		-	-	-	-	-	-	-	-	-
hidrocarbonetos sesquiterpênicos		49,2	46,0	47,9	62,3	50,4	49,6	53,9	45,1	51,0
sesquiterpenos oxigenados		46,2	51,1	48,3	34,6	49,3	45,1	43,3	48,5	47,1
outros		0,3	1,6	2,0	2,5	1,2	3,4	2,6	5,2	1,7
n.i. 1 - m/z: 123, 161, 179, 105, 93, 81, 222, 204, 81, 67, 55, 41.										
n.i. 2 - m/z: 189, 204, 222, 161, 135, 121, 107, 93, 81, 67.										
n.i. 3 - m/z: 252, 185, 157, 131, 223, 143, 105, 91, 237.										
n.i. 4 - m/z: 252, 185, 134, 146, 171, 157, 237.										
n.i. 5 - m/z: 252, 185, 134, 146, 171, 157, 237.										
n.i. 6 - m/z: 252, 185, 134, 146, 171, 157, 237.										
n.i. 7 - m/z: 260, 193, 153, 165, 178.										
n.i. 8 - m/z: 207, 302, 219, 223.										

A relação entre hidrocarbonetos sesquiterpênicos e sesquiterpenos oxigenados de *C. guaviroba* é mostrada na Figura 4. No inverno (Figura 4A), os teores do primeiro grupo variaram de 41,2% a 55,8%, enquanto os teores do segundo grupo variaram de 42,8 a 57,5%. No verão (Figura 4B), os rendimentos de hidrocarbonetos sesquiterpênicos foram ligeiramente mais elevados, variando de 51,2 a 64,5%, enquanto os sesquiterpenos oxigenados variaram de 34,2 a 46,7%. A variação destas classes de compostos ao longo do dia, todavia, também não foi significativa ($p \leq 0,05$) em nenhum dos dois períodos analisados.

Em *M. splendens*, os teores de hidrocarbonetos sesquiterpênicos também foram mais elevados no verão (Figura 5B), variando de 46,0 a 62,3% do que no inverno, variando de 37,6 a 53,9 % (Figura 5A). Já os teores de sesquiterpenos oxigenados oscilaram entre 34,6 e 51,1% em dezembro (Figura 5B) e entre 41,6 e 54,1 em junho (Figura 5A). As variações nos teores das classes de compostos ao longo do dia novamente não foram significativas.

Em algumas espécies, como *Picea abies* L. (Karst), foi observado um ritmo diuturno na emissão de sesquiterpenos, a qual parece ser induzida por jasmonato de metila, estando aparentemente envolvida na proteção contra herbivoria (MARTIN *et al.*, 2003). Apesar de não ter sido observada variação diuturna na composição de óleos voláteis de *C. guaviroba* e *M. splendens*, é possível que os teores elevados de sesquiterpenos estejam relacionados à proteção contra predadores, uma vez que sesquiterpenos são comumente relatados como substâncias repelentes de herbívoros (PARÉ & TUMLINSON, 19997; DE MORAES *et al.*, 2001).

Com relação aos componentes majoritários do óleo volátil, não houve diferença entre os dois períodos analisados, para ambas as espécies. Em *C. guaviroba* predominaram o sesquiterpeno oxigenado α -cadinol e o hidrocarboneto sesquiterpênico δ -cadineno. A Figura 6 apresenta a variação diuturna dos hidrocarbonetos sesquiterpênicos majoritários durante a análise realizada no inverno. Os teores de δ -elemeno variaram de 1,5 a 3,6%, de β -elemeno, de 1,4 a 4,4%; de β -cariofileno, de 1,5 a 3,1%; de α -amorfenol, de 9,0 a 13,6; de γ -amorfenol, de 4,2 a 5,8 e de δ -cadineno, de 5,1 a 13,6. A única diferença significativa observada foi no aumento de β -elemeno às 15h do dia 01/06/06. A variação dos sesquiterpenos oxigenados é mostrada na Figura 7. Os teores de epi- α -cadinol variaram de 6,4 a 12,5 e os de α -cadinol, de 9,7 a 24,0%.

No verão (Figura 8), os teores de δ -elemeno variaram entre 2,3 e 5,0%; de β -elemeno, de 2,6 a 3,7; de β -cariofileno, de 0,2 a 4,0%; de α -amorfenol, de 8,1 a 16,0; de γ -

amorfeno, de 1,9 a 5,2 e de δ -cadineno, de 6,8 a 12,8. No entanto, neste caso, não houve variação diuturna significativa para nenhum dos compostos. Nesta época, também houve uma maior distribuição nos teores de sesquiterpenos oxigenados (Figura 9), sendo que os teores de 10-*epi*- γ -eudesmol variaram de 2,2 a 4,5%; de *cis*-cadin-4-en-7-ol, de 5,8 a 9,1%, de 1,7 a 4,5% e de α -cadinol, de 7,7 a 14%.

Embora tenha apresentado composição química semelhante ao estudo feito com um espécime de *M. splendens* da Costa Rica (COLE *et al.*, 2007), os componentes majoritários observados no presente estudo foram diferentes. No caso do espécime da Costa Rica, os principais compostos foram germacreno D (35,9%), valerianol (16,3%) *trans*-2-hexenal (9,5%), *epi*- α -cadinol (6,8%) e δ -cadineno (5,8%). Já os componentes majoritários dos espécimes coletados no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga foram, nos dois períodos de análise, β -elemeno, α -amorfeno, δ -cadineno, *epi*- α -cadinol, valerianol e α -cadinol (Figuras 10 e 11). Em junho (Figura 10), os teores de β -elemeno variaram de 8,3 a 15,4%; de α -amorfeno, de 7,6 a 17,1%, de δ -cadineno, de 0,7 a 4,9%; de *epi*- α -cadinol, de 2,2 a 5,7%; de valerianol, de 2,8 a 7,7% e de α -cadinol, de 14,8 a 24,8%. Já em dezembro (Figura 11), os teores de β -elemeno variaram de 6,4 a 9,3%; de α -amorfeno, de 11,7 a 16,8%, de δ -cadineno, de 5,1 a 7,0%; de *epi*- α -cadinol, de 5,6 a 7,6%; de valerianol, de 0,9 a 3,0% e de α -cadinol, de 6,1 a 15,7%. Em nenhum dos dois períodos, no entanto, houve diferença significativa na variação de nenhum destes compostos ao longo do dia.

Não foi observada floração durante os períodos de análise diuturna em nenhum dos espécimes de ambas as espécies estudadas. Do contrário, variações talvez pudessem ser observadas através da análise de seus voláteis florais. Embora se saiba que o aroma, geralmente descrito como doce, desempenha papel importante na polinização de Myrtaceae (GRESSLER *et al.*, 2006; LUGHADHA & PROENÇA, 1997), ainda não existem estudos sobre ritmo circadiano ou padrões de emissão diurna nos componentes químicos responsáveis pela fragrância. Nas espécies em que esse tipo de estudo já foi realizado, como *Trifolium repens* L., *Brassica napus* L., *Nicotiana sylvestris* Speg. e *N. suaveolens* Lehm., observou-se que a emissão máxima da fragrância floral total ou de um determinado componente coincide com o período de vôo dos potenciais polinizadores (JAKOBSEN & OLSEN, 1994; MacTAVISH *et al.*, 2000; LOUGHRIN *et al.*, 1991). Considerando-se que os polinizadores mais freqüentes de espécies de Myrtaceae brasileiras são abelhas, em especial

da família Apidae (GRESSLER *et al.*, 2006; NIC LUGHADHA & PROENÇA, 1997), é provável que se houver variações diuturnas no aroma floral dessas plantas, estas sejam mais evidentes no período de luz, uma vez que este grupo de insetos apresenta hábito diurno (GRESSLER *et al.*, 2006).

Os resultados obtidos para a composição química dos óleos voláteis das folhas de *C. guaviroba* e *M. splendens*, assim como os rendimentos, evidenciam uma ausência, em ambas as espécies, de um padrão de variação diuturna para estes compostos. Embora diversos estudos demonstrem o efeito da temperatura no aumento da produção de óleos voláteis, é provável que este efeito ocorra de forma mais direta em flores, ou em folhas nas quais que os óleos voláteis encontrem-se em canais resiníferos, como em coníferas (JAKOBSEN & OLSEN, 1994; HOLZKE *et al.*, 2006) ou em tricomas glandulares, como em LAMIACEAE (SIMÕES & SPITZER, 2004). Em Myrtaceae, os óleos voláteis em geral são armazenados em glândulas esquizolisígenas (isto é, formadas a partir da separação de células parenquimáticas) (LIST *et al.*, 1995; KALACHANIS & PSARAS, 2005) e é possível que este tipo de estrutura esteja menos susceptível a mudanças de temperatura, ou mesmo de outros fatores ambientais, tais como umidade relativa do ar.

Assim, a partir dos resultados obtidos neste trabalho, pode-se observar que para *C. guaviroba* e *M. splendens* não existe variabilidade diuturna na composição do óleo volátil da folhas. Diferenças foram observadas somente na produção destes metabólitos entre as duas épocas de estudo (inverno e verão).

Figura 4. Porcentagem das classes majoritárias de compostos (sesquiterpenos oxigenados e hidrocarbonetos sesquiterpênicos) nos óleos voláteis de folhas frescas de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga a cada três horas, das 12h de 01/06/06 às 12h de 02/06/06 (A) e das 12h de 03/12/06 às 12h de 04/12/06 (B).

Figura 5. Porcentagem das classes majoritárias de compostos (sesquiterpenos oxigenados e hidrocarbonetos sesquiterpênicos) nos óleos voláteis de folhas frescas de *Myrcia splendens* (SW.) DC. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga a cada três horas, das 12h de 01/06/06 às 12h de 02/06/06 (A) e das 12h de 03/12/06 às 12h de 04/12/06 (B).

Figura 6. Porcentagem dos hidrocarbonetos sesquiterpênicos majoritários de nos óleos voláteis de folhas frescas de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga a cada três horas, das 12h de 01/06/06 às 12h de 02/06/06. Valores acompanhados pela mesma letra não diferem entre si ($p \leq 0,05$).

Figura 7. Porcentagem dos sesquiterpenos oxigenados majoritários de nos óleos voláteis de folhas frescas de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga a cada três horas, das 12h de 01/06/06 às 12h de 02/06/06. Valores acompanhados pela mesma letra não diferem entre si ($p \leq 0,05$).

Figura 8. Porcentagem dos hidrocarbonetos sesquiterpênicos majoritários de nos óleos voláteis de folhas frescas de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga a cada três horas, das 12h de 03/12/06 às 12h de 04/12/06. Valores acompanhados pela mesma letra não diferem entre si ($p \leq 0,05$).

Figura 9. Porcentagem dos sesquiterpenos oxigenados majoritários de nos óleos voláteis de folhas frescas de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga a cada três horas, das 12h de 03/12/06 às 12h de 04/12/06. Valores acompanhados pela mesma letra não diferem entre si ($p \leq 0,05$).

Figura 10. Porcentagem dos compostos majoritários dos óleos voláteis de folhas frescas de *Myrcia splendens* (Sw.) DC. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga a cada três horas, das 12h de 01/06/06 às 12h de 02/06/06.

Figura 11. Porcentagem dos compostos majoritários dos óleos voláteis de folhas frescas de *Myrcia splendens* (Sw.) DC. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga a cada três horas, das 12h de 03/12/06 às 12h de 04/12/06.

4. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ADAMS, R.P. Diurnal variation in the terpenoids of *Juniperus scopulorum* (Cupressaceae) - summer versus winter. *American Journal of Botany*, v.66, p.986-988, 1979.

ADAMS, R.P. *Identification of essential oil components by gas chromatography/mass spectrometry*. 4.ed. Carol Stream: Allured Publishing, 2007. 804p.

ALTENBURGER, R.; MATILE, P. Circadian rhythmicity of fragrance emission in flowers of *Hoya carnosa* R. Br. *Planta*, v.174, p.248-252, 1988.

AIMURA, G.I.; KÖPKE, S.; KUNERT, M.; VOLPE, V.; DAVID, A.; BRAND, P.; DABROWSKA, P.; MEFFEL, M.E.; BOLAND, W. effects of feeding *Spodoptera littoralis* on lima bean leaves: iv. diurnal and nocturnal damage differentially initiate plant volatile emission. *Plant Physiology*, v.146, p.965-973, 2007.

ASGHARI, G.; HOUSHFAR, G.; MAHMOUDI, Z. Seasonal Variation of Mono- and Sesquiterpenes in the Essential Oil of *Pycnocycla Spinosa* Decne. Exboiss. *Iranian Journal of Pharmaceutical Research*, v.1, p.61-63, 2002.

AYANOGLU, F.; MEHEMT, A.; HATAY, A. Effects of harvesting stages, harvesting hours and drying methods on essential oil content of lemon balm in Eastern Mediterranean. *International Journal of Botany*, v.1, p.138-142, 2005.

BRANDÃO, M.M. Diversidade genética de *Myrcia splendens* (Sw.) DC. (Myrtaceae) por marcadores ISSR em sistema corredor-fragmento semidecíduais no sul de Minas Gerais. Lavras. 2008. 80p. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal de Lavras.

BROWM, P.H.; WALSH, K.B. Functional Anatomy of the Oil Glands of *Melaleuca alternifolia* (Myrtaceae). *Australian Journal of Botany*, v.43, p.629-641, 1995.

BYLAITÈ, E.; VENSKUTONIS, R.; ROOZEN, J.; POSTHUMNUS, M. A. Composition of essential oil of costmary [*Balsamita major* (L.) Desf.] at different growth phases. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, v.48, p.2409-2414, 2000.

COLE, R.A.; HABER, W.A.; SETZER, W.N. The leaf oil composition of *Myrcia splendens* from Monteverde, Costa Rica. *Iranian Journal of Pharmaceutical Research*, v.1, p.61-63, 2007.

COLLINS BRAGA 1988

DE MORAES, C.M.; MESCHER, M.C.; TUMLINSON, J.H. Caterpillar-induced nocturnal plant volatiles repel nonspecific females. *Nature*, v.410, p.577-580, 2001.

DELL, B.B.; McCOMB, A.J. Plant resins - Their formation, secretion and possible functions. In: H. W. Woolhouse (ed.). *Advances in Botanical Research*. London Academic Press, 1987.

DUDAREVA, N.; MARTIN, D.; KISH, C.M.; KOLOSOVA, N.; GORENSTEIN, N.; FÄLDT, J.; MILLER, B.; BOHLMANN, J. (*E*)- β -ocimene and myrcene synthase genes of floral scent biosynthesis in Snapdragon: function and expression of three terpene synthase genes of a new terpene synthase subfamily. *Plant Cell*, v.15, n.5, p.1227-1241, 2003.

FARMACOPÉIA BRASILEIRA. 4 ed. Parte II Fascículo 2. In: Diário Oficial, Suplemento n.1. 2001.

EFFEMERT, U.; DINSE, C.; PIECHULLA, B. Influence of green leaf herbivory by *Manduca sexta* floral volatile emission by *Nicotiana suaveolens*. *Plant Physiology*, v.146, p.1996-2007, 2008.

GRESSLER, E.; PIZO, M.A.; MORELLATO, L.P.C. Polinização e dispersão de sementes em Myrtaceae do Brasil. *Revista Brasileira de Botânica*, v.29, n.4, p.509-530, 2006.

HARBORNE, J.B. Introduction to ecological biochemistry. 4ed. London: Academic Press.. 1993, 352p.

HARBONE, J.B. Twenty-five years of chemical ecology. *Natural Products Reports*, v.18, n.4, p.361-379, 2001.

HOLZKEA, C.; HOFFMANNB, T.; JAEGERC, L.; KOPPMANNA, R.; ZIMMER, W. Diurnal and seasonal variation of monoterpene and sesquiterpene emissions from Scots pine (*Pinus sylvestris* L.). *Atmospheric environment*, v.40, p.3174-3185, 2006.

HENDEL-RAHAMANIN, K.; MASCI, T.; VAINSTEIN, A.; WEISS, D. Diurnal regulation of scent emission in rose flowers. *Planta*, v.226, p.1491-1499.

HOPFINGER, J.A.; KUMAMOTO, J.; SCORA, R.W. Diurnal variation in the essential oils of Valencia orange leaves. *American Journal of Botany*, v.66, n.2, p.111-115, 1979.

JAKOBSEN, H. B.; OLSEN, C. E. Influence of climatic factors on emission of flower volatiles in situ. *Planta*, v.192, p.365-371, 1994.

KALACHANIS, D. & PSARAS GK. Structure and development of the secretory cavities of *Myrtus comunis* leaves. *Biologia Plantarum*, v. 49, n. 1, p.105-110, 2005.

KELSEY, R. G.; REYNOLDS, G. W, RODRIGUEZ, E. The chemistry of biologically active constituents secreted and stored in plant glandular trichomes. In: E. Rodrigues; P. L. Healey; I. Menta (eds.). *Biology and chemistry of plant trichomes*. New York: Plenum Press, 1984, p.113-132.

KESZEI, A.; BRUBAKERB, C.L.; FOLEY, W.J. A molecular perspective on terpene variation in Australian Myrtaceae. *Australian Journal of Botany*, v.56, p.197–213, 2008.

LANDRUM, L.R. *Campomanesia, Pimenta, Blepharocalyx, Legrandia, Acca, Myrrhinium, and Luma (Myrtaceae)*. *Flora Neotropica*, n.45, p. 1-178, 1986.

LEACH, G.L.; WHIFFIN, T. Ontogenetic, seasonal and diurnal variation in leaf volatile oils and leaf phenolics of *Angophora costata*. *Australian Journal of Systematic Botany*, v.2, p.99-111, 1989.

LIMBERGER, R.P.; SOBRAL, M.E.G.; HENRIQUES, A.T., MENUT, C.; BESSIÉRE, J.M. Óleos voláteis de espécies de *Myrcia* nativas do Rio Grande do Sul. *Química Nova*, v.27, n.6, p.916-919, 2004.

LIMBERGER; R.P.; APEL, M.A.; SOBRAL, M.E.G.; MORENO, P.R.H.; HENRIQUES, A.T. Chemical composition of essential oils from some *Campomanesia* species (Myrtaceae). *Journal of Essential Oil Research*, v.13, p.113-115, 2001.

LIST, S.; BROWN, P.H.; WALSH, K.B. Functional anatomy of the oil glands of *Melaleuca alternifolia* (Myrtaceae). *Australian Journal of Botany*, v.43, p.629-641, 1995.

LOPES, N.P.; KATO, J.M.; ANDRADE, H.A.; MAIA, G.S.; YOSHIDA, M. Circadian and seasonal variation in the essential oil from *Virola surinamensis* leaves. *Phytochemistry*. v.46, n.4., p. 689-693, 1997.

LORENZI, H. *Árvores brasileiras: manual de identificação e cultivo de plantas arbóreas nativas do Brasil*. Nova Odessa: Plantarum, 1998. 368p.

LOUGHRIN, J.H.; HAMILTON-KEMP, T.R.; ANDERSEN, R.A.; HILDEBRAND, D.F. Circadian rhythm of volatile emission from flowers of *Nicotiana sylvestris* and *N. suaveolens*. *Physiologia Plantarum*, v.83, p.492-496, 1991.

MacTAVISH, HS; DAVIS, NW; MENARY, R. Emission of volatile from brown boronia flowers: some comparative observations. *Annals of botany*, v.86, p.347-354, 2000.

MARCHIORI, J.N.C. & SOBRAL, M. *Dendrologia das angiospermas: Myrtales*. Santa Maria: Editora da UFSM. 1997, 304p.

MARTIN, D.M.; GERSHENZON, J.; BOHLMANN, J. Induction of volatile terpene biosynthesis and diurnal emission by methyl jasmonate in foliage of Norway spruce, *Plant Physiology*, v. 132, p.1586-1599, 2003.

MATILE, P.; ALTENBURGER, R. Rhythms of fragrance emission in flowers. *Planta*, v.174, p.242-247 1988.

OMATA, A.; YOMOGIDA, S.; NAKAMURA, S. OHTA; T.; IZAWA, Y.; WATANABE, Y. (1991) The scent of lotus flowers . *Journal of Essential Oil Research*, v.3, p.435-440, 1991.

PARE, P.W.; TUMLINSON, J.H. Plant volatiles as a defense against insect herbivores. *Plant Physiology*, v.121, p.325–332, 1999.

PICCONE, J.M.; CLERY, R. A.; WATANABE, N.; MacTAVISH, H.S.; TURNBULL, C.G.N., Rhythmic emission of floral volatiles from *Rosa damascene semperflorens* cv. 'Quatre Saisons'. *Planta* 219, 468-478, 2004.

PIO, C.A.; SILVA, P.A.; CERQUEIRA, M.A., NUNES, T.V. Diurnal and seasonal emissions of volatile organic compounds from cork oak (*Quercus suber*) trees. *Atmospheric environment* 39, 1817-1827, 2005.

PRIEME, A., KNUDSEN, T.B., GLASIUS, M., CHRISTENSEN, S. Herbivory by the weevil, *Strophosoma melanogrammum*, causes several fold increase in emission of monoterpenes from young Norway spruce (*Picea abies*). *Atmospheric Environment*, v.34, p.711-718, 2000.

RAMEZANI, S; RAMEZANI, F; RASOULI F; GHASEMI, M; FOTOKIAN, M.H. Diurnal variation of the essential oil of four medicinal plants species in central region of Iran. *Research Journal of Biological Sciences* 4, 103-106, 2009.

SANDRA, P. & BICCHI, C. Capillary Gas Chromatography in Essential Oil Analysis. 1987. New York: Huething. pp.259-274.

SILVA, M.G.V.; CRAVEIRO, A.A.; ABREU-MATOS, F.J.; MACHADO, M.I.L.; ALENCAR, J.W. Chemical variation during daytime of constituents of the essential oil of *Ocimum gratissimum* leaves. *Fitoterapia*, v.70, p.32-34, 1999.

SIMÕES, C.M.O.; SPITZER, V. Óleos voláteis. In: SIMÕES, C.M.O.; SCHENKEL, E.P.; GOSMANN, G.; MELLO, J.C.P.; MENTZ, L.A.; PETROVICK, P.R., orgs. *Farmacognosia: da planta ao medicamento*. 3.ed. Porto Alegre: UFRGS; Florianópolis: UFSC, 2001. cap.18, p.397-420.

LUGHADHA, E.N.; PROENÇA, C. A Survey of the Reproductive Biology of the Myrtoideae (Myrtaceae). *Annals of the Missouri Botanical Garden*, v.83, n.4. p.480-503, 1996.

VEIGA, V.F.; PINTO, A.C. The essential oil composition of *Copaifera trapezifolia* Hayne leaves. *Journal of Essential Oil Research*, v.18, p.430-431. 2006.

YALDIZ, G.; SEKEROGLU, N.; ÖZGÜVEN, M.; KIRPIK, M. Seasonal and diurnal variability of essential oil and its components in *Origanum onites* L. grown in the ecological conditions of Çukurova. *Grasas y Aceites*, v.56, n.4, p.254-258, 2005.

VEIGA, V.F.; PINTO, A.C.; DE LIMA, H.C. Essential oil composition of *Copaifera trapezifolia* Hayne leaves. 2006. *Journal of essential oil research*, v.18, n.4, p.430-432.

ZHUANG, X.; KLINGEMAN, W.E.; HU, J. CHEN, F. Emission of volatile chemicals from flowering dogwood (*Cornus florida* L.) Flowers *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, v.56, n.20, p.9570-9574, 2008.

CAPÍTULO 3

Variações sazonais nos óleos voláteis de
quatro espécies de Myrtaceae do
Parque Estadual das Fontes do Ipiranga
(São Paulo, SP)

ABSTRACT

Seasonal fluctuations in meteorological aspects, such as precipitation, temperature and radiation may lead to changes in volatile oil yield and chemical composition. Thus, the aim of this work was to evaluate seasonal effects in the essential oil of Myrtaceae species native to the Atlantic Rain Forest, since there is a lack of scientific study about those aspects. Oils were extracted from dried leaves of *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk., *Myrcia splendens* (Sw.) DC., *Myrciaria floribunda* O. Berg e *Myrcia macrocarpa* DC. collected in the State Park Fontes do Ipiranga, every month for two and a half years. Chemical composition was analyzed by GC-MS and data was used in a Principal Component Analysis, in order to evaluate variability among sample units. Xanthoxyline was the main compound in *M. floribunda* and the variations occurred randomly while for *C. guaviroba* and *M. splendens*, sesquiterpenes were the major constituents and there were variations among the analyzed years, which could not be directly associated to any chemical compound or group of compounds. The other species, *M. macrocarpa*, showed an inversion in the major class of constituents along the years: monoterpene hydrocarbons were more abundant up to the end of 2006, whilst in 2007, sesquiterpenes, mainly oxygenated, were the predominant class. Great individual variability was found for the three species and for none of them the changes could be associated to meteorological aspects, suggesting that seasonality is not a determinant factor for volatile oil variations observed and that therefore they must be a result of endogenous features.

RESUMO

As flutuações sazonais dos fatores meteorológicos, como pluviosidade, temperatura e radiação, podem levar a alterações na produção e na composição química de óleos voláteis. Assim, este estudo teve como o objetivo avaliar o efeito de sazonalidade na composição química de óleos essenciais de espécies de Myrtaceae nativas da Mata Atlântica, para as quais estudos deste tipo ainda são escassos. Para isto, foram coletadas mensalmente, durante dois anos e meio, folhas de três indivíduos de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk., *Myrcia splendens* (Sw.) DC., *Myrciaria floribunda* O. Berg e *Myrcia macrocarpa* DC. no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga, das quais se extraíram os óleos voláteis após secagem a sombra. A composição química dos óleos foi analisada por CG-EM e a partir dos dados obtidos foi realizada análise de componentes principais para se avaliar a variabilidade entre as unidades amostrais. *M. floribunda* apresentou xantoxilina como componente majoritário e as variações entre os meses analisados ocorreram de forma randômica, não sendo verificado nenhum padrão, enquanto em *C. guaviroba* e *M. splendens* os sesquiterpenos foram os constituintes mais abundantes, tendo sido observadas diferenças na composição dos óleos entre os anos, as quais não foram diretamente associadas a nenhum constituinte ou grupo de constituintes. Já para *M. macrocarpa*, verificou-se uma alteração na proporção das classes de compostos majoritários: até o final de 2006, os hidrocarbonetos monoterpênicos eram mais abundantes, enquanto em 2007 houve um aumento nos teores de compostos sesquiterpênicos, principalmente oxigenados. Grande variabilidade individual foi observada para as três espécies e para nenhuma delas as alterações verificadas estavam relacionadas às mudanças meteorológicas, sugerindo que para elas a sazonalidade não é determinante nas variações observadas em seus óleos voláteis e que estas devem ser resultantes de aspectos endógenos.

1. INTRODUÇÃO

O ambiente físico desempenha papel preponderante no crescimento e no desenvolvimento das plantas. Ao longo de um ano, ocorrem flutuações na pluviosidade, na radiação solar e na temperatura que podem promover alterações no metabolismo vegetal. As mudanças envolvem desde as taxas fotossintéticas, até a síntese de metabólitos secundários, uma vez que a disponibilidade de recursos promove efeitos regulatórios na atividade das enzimas chaves de suas rotas biossintéticas (CASTRO *et al.*, 2005; KOUKI & MANETAS, 2002; CARUSO *et al.*, 2002). A atividade da enzima responsável pela síntese dos precursores fenipropanoídicos, fenilalanina amônia liase, têm sua atividade modificada pela temperatura, pela disponibilidade hídrica, e pela luminosidade, dentre outros fatores (JANAS *et al.*, 2000; CHAKRABORTY *et al.*, 2001; LAVOLA *et al.*, 2000). Da mesma forma, as duas vias de síntese do difosfato de insopentenila (MVA e DXP), precursor dos terpenóides, parecem ser influenciadas pela temperatura e pela disponibilidade de luz (ARAKI *et al.*, 2000; FUENTES *et al.*, 2000; STAUDT *et al.* 1998; LORETO, 1993).

Por esta razão, a sazonalidade é um fator fundamental a ser considerado quando se trata da variabilidade química de óleos voláteis. Alterações na composição do óleo obtido em diferentes épocas do ano foram demonstradas para muitas espécies. Diferenças significativas foram observadas, por exemplo, nos teores de acetato de nerila, acetato de geranila e citronelal no óleo volátil de folhas de *Citrus limon* (L) Burm. f. coletadas nas distintas estações, sendo os maiores valores observados na primavera (VEKIARI *et al.*, 2002). Em *Pycnocycla spinosa* Decne. Exboiss, o óleo essencial da parte aérea era mais rico em óxido de cariofileno em junho do que nos outros meses do ano (ASHGARI *et al.*, 2002). Em contrapartida, em folhas *Laurus novocanariensis* Rivas Mart. *et al.* a composição dos óleos voláteis foi praticamente idêntica nas diferentes estações anuais (RODILLA *et al.*, 2008).

A fenologia, associada à sazonalidade para a maioria das espécies, também é um dos fatores relacionados às alterações na composição química de óleos essenciais. Em *Artemisia campestris* L. var. *glutinosa* (Gay ex Bess.) Y.R. Ling, os teores do monoterpene γ -terpineno foram significativamente mais elevados nas partes aéreas de plantas no estágio vegetativo do que naquelas em floração (JUTEAU *et al.*, 2002). Já para *Salvia officinalis* L., a floração não alterou a composição do óleo volátil das folhas, embora a composição do óleo das flores tenha sido distinta, apresentando uma maior razão tujona/ α -pineno (PERRY *et al.*, 1999). De

maneira similar, observou-se que as alterações sazonais encontradas nos óleos voláteis de *Artemisia molinieri* Quézel, Barbero & Loisel não estavam correlacionadas ao estágio fenológico, mas sim às condições ambientais (MASOTTI *et al.*, 2003).

Estudos das flutuações sazonais na composição química já foram realizados para os óleos voláteis de algumas espécies de Myrtaceae. Em *Eucalyptus ovata* Labill. e *E. camphora* R.T. Baker foram observadas diferenças marcantes nos conteúdos de limoneno, cineol e linalool, dependendo da época de colheita (SIMMONS & PARSONS, 1987). Por outro lado, LEACH & WHIFFIN (1989) não encontraram alterações na composição do óleo de *Angophora costata* (Gaertn.) Britten que pudessem ser associadas a sazonalidade. O mesmo resultado foi observado com espécie brasileira *Myrcia myrtifolia* DC, cuja composição do óleo de folhas coletadas mensalmente pelo período de dois anos não apresentou alterações significantes (CERQUEIRA *et al.*, 2007). Todavia, a existência de flutuações sazonais na composição química dos óleos voláteis ainda é desconhecida para a grande maioria das espécies de Myrtaceae que ocorrem naturalmente em ecossistemas nativos. Embora existam estudos da composição química dos óleos de algumas dessas espécies, estes são normalmente pontuais. Assim, o objetivo do trabalho apresentado neste Capítulo foi analisar a composição do óleo volátil de folhas de quatro espécies da família que ocorrem no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga (São Paulo, SP): *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. e *Myrcia splendens* (Sw.) DC., ambas estudadas quanto à variação diuturna no Capítulo anterior, além de *Myrciaria floribunda* O. Berg., cuja composição química e atividades biológicas do óleo volátil foram investigadas previamente (APEL, 2001; APEL *et al.*, 2006) e *Myrcia macrocarpa* DC., para qual não existem estudos anteriores sobre a composição do óleo essencial, embora ela seja freqüente em levantamentos florísticos em fragmentos de Mata Atlântica (MARTINS *et al.*, 2008; HIRATA *et al.*, 2006; ZIPARRO *et al.*, 2005).

2. MATERIAL E MÉTODOS

2.1. Material vegetal

Foram utilizados os mesmos indivíduos de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk., *Myrcia splendens* (Sw.) DC. apresentados no Capítulo 2.

Os espécimes *Voucher* de *Myrciaria floribunda* O. Berg estão depositados no Herbário de Instituto de Botânica sob inscrição Árvore 954, Árvore 771, Souza 46, e os de *Myrcia macrocarpa* DC., Árvore 969, Árvore 970, Souza 05. Folhas íntegras e completamente expandidas destes indivíduos foram coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga em meses alternados de março a maio de 2005, e mensalmente de julho de 2005 a julho de 2007, sendo posteriormente secas à sombra até peso constante para a extração dos óleos voláteis.

2.2. Análise química dos óleos voláteis

A extração dos óleos voláteis das folhas secas e sua análise química foram realizadas segundo a metodologia descrita no Capítulo anterior.

2.3. Análise estatística

Para a avaliação dos efeitos sazonais sobre a composição dos óleos voláteis, foi desenvolvida uma metodologia para análise de componentes principais (PCA) utilizando os dados brutos obtidos da análise por cromatografia a gás acoplada à espectrometria de massas. Esta metodologia foi adaptada para o experimento em colaboração com o Prof. Dr. Marcus T. Scotti da Universidade Federal da Paraíba baseando-se naquela anteriormente descrita por PAVÓN *et al.* (2006) para amostras de petróleo.

Os dados dos espectros de massas, mais precisamente da abundância dos diferentes fragmentos (m/z) em função do tempo de retenção dos constituintes, foram exportados em arquivo texto no formato ASCII. As séries de dados foram submetidas ao software MATLAB

6.5 para obtenção dos gráficos de superfícies de contorno de intensidade de m/z em função do tempo para cada amostra, conforme mostrado na Figura 1.

Figura 1. Gráfico de superfície de contorno do espectro de massas do óleo volátil de folhas secas de um dos espécimes de *Myrcia macrocarpa* DC. coletadas em novembro de 2006.

Posteriormente, após análise visual dos gráficos de superfície de contorno, as faixas de fragmentos de massa (m/z) selecionadas foram submetidas à análise de componentes principais (PCA) (WOLD *et al.*, 1987). Para isto, foi utilizado o software Uncrambler versão 9.5 (CAMO Process AS, Noruega), sendo os dados previamente submetidos a uma normalização de área (equação 1). Esta transformação normaliza o espectro X_i , calculando a área sob a curva $\sum x_{ij}$. A normalização faz com que a área sobre a curva seja a mesma para todos os espectros.

$$newX_i = X_i / \sum_j x_{ij}$$

Equação 1

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O clima do Estado de São Paulo caracteriza-se por um verão úmido e um período de inverno seco com temperaturas amenas e precipitação pluviométrica reduzida, fatores que podem resultar em alterações nos metabolismos das espécies vegetais (MACHADO *et al.*, 2002). Os dados climáticos do período em que foi realizado o presente estudo são mostrados nas Figuras 1 e 2.

Figura 2. Precipitação mensal (mm) (barras) e temperatura média (°C) (linha) no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga de março/2005 a julho/2007. Dados fornecidos pelo Instituto Astronômico e Geofísico da Universidade de São Paulo.

Figura 3. Radiação total (MJ/m^2) no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga de março/2005 a julho/2007. Dados fornecidos pelo Instituto Astronômico e Geofísico da Universidade de São Paulo.

Estes dados indicam a existência de duas estações meteorológicas distintas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga, uma que vai de novembro a março, com níveis mais elevados de temperatura e pluviosidade (Figura 2), bem como maior incidência de radiação (Figura 3), em oposição a um período de temperaturas mais baixas, menor precipitação e menor radiação, que vai de maio a agosto, sendo setembro, outubro e abril meses com características intermediárias. Essa separação fica evidente na análise de PCA dos dados meteorológicos para o período de estudo (Figura 4), que mostra uma nítida separação entre estes meses. De um lado, concentram-se os meses de novembro a março e de outro, os meses de maio a agosto, com os meses de setembro, abril e outubro mais ao centro.

Figura 4. Análise de componentes principais (PCA) dos meses de estudo com base nos dados de precipitação, temperatura e radiação fornecidos pelo Instituto Astronômico e Geofísico da Universidade de São Paulo.

A sazonalidade pode modificar o rendimento de óleos voláteis e, em geral, valores mais elevados estão associados aos meses de verão e/ou a períodos que antecedem a fase reprodutiva (FLAMINI *et al.*, 2007; ANGELOPOULOU *et al.*, 2002; BYLAITÉ *et al.*, 2000). Neste estudo, os rendimentos de *C. guabviroba* variaram entre 0,22% a 0,63%, de *M. splendens*, de 0,6 a 0,8%, de *M. macrocarpa*, de 0,12 a 0,43% e de *M. floribunda*, de 0,5 a 1,8%. Para as quatro espécies, foi observada uma tendência a aumento de rendimento de óleo volátil nos meses mais quentes e chuvosos, porém a análise estatística não mostrou diferença significativa entre os valores. É provável que isso resulte das variações individuais, já que no Capítulo 2 foi possível observar uma variação significativa no rendimento dos óleos de *M. splendens* e *C. guaviroba*, quando foram utilizados os dados de todas as coletas ao longo do dia, nas duas datas em que o experimento de variação diuturna foi realizado, totalizando um valor de “n” igual a 54.

A análise da composição química do óleo das folhas de *M. floribunda* ao longo deste período é mostrada na Tabela 1. O constituinte majoritário foi a acetofenona xantoxilina, cujos teores variaram bastante, de 55 a 100% do óleo volátil, seguida dos sesquiterpenos oxigenados óxido de cariofileno (até 28,5%), espatulenol (até 27,5%) e dos

hidrocarbonetos sesquiterpênicos *E,E*- α -farneseno (até 11,1%) e β -cariofileno (até 28,5%). A composição química dos espécimes analisados foi muito similar a de um espécime coletado no Rio Grande do Sul, apresentado os mesmos constituintes sesquiterpênicos e tendo e tendo xantoxilina como constituinte majoritário, com teor de 41,3% (APEL, 2001).

Já a composição dos óleos voláteis de *C. guaviroba* (Tabela 2) e *M. splendens* (Tabela 3) apresentaram majoritariamente substâncias sesquiterpênicas, como havia sido observado para folhas frescas em duas outras datas de coleta destas espécies, no estudo descrito no Capítulo anterior.

Em *C. guaviroba*, os constituintes majoritários foram espatulenol, que variou desde períodos em que não foi detectado (março/2006) até 25,5% do óleo, α -cadinol, (de 0,9 a 25,0%), δ -cadineno, (de 0,3 a 18,4%) e o 1-epi-cubenol, (de 1,0 a 20,7%). Os sesquiterpenos oxigenados foram os mais abundantes em todos os meses de análise, com exceção de março de 2006, em que sua proporção foi de 38,2%, possivelmente em função da ausência de espatulenol neste período. Nos demais meses, a proporção dessa classe de compostos variou entre 53,5 a 85,1% do óleo volátil da espécie.

Analisando-se a composição dos óleos voláteis de *M. splendens* (Tabela 2), observamos que para esta espécie a classe majoritária também é a dos sesquiterpenos oxigenados, chegando a constituir até 90,4% do óleo volátil. Os constituintes majoritários foram o espatulenol, que não foi detectado somente em março/2005, atingindo 33,7% do óleo volátil e o acetato de guaiolila, que chegou ao teor de 17,0%, não sendo detectado somente em julho/2005. O hidrocarboneto sesquiterpênico apresentou teores altos até setembro/2005, chegando a ser o constituinte majoritário do óleo em março/2005. Por este motivo, este foi o único período em que a classe de hidrocarbonetos sesquiterpênicos (58,9%) apresentou maior proporção do que a dos sesquiterpenos oxigenados. Todavia, vale destacar que embora não tenham sido observadas alterações nos níveis de oxidação do óleo, foi possível notar um aumento na complexidade da composição química, isto é, uma maior diversidade de estruturas de sesquiterpenos oxigenados, entre julho/2006 e julho/2007.

M. macrocarpa foi a única das quatro espécies estudadas que apresentou compostos monoterpênicos em concentrações altas no seu óleo volátil, sendo inclusive a classe principal na maior parte dos meses analisados (25,1 a 79,5%). No entanto, no ano de 2007, seus teores caíram e nenhum composto dessa classe chegou a ser detectado em

março, maio e julho desse ano. Nesse mesmo período, os compostos sesquiterpênicos, principalmente os oxigenados, estiveram presentes em maior proporção, atingindo 76,2%. Os constituintes monoterpênicos majoritários foram α -pineno (até 27,0%) e β -pineno (até 18,6%), enquanto o principal monoterpene oxigenado foi o terpinen-4-ol (até 10,8%). Já o principal hidrocarboneto sesquiterpênico foi o biciclogermacreno (até 8,9%), enquanto entre os sesquiterpenos oxigenados os compostos globulol, viridiflorol, guaíol e α -, β - e γ -eudesmol apresentaram níveis próximos, entre 1,0 a 5,0%, com exceção de julho/2006, em que o teor de globulol foi de 20,2%.

A melhor ferramenta encontrada para se verificar se as variações na composição dos óleos voláteis dessas quatro espécies estavam associadas ao período de coleta, isto é, ao efeito de sazonalidade, foi a análise de componentes principais (PCA) (WOLD *et al.*, 1987). Esse método estatístico é muito empregado nas análises de “fingerprints” de metabólitos (BAILEY *et al.*, 2003; PAVÒN *et al.*, 2006; PARVEEN *et al.*, 2007; KAPETANOS *et al.*, 2008), pois consegue sumarizar a informação contida em grandes quantidades de dados espectrais transformando as variáveis originais em uma série muito menor de variáveis. Em muitos estudos de variação sazonal de óleos essenciais são utilizados apenas os componentes majoritários e em poucos casos o espectro de ressonância magnética nuclear de ^1H do óleo total. A vantagem da metodologia desenvolvida para este estudo é que ela permite que se comparem as unidades amostrais com base na composição total do óleo obtida por CG-EM, e não apenas com os valores de determinados constituintes selecionados, já que todos os compostos detectados são empregados na análise.

Tabela 1. Composição química média (%) dos óleos voláteis de folhas secas de *Myrciaria floribunda* O. Berg coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga em meses alternados de março a maio de 2005, e mensalmente de julho de 2005 a julho de 2007. IK - Índice de Retenção de Kováts.

Composto	IK	2005										2006										2007						
		mar	mai	jul	ago	set	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul	ago	set	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul
β-cariofileno	1417	-	-	-	-	-	1,5	-	-	-	-	-	-	-	-	3,9	5,4	8,2	-	8,1	3,5	-	5,5	-	6,4	-	-	5,5
α-humuleno	1452	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
9-epi-β-cariofileno	1464	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
germacreno D	1484	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,8	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
biciclogermacreno	1500	-	-	-	-	-	2,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
E,E-α-farneseno	1505	-	-	-	-	-	11,1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	7,6	3,2	-	5,7	-	-	-	-	-	-	-	-
δ-amorfenos	1551	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
espatulenol	1577	-	-	-	-	-	2,1	-	-	-	-	-	-	-	-	5,8	11,6	11,6	8,2	19,6	21,6	15,5	6,0	-	14,6	23,4	27,5	9,2
óxido de cariofileno	1582	-	-	-	-	-	1,4	-	-	-	-	-	-	-	-	13,9	5,6	4,6	4,8	11,4	18,1	22,2	13,1	-	28,5	16,7	-	10,3
xantoxilina	1664	100	100	100	100	100	82	100	100	100	100	100	100	100	100	76	67	72	87	55	57	62	75	100	50	60	72	75
hidrocarbonetos monoterpênicos		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
monoterpenos oxigenados		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
hidrocarbonetos sesquiterpênicos		-	-	-	-	-	14,6	-	-	-	-	-	-	-	-	3,9	16,3	11,3	-	13,8	3,5	-	5,5	-	6,4	-	-	5,5
sesquiterpenos oxigenados		-	-	-	-	-	3,5	-	-	-	-	-	-	-	-	19,7	17,2	16,2	13,0	31,0	39,7	37,6	19,1	-	43,1	40,1	27,5	19,5
outros		100	100	100	100	100	82	100	100	100	100	100	100	100	100	76	67	72	87	55	57	62	75	100	50	60	72	75

Tabela 2. Composição química média (%) dos óleos voláteis de folhas secas de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga em meses alternados de março a maio de 2005, e mensalmente de julho de 2005 a julho de 2007. Não foi realizada coleta em setembro de 2005, pois os espécimes haviam perdido completamente as folhas neste período. IK - Índice de Retenção de Kováts. N.I. - Composto não-identificado.

Composto	IK	2005										2006										2007						
		mar	mai	jul	ago	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul	ago	set	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul	
pentanona	687	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
propanoato de butila	907	0,9	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
α-pineno	932	-	0,5	2,7	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
sabineno	969	-	-	0,5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
β-pineno	974	-	0,4	1,2	0,3	-	-	0,2	-	-	-	-	0,3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
γ-terpineno	1054	-	-	0,4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
trans-β-ocimeno	1056	-	-	-	-	-	-	-	-	0,2	-	0,2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
terpinen-4-ol	1177	-	-	1,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
δ-elemeno	1338	2,3	-	-	-	-	-	-	-	1,8	1,2	1,1	0,2	0,4	-	-	0,4	0,9	0,3	0,5	1,2	0,6	-	0,4	1,8	0,2		
α-ylangeno	1345	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,3	-	-	0,1	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
α-copaeno	1384	1,7	0,4	0,6	0,4	0,3	0,3	0,3	0,2	-	0,6	0,6	0,4	0,1	0,5	-	-	0,2	0,4	0,2	-	0,1	0,2	-	0,5	0,3	-	
β-bourboneno	1394	-	-	0,6	0,6	-	-	-	-	-	0,5	0,5	0,4	0,4	0,9	-	-	-	0,1	0,1	-	0,1	0,2	-	0,4	0,4	0,1	
β-elemeno	1410	1,1	1,0	1,4	1,2	1,9	0,5	0,9	0,6	0,8	2,7	2,1	1,8	1,3	1,9	2,2	-	0,7	1,4	1,1	-	2,0	0,9	0,7	2,8	3,2	2,1	
α-gurjuneno	1417	0,8	0,8	1,0	0,8	0,5	0,5	0,7	0,4	0,6	0,9	1,0	0,7	0,2	-	-	-	0,3	0,3	0,3	-	0,9	0,4	-	0,7	0,6	-	
E-cariofileno	1420	2,9	0,8	1,3	1,0	1,1	0,6	0,8	0,7	0,7	2,0	1,7	1,4	0,9	1,1	0,7	-	0,6	0,8	0,7	0,2	0,8	-	-	1,5	-	0,7	
β-ylangeno	1429	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
β-copaeno	1435	-	-	-	0,3	-	-	0,2	0,1	-	0,8	0,6	0,5	0,1	-	-	-	0,2	0,2	0,2	-	0,1	1,2	-	0,4	2,1	-	
α-guaieno	1443	0,6	0,6	-	-	-	0,1	0,6	0,3	-	0,3	0,2	0,5	-	-	-	-	0,1	0,2	-	-	0,1	0,1	-	0,2	0,3	-	

Tabela 2. (Continuação)

Composto	IK	2005										2006										2007						
		mar	mai	jul	ago	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul	ago	set	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul	
trans-muurolo-3,5-dieno	1447	0,7	0,7	0,6	1,0	-	0,3	0,2	0,6	0,3	1,2	0,4	0,9	0,1	-	-	6,5	0,3	-	-	-	0,1	0,2	-	-	-	-	
n.i. 1	1452	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,2	-	-	-	-	0,1	-	-	
α-humuleno	1458	1,2	0,6	0,8	0,7	0,8	0,5	0,4	0,1	0,5	1,2	1,0	0,6	0,6	0,8	-	-	0,4	0,3	0,4	0,2	0,5	0,5	-	0,6	0,6	0,1	
allo-aromadendreno	1460	1,2	1,1	1,0	0,9	0,2	0,1	0,8	0,4	0,3	0,3	0,9	1,2	0,1	-	-	-	0,1	0,3	0,1	-	0,2	0,1	-	0,2	-	0,2	
trans-cadina-1(6),4-dieno	1473	0,6	-	-	1,9	-	2,2	1,2	1,9	1,8	2,6	2,7	1,4	0,4	0,8	-	-	0,2	0,2	0,2	0,5	0,3	0,8	0,1	0,2	-	0,5	
germacreno D	1475	-	3,1	5,6	3,2	0,3	7,8	8,4	5,0	6,0	11,0	6,0	4,9	3,6	1,6	-	4,5	0,8	0,2	0,8	2,1	2,6	3,4	1,7	9,1	6,9	13,7	
γ-muuroloeno	1482	4,8	3,2	3,5	3,5	0,6	-	-	-	-	-	-	-	-	0,4	12,6	-	0,7	0,4	0,7	-	-	-	-	2,2	1,4	0,5	
α-amorfeno	1484	7,9	2,8	-	-	1,4	-	-	-	-	-	-	-	1,8	3,8	1,5	-	2,2	4,5	2,8	1,6	6,7	1,8	2,2	3,8	8,0	2,0	
β-selineno	1488	-	-	0,4	0,4	-	0,2	0,2	0,2	-	0,3	0,3	0,3	0,1	-	-	-	0,1	1,8	0,1	0,1	0,5	0,1	0,2	0,4	0,4	0,5	
δ-selineno	1492	-	1,4	-	-	-	-	-	-	-	1,3	0,8	0,8	1,6	0,9	3,3	-	3,9	1,0	2,9	0,7	1,1	0,9	-	0,1	0,3	2,4	
trans-muurolo-4(14),5-dieno	1493	-	-	1,0	0,9	4,5	0,6	0,6	0,1	0,7	-	-	-	0,2	-	-	-	0,3	0,2	-	-	-	-	-	0,3	-	-	
γ-amorfeno	1495	-	-	-	-	1,2	-	-	0,6	-	-	-	-	0,7	-	-	-	0,3	1,4	0,5	-	-	-	-	-	3,2	0,3	
biciclogermacreno	1500	-	4,6	4,7	4,0	3,3	3,9	4,1	3,3	3,5	4,6	3,3	3,0	1,3	0,8	-	-	1,2	2,1	1,2	-	2,2	1,3	-	1,5	-	-	
α-muuroloeno	1503	1,2	3,6	3,6	3,6	4,5	3,4	3,7	2,8	2,4	4,5	3,6	3,1	1,4	2,8	-	4,1	1,4	1,3	1,3	-	1,4	1,2	-	1,4	-	1,3	
δ-amorfeno	1508	-	-	0,9	1,0	-	0,9	0,8	0,8	1,2	0,6	0,5	0,5	1,1	1,2	-	3,6	0,2	1,5	0,9	1,2	1,3	-	-	0,5	0,4	0,2	
γ-cadineno	1520	0,7	-	3,6	3,4	4,4	3,3	3,1	2,8	2,8	4,5	3,7	2,7	1,1	4,1	0,9	-	1,9	1,2	3,6	1,9	1,1	1,5	0,3	2,2	0,7	1,9	
endo-1-bourbanol	1530	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
δ-cadineno	1540	4,1	1,5	10,6	11,1	18,4	17,3	17,7	10,4	10,9	16,8	12,7	11,1	9,1	4,8	1,8	10,1	6,9	4,7	5,6	5,3	5,3	6,8	0,3	5,7	1,8	4,4	
trans-cadina-1,4-dieno	1544	1,1	3,6	0,6	0,6	0,8	0,5	0,5	0,5	0,9	-	0,6	0,7	0,2	0,4	-	2,8	0,3	0,4	0,2	0,3	0,2	0,2	0,2	-	-	0,2	
α-cadineno	1557	-	3,5	0,8	0,8	1,1	0,7	0,8	0,7	1,3	0,9	0,9	0,8	0,3	0,5	0,8	2,7	0,6	0,3	0,3	0,1	0,5	0,3	0,2	0,6	-	0,1	
α-calacoreno	1560	-	-	-	0,3	0,2	-	-	-	-	1,4	0,2	-	0,9	0,9	-	-	0,7	0,8	0,8	-	0,4	-	-	-	1,3	0,2	
selina-3,7(11)-dieno	1568	1,3	10,3	-	-	0,5	-	0,4	0,8	0,5	0,6	0,7	-	1,7	0,9	1,3	3,8	1,9	1,1	1,3	1,6	0,8	0,9	4,0	0,7	0,3	0,5	
β-calacoreno	1571	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,5	0,4	-	3,0	-	0,3	0,5	1,1	0,9	0,5	1,5	0,7	0,4	1,1	
palustrol	1573	0,7	2,2	0,6	0,3	-	-	-	-	0,5	2,0	-	-	-	1,1	-	-	1,1	0,2	0,6	0,2	0,6	-	-	-	0,8	-	
maaliol	1576	-	4,2	0,5	0,9	-	0,3	0,5	-	1,8	2,1	-	0,7	0,7	-	-	3,2	-	1,6	0,3	-	0,7	0,2	-	0,3	0,8	-	
espatulenol	1578	4,8	1,1	2,1	2,0	4,1	1,8	0,4	2,3	1,7	-	1,6	2,1	10,5	7,9	13,6	8,8	18,3	14,7	17,2	20,1	8,3	23,0	25,5	6,4	6,8	2,6	
n.i. 2	1581	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	

Tabela 2. (Continuação)

Composto	IK	2005									2006									2007							
		mar	mai	jul	ago	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul	ago	set	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul
n.i. 3	1583	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
cis-β-elemenona	1587	1,6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2,5
viridiflorol	1592	9,1	3,1	4,0	2,7	2,1	2,8	2,9	6,1	2,8	1,0	3,1	2,3	1,7	3,0	6,4	4,7	3,2	1,7	3,0	7,2	3,7	8,9	9,9	2,7	4,2	2,3
cubeban-11-ol	1595	2,9	-	0,7	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,3	3,2	0,6	-	-	-	-	-	2,3	-	-	-
guaiol	1610	4,6	5,4	-	2,1	0,7	0,3	0,7	0,5	5,1	1,5	1,4	4,1	2,5	4,4	3,7	-	1,6	2,4	1,9	1,8	2,8	1,9	2,0	1,0	4,8	3,1
rosifoliol	1611	3,4	-	2,7	1,8	-	-	-	-	1,1	0,3	-	1,2	0,7	2,0	1,1	-	0,2	1,3	0,5	1,8	2,2	1,2	2,5	1,1	1,5	1,3
β-oplopenona	1612	-	0,5	-	-	-	-	-	-	-	-	0,4	0,5	1,0	1,9	1,4	-	1,2	1,1	0,1	1,1	0,7	0,1	0,4	0,8	0,3	0,9
1,10-di-epi-cubenol	1627	0,7	19,2	1,4	2,9	1,3	0,7	0,2	1,7	4,3	1,4	0,9	1,7	0,7	2,0	1,4	-	1,3	1,6	1,0	3,1	0,8	5,2	1,2	0,6	1,2	1,7
junenol	1637	0,6	-	0,8	-	2,3	1,9	1,5	0,6	2,7	-	0,4	0,6	0,8	0,8	4,0	-	1,2	0,8	1,8	1,8	0,5	1,6	1,2	5,9	1,3	4,9
10-epi-γ-eudesmol	1645	3,1	2,8	-	2,9	0,3	0,3	0,2	3,1	1,4	0,6	2,7	2,7	1,5	2,9	1,6	-	0,4	2,1	1,8	1,1	7,2	2,1	7,4	5,8	7,0	3,1
1-epi-cubenol	1652	1,0	9,9	2,8	19,5	15,0	18,2	17,6	20,7	10,1	2,7	17,3	15,0	17,5	10,4	7,9	13,8	5,1	6,4	6,3	4,7	2,3	3,2	1,6	2,9	8,0	9,8
cis-cadin-4-en-7-ol	1654	2,0	2,7	15,8	2,7	-	-	-	-	5,0	-	4,5	4,5	1,8	5,0	4,0	5,7	1,8	3,4	2,0	3,1	1,7	2,9	1,8	1,0	4,4	4,6
epi-α-cadinol	1655	5,0	0,4	2,7	-	4,2	4,5	4,2	4,7	4,7	0,3	-	2,2	1,8	3,5	3,8	-	1,6	3,5	1,2	1,5	1,8	3,5	5,5	5,1	7,8	3,8
α-cadinol	1659	2,0	0,9	15,1	17,6	19,9	23,9	25,0	23,5	19,5	21,0	20,2	20,8	18,8	13,7	10,6	19,6	7,2	10,3	7,4	8,2	14,4	7,2	5,2	10,6	2,7	18,8
valerianol	1663	2,7	-	1,0	0,5	0,4	0,3	-	0,3	-	5,1	1,0	0,5	0,1	0,3	3,4	-	3,3	2,3	3,9	4,3	2,8	1,9	2,2	1,9	4,9	3,6
cis-calاملen-10-ol	1666	-	-	-	0,4	2,8	0,9	-	0,5	-	0,3	0,2	0,4	-	0,3	4,0	-	2,5	-	1,0	2,8	0,2	0,7	2,1	0,8	2,7	0,6
n.i. 4	1669	-	-	-	0,4	0,5	-	0,2	0,3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
trans-calاملenen-10-ol	1672	-	0,4	-	-	0,5	0,3	-	0,6	0,8	-	-	-	-	0,7	1,2	-	2,0	1,0	-	2,8	0,2	0,6	2,5	1,4	1,2	0,5
eudesma-7(11)-em-4-ol	1688	5,5	-	0,4	0,6	-	-	-	0,5	1,2	-	-	0,3	2,0	0,4	1,0	-	8,1	2,9	10,4	7,8	10,3	6,1	4,3	5,9	0,8	1,2
cadaleno	1750	-	1,0	0,7	0,3	-	-	-	0,2	-	-	-	-	0,7	1,9	1,3	-	1,4	0,4	0,4	1,8	0,9	0,6	1,9	0,8	1,6	0,7
γ costol	1754	0,6	-	0,4	0,3	-	-	-	0,2	0,8	-	-	-	1,3	1,3	0,9	-	1,2	1,5	1,8	0,9	0,5	3,0	1,8	0,8	1,5	0,3
14-oxi-α-muuroleno	1771	-	-	-	-	-	-	-	0,3	0,5	-	-	-	0,6	1,2	0,7	-	1,4	1,3	1,5	0,7	1,4	0,1	1,0	0,8	0,6	0,5
eudesma-7(11)-en-4-ol	1775	0,6	-	-	-	-	-	-	0,2	0,5	-	-	-	0,4	0,9	0,8	-	0,8	0,4	1,1	1,0	0,7	0,2	0,6	0,7	-	0,4
14-hidroxi-α-muuroleno	1778	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,1	0,6	0,8	-	0,6	1,1	1,5	1,0	0,1	0,1	0,6	0,6	-	-
n.i. 5	1780	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,7	1,0	-	-	0,6	1,6	0,7	0,5	-	0,1	0,6	1,1	-	-
(Z)-isobutirato de nerolidila	1784	7,0	-	-	-	-	-	-	0,2	-	-	-	-	-	0,5	-	-	-	-	0,2	-	-	-	-	-	-	-
E-isovalencenol	1801	0,9	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,0	0,3	-	-	1,0	0,9	1,2	0,4	0,3	-	0,6	0,4	-	-

Tabela 2. (Continuação)

Composto	IK	2005										2006								2007							
		mar	mai	jul	ago	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul	ago	set	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul
n.i. 6	1805	0,9	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,9	0,8	0,3	0,3	0,5	-	0,9	-	-	-
criptomeridiol	1813	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,4	1,1	-	-	1,4	1,5	0,5	0,3	1,0	-	1,2	-	-	-
n.i. 7	1820	1,2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,4	0,6	-	-	1,8	0,3	1,0	2,3	1,1	-	0,7	0,6	0,3	-
n.i. 8	1829	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,3	0,2	-	0,3	0,9	-	-	-	-
isofitol	1832	2,7	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,2	0,3	0,4	-	0,4	0,6	-	-	-	-
n.i. 9	2780	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,3	-	0,5	-	0,2	-	-	-	-	-
octacosano	2800	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,1	0,3	-	-	-	-	-	-	-
hidrocarbonetos monoterpênicos		-	0,9	4,8	0,3	-	-	0,2	-	-	0,2	-	0,5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
monoterpenos oxigenados		-	-	1,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
hidrocarbonetos sesquiterpênicos		34,9	43,7	42,3	41,3	45,9	43,8	46,3	33,4	35,2	61,5	46,4	39,1	29,7	30,4	25,3	41,0	27,2	28,8	27,3	17,5	31,7	24,2	11,6	37,4	34,8	33,0
sesquiterpenos oxigenados		61,0	53,5	51,6	57,9	54,1	56,2	53,6	66,4	64,3	38,2	53,6	60,3	69,3	69,6	74,7	59,0	71,7	67,1	70,4	82,5	67,6	74,4	85,1	62,2	65,0	67,2
outros		3,5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,5	0,7	1,4	-	0,8	1,6	-	-	-	-
n.i. 1 - m/z :159, 128, 105, 44, 204, 77.																											
n.i. 2 - m/z: 109, 204, 189, 177, 161, 145, 133, 121, 93, 79, 67, 55, 43.																											
n.i. 3 - m/z: 161, 189, 204, 107, 93, 147, 122, 13381, 67, 179.																											
n.i. 4 - m/z: 161, 179, 204, 119, 105, 95, 81.																											
n.i 5 - m/z: 159, 220, 202, 187, 145, 119, 91, 105, 131, 177.																											
n.i. 6 - m/z: 69, 114, 41, 136, 207.																											
n.i. 7 - m/z: 43, 58, 71, 109, 85, 95, 124.																											
n.i. 8 - m/z: 157, 200, 141, 115, 91, 69, 43.																											
ni.i. 9 - m/z: 84, 97, 43, 57, 69																											

Tabela 3. Composição química média (%) dos óleos voláteis de folhas secas de *Myrcia splendens* (Sw.) DC. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga em meses alternados de março a maio de 2005, e mensalmente de julho de 2005 a julho de 2007. IK - Índice de Retenção de Kováts. N.I. - Composto não-identificado.

Composto	IK	2005										2006										2007						
		mar	mai	jul	ago	set	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul	ago	set	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul
(E)-β-ocimeno	1044	1,3	-	1,2	0,7	0,8	0,8	0,3	0,5	-	-	-	0,2	0,2	-	0,1	-	0,1	0,1	-	-	-	-	-	0,6	-	-	-
δ-elemeno	1338	0,4	0,3	0,6	0,6	0,6	-	-	-	-	-	-	-	-	0,2	1,6	0,5	1,1	0,9	1,3	0,3	-	-	1,3	1,5	1,9	1,6	4,5
α-copaeno	1376	-	0,3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,3	
β-cubebeno	1387	0,4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
β-elemeno	1394	3,1	-	1,7	1,7	2,1	0,3	0,2	0,6	-	0,2	-	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	-	-	-	1,3	1,7	2,3	-	-	-	-	
β-cariofileno	1417	-	-	0,8	0,7	0,6	-	-	-	-	0,1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,3	
β-ylangeno	1420	0,6	-	0,6	0,6	0,5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,2	-	-	-	-	-	-	-	-	0,1	0,7	
β-copaeno	1429	0,9	-	0,5	0,3	-	-	-	-	-	0,3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,1	0,2	
γ-elemeno	1435	-	0,7	1,2	1,1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,4	0,8	0,4	0,4	0,4	-	-	0,4	-	-	1,1	0,1	-	
aromadendreno	1443	1,4	-	-	-	1,1	2,3	0,8	2,2	1,2	6,8	3,7	2,4	2,0	0,5	0,5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,1	0,9	
trans-muurolo-3,5-dieno	1443	5,5	-	2,3	2,5	3,8	-	-	-	-	-	-	-	0,3	0,2	0,1	-	-	-	-	-	-	0,3	-	0,3	0,5	0,8	
n.i. 1	1550	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,2	0,3	0,3	0,3	0,3	-	-	0,2	-	0,8	0,3	
cis-cadina-1(6),4-dieno	1460	0,6	0,7	0,5	0,3	0,3	1,1	-	1,3	-	-	-	1,0	0,7	0,2	-	0,4	0,3	0,7	0,3	-	-	-	0,2	-	-	-	
γ-muuroleno	1473	0,7	-	0,5	0,3	0,5	0,8	1,0	-	-	1,9	2,5	-	0,5	0,2	1,6	0,9	1,1	1,1	1,3	1,1	-	1,1	1,4	0,9	1,4	1,1	
γ-gurjuneno	1476	0,3	-	0,8	0,4	-	2,7	0,3	-	-	-	-	-	0,2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,2	
α-amorfenno	1480	3,3	1,8	1,0	3,9	3,7	0,5	1,7	-	-	-	-	-	-	0,2	2,2	2,0	-	0,9	-	-	-	0,9	-	-	2,1	0,6	
β-selineno	1484	0,3	0,4	3,5	0,7	-	1,1	2,4	-	-	-	-	-	-	0,2	0,5	1,0	-	0,2	0,9	1,2	1,4	0,4	4,2	3,0	0,5	0,4	
δ-selineno	1488	-	-	-	-	-	1,3	0,5	-	-	-	-	-	-	-	-	0,2	-	0,4	0,3	0,3	0,2	-	0,2	-	0,7	0,1	
cis-β-guaieno	1490	-	-	-	-	-	-	0,7	-	-	-	-	-	-	0,4	-	-	-	0,3	-	0,2	-	-	-	-	-	-	
α-selineno	1492	1,0	-	1,2	-	-	4,9	0,5	5,0	3,9	14,9	6,0	6,1	5,3	1,6	0,4	0,1	1,3	0,2	0,4	0,2	0,2	0,1	1,2	0,6	-	0,1	
α-muuroleno	1495	0,3	-	2,0	1,8	1,5	-	1,3	-	-	0,2	-	0,2	0,4	-	0,1	-	0,2	0,3	0,2	0,6	0,2	-	3,2	-	-	0,1	
δ-amorfenno	1503	1,1	-	4,0	3,1	1,5	-	0,4	-	-	0,4	-	-	-	1,0	0,7	-	0,7	1,0	0,2	1,4	-	0,5	-	0,2	0,2	0,2	
γ-cadineno	1508	5,6	-	4,1	3,9	4,3	0,2	0,6	0,5	-	0,9	0,6	0,3	0,3	-	0,2	0,4	0,2	0,6	0,6	-	0,4	-	-	-	0,1	0,4	
δ-cadineno	1520	22,7	3,9	7,3	9,2	16,4	-	0,4	-	-	0,2	0,8	-	-	-	1,7	0,2	0,3	0,7	0,8	-	-	0,1	-	0,5	0,5	1,0	
(E)-isso-γ-bisaboleno	1525	6,4	0,6	3,9	4,6	3,9	-	-	-	-	0,3	0,4	-	-	1,0	0,7	0,2	1,1	1,1	0,3	1,7	0,2	0,6	0,3	0,3	1,1	0,2	
zonareno	1531	-	0,5	3,9	4,3	0,5	3,5	2,8	3,5	2,1	1,8	3,2	2,4	2,3	0,8	0,5	0,6	0,9	0,3	-	0,2	0,4	0,5	0,3	0,5	0,5	0,1	
α-calacoreno	1540	3,9	2,9	0,9	0,7	2,4	2,1	0,4	-	-	-	0,4	-	0,2	0,1	0,6	0,5	0,4	0,5	1,1	0,5	0,8	0,5	-	0,5	-	0,3	
trans-cadina-1,4-dieno	1542	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,5	1,8	0,5	1,3	1,4	1,3	1,7	0,8	0,7	1,1	0,5	0,5	0,5	
α-cadineno	1544	0,4	3,0	2,3	1,2	0,7	0,4	1,3	1,4	-	0,5	1,2	0,6	0,5	0,4	2,5	0,8	0,4	0,4	0,3	1,7	0,6	0,2	-	0,5	0,6	0,8	

Tabela 3. (Continuação)

Composto	IK	2005										2006										2007							
		mar	mai	jul	ago	set	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul	ago	set	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul	
elemol	1548	-	0,8	1,9	2,6	0,5	1,9	2,1	0,9	0,6	0,3	1,9	0,8	1,0	1,3	1,9	0,7	1,5	1,9	2,5	3,1	5,6	3,8	2,8	4,5	7,0	2,2	2,0	
E-veltonal	1555	1,8	15,5	4,7	2,6	2,6	1,7	4,2	1,2	0,6	0,4	2,5	0,9	0,2	-	4,7	8,2	10,2	7,6	2,2	3,4	2,8	2,4	1,8	1,4	1,8	1,6	1,0	
espatulenol	1571	-	12,0	4,8	1,6	1,4	14,5	7,8	19,7	33,7	31,4	10,9	16,3	22,8	16,0	6,1	4,6	1,8	4,5	2,6	3,0	2,7	1,7	0,3	2,5	3,0	1,2	1,5	
óxido de cariofileno	1580	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,2	1,8	0,7	0,6	0,5	1,8	0,7	2,2	0,7	1,8	1,8	2,5	1,4	0,5	
viridiflorol	1592	-	1,2	3,9	1,5	1,2	2,6	2,5	2,9	8,2	4,5	7,7	5,8	3,8	0,3	4,2	2,4	2,2	1,9	0,2	1,4	2,3	2,1	1,5	2,4	1,4	1,6	1,4	
salvial-4(14)-em-1-ona	1594	-	-	1,7	3,7	1,3	0,6	0,6	-	1,4	1,7	0,7	2,1	3,3	2,8	3,0	0,7	2,3	1,8	1,8	2,2	1,0	1,9	0,3	1,8	1,9	0,6	0,4	
carotol	1581	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,9	-	0,5	-	0,8	1,7	1,4	2,8	0,1	0,9	0,3	1,2	1,3	0,6	
rosifoliol	1595	-	1,1	1,7	6,0	3,2	7,4	7,1	7,1	1,4	0,6	4,4	2,3	1,6	1,8	1,5	0,9	1,3	1,4	1,9	2,2	2,3	1,5	0,2	1,4	1,8	1,5	2,1	
1,10-di-epi-cubenol	1610	-	3,3	8,8	10,5	13,7	1,2	3,5	1,3	-	0,9	2,7	2,0	0,9	0,6	0,7	0,4	0,4	0,8	2,1	1,8	1,8	0,8	1,9	1,2	2,3	1,2	15,0	
junenol	1611	-	2,4	3,4	3,4	4,4	3,5	2,8	1,4	1,6	1,8	0,5	0,9	2,0	1,2	3,0	1,2	1,3	1,4	1,3	1,1	1,3	1,4	1,0	1,7	0,6	0,7	1,0	
10-epi-γ-eudesmol	1622	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,7	0,4	1,2	1,1	1,7	0,5	1,8	0,8	1,0	0,6	2,0	0,7	0,7	0,2	
1-epi-cubenol	1627	-	1,2	3,2	3,5	2,3	2,5	1,4	2,8	-	-	1,1	1,2	1,2	2,0	1,9	1,6	1,5	2,7	1,3	2,0	2,5	2,5	0,8	1,3	0,9	1,3	0,9	
γ-eudesmol	1630	-	3,3	1,7	0,8	1,4	1,8	2,8	1,9	-	0,6	1,7	0,5	0,2	1,3	2,7	1,4	1,1	0,9	0,8	1,9	1,9	0,8	2,1	2,6	1,1	1,6	1,5	
epi-α-cadinol	1645	-	1,4	2,0	-	1,2	1,1	-	1,4	-	0,5	1,3	0,9	0,9	1,0	1,7	0,9	2,3	2,5	3,9	2,4	2,8	1,5	1,2	2,2	4,5	2,5	1,5	
α-muurolol	1646	4,1	16,7	3,0	-	-	1,0	2,9	1,3	-	0,5	1,6	0,5	1,7	5,4	3,9	4,7	3,7	4,4	3,9	2,7	3,3	3,1	2,3	2,1	1,2	2,9	1,4	
α-cadinol	1652	4,9	1,2	6,5	-	9,0	0,8	0,8	1,2	3,7	6,3	4,0	8,4	13,3	3,7	4,2	5,6	4,6	6,4	4,3	2,1	2,6	4,6	4,6	4,3	5,4	2,8	2,3	
valerianol	1654	-	2,3	2,2	-	6,0	1,1	2,5	1,8	-	0,9	1,8	0,8	2,7	0,8	1,3	2,4	1,3	1,2	1,3	1,8	2,4	1,7	1,4	2,2	1,3	4,0	4,6	
cis-calamenen-10-ol	1660	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,2	0,7	3,5	2,6	3,1	1,8	0,7	0,6	-	0,9	1,0	0,2	1,1	0,4	
epi-zinanona	1663	-	1,0	0,6	-	0,6	6,6	13,1	3,2	11,9	2,3	3,4	1,4	0,7	0,3	0,8	0,3	0,5	0,7	0,8	2,5	3,9	3,0	1,4	3,5	4,7	4,1	2,5	
(E)-10,11-dihidroatlantona	1668	-	-	2,6	-	0,4	0,6	2,0	6,4	-	-	7,7	6,6	4,9	4,0	4,2	5,4	6,6	5,4	6,3	3,6	5,0	5,8	4,6	6,1	6,4	6,6	2,4	
14-hidroxi-9-epi-(E)-cariofileno	1668	-	-	1,4	0,6	-	6,3	4,6	3,5	3,4	0,9	1,2	3,7	0,6	-	0,2	0,3	1,1	0,5	-	-	0,7	-	2,4	0,7	-	1,2	1,2	
cadaleno	1675	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,9	1,8	0,4	3,0	3,7	0,9	2,7	1,0	2,4	0,5	0,9	0,4	0,3	0,1	
5-neo-cedranol	1675	0,4	2,1	0,9	0,4	2,4	3,2	2,2	2,1	0,8	2,7	5,3	4,9	3,7	2,2	1,9	1,7	0,2	0,2	4,0	3,7	1,9	1,6	3,7	2,2	1,8	1,8	1,9	
germacra-4(15),5,10(14)-trien-1-α-ol	1679	1,8	0,5	0,4	1,8	1,6	1,5	1,0	4,0	3,5	2,8	2,2	0,4	0,4	2,7	0,6	2,0	2,2	1,4	3,2	6,2	8,5	5,6	3,9	4,7	6,0	6,4	5,1	
eudesma-4(15),7-dien-1β-ol	1687	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,9	1,9	1,2	2,0	1,5	1,9	2,2	2,2	1,2	2,9	2,3	2,3	4,8	1,6	
eudesma-7(11)-en-4-ol	1689	6,2	1,4	-	6,2	1,3	0,7	0,7	3,9	1,1	0,6	0,7	2,1	2,0	3,5	1,6	5,0	3,7	2,9	4,9	7,1	4,4	5,6	3,0	3,3	2,0	3,5	1,6	
n.i. 2	1693	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,3	0,9	3,4	2,3	1,8	2,2	0,8	1,7	1,5	1,9	1,6	1,1	2,8	0,9	
amorfa-4,9-dien-2-ol	1700	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,3	0,4	0,3	-	-	-	-	1,5	-	1,2	0,4	
10-nor-calamenen-10-ona	1702	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,1	1,2	3,7	1,3	0,2	1,7	1,2	2,1	1,3	2,1	2,4	2,4	0,2	0,1	
14-hidroxi-α-humuleno	1713	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3,8	2,0	1,1	3,5	0,4	4,9	1,2	0,7	1,7	3,2	2,9	5,8	2,3	0,8	
amorfa-4,9-dien-14-al	1755	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,5	0,5	-	3,5	0,6	3,8	0,9	0,9	0,7	2,9	4,5	0,9	1,3	0,4	
acetato de guaiolila	1723	10,3	11,4	-	9,8	0,3	10,7	9,5	10,6	16,8	6,8	9,7	17,0	14,7	5,1	4,1	5,4	6,9	5,7	2,7	3,2	2,0	2,4	4,5	2,1	6,2	4,0	2,8	
nootkatol	1714	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,4	-	0,4	0,8	0,9	-	1,3	1,8	1,3	-	-	1,0	0,8	0,3	
n.i. 3	1714	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3,1	1,3	-	1,4	1,2	0,7	2,0	1,9	0,6	-	0,1	0,5	0,4	0,1	
n.i. 4	1715	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2,3	-	0,9	0,6	0,6	2,9	1,6	1,7	1,3	0,2	1,6	0,3	0,9	0,3	

Tabela 3. (Continuação)

Composto	IK	2005										2006										2007						
		mar	mai	jul	ago	set	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul	ago	set	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul
(Z)- α -atlantona	1717	-	3,3	-	0,4	-	0,5	6,2	0,5	3,8	3,4	4,5	0,3	0,3	1,2	2,5	0,7	0,4	2,1	0,9	2,0	1,0	2,0	0,8	1,9	1,7	2,2	2,1
γ -costol	1755	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,4	1,9	0,4	0,4	2,8	0,2	1,2	0,4	0,4	1,5	1,5	0,3	0,9	0,3
7,14-anidro-amorfa-4,9-dieno	1755	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2,2	1,6	-	2,4	1,4	2,4	1,4	1,7	1,4	0,3	1,1	0,3	1,4	0,5
14-oxy- α -muuroleno	1767	-	1,0	-	1,2	-	4,2	1,8	1,5	-	0,6	1,1	1,2	0,6	0,1	0,6	0,5	1,1	2,5	3,4	1,1	2,6	1,0	1,5	1,5	0,5	1,3	0,6
epi-ciccolorenona	1774	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,2	1,6	0,3	-	0,6	0,8	1,4	0,4	1,2	2,8	1,0	0,1	1,0	0,3
2- α -hidroxi-amorfa-4,7(11)-dieno	1775	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2,2	0,8	-	1,2	0,7	2,2	1,1	1,8	1,0	1,7	1,9	-	0,8	0,3
14-hidroxi- α -muuroleno	1779	1,9	0,5	-	0,9	-	0,8	0,6	1,9	-	0,3	0,7	2,4	2,3	0,1	1,3	2,6	0,1	0,6	0,3	-	0,2	0,6	0,7	1,9	2,3	3,1	3,1
14-hidroxid- γ -cadineno	1803	0,9	-	-	-	-	0,9	0,6	0,9	-	0,3	0,4	0,8	0,7	1,8	0,8	0,4	1,9	1,0	1,3	1,2	1,0	0,6	2,5	0,9	0,2	1,5	0,7
nootkatona	1806	0,6	-	-	-	-	0,6	0,4	0,7	-	0,3	0,6	0,5	0,5	1,3	1,4	0,8	1,1	0,9	0,9	0,9	0,3	1,9	0,4	1,8	0,8	0,6	1,3
n.i. 5	1812	0,6	-	-	-	-	0,6	0,3	0,6	-	0,2	0,5	0,5	0,4	-	1,3	0,6	0,1	0,3	0,3	0,4	-	0,4	0,6	0,6	0,3	0,7	0,4
n.i. 6	2042	0,2	-	-	-	-	0,2	0,3	0,7	-	-	-	0,5	0,3	0,2	0,8	0,1	0,2	0,2	-	0,2	-	0,3	0,5	-	0,3	3,7	1,6
n.i. 7	2058	0,1	-	-	-	-	0,1	-	-	-	-	-	0,2	0,2	-	-	-	-	-	-	-	-	1,4	-	-	0,4	-	0,5
docosano	2156	0,2	-	-	-	-	0,2	-	-	-	-	-	0,2	0,2	-	-	-	-	-	-	-	-	0,5	-	-	-	0,3	0,1
n.i. 8	2502	0,3	-	-	-	-	0,3	-	-	-	-	-	0,3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,2	-	-	-	-	-
pentacosano	2510	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,2	-	-	-	-	-	-	2,2	-	-	-	-	-
hexacosano	2531	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,1	-	-	-	-	-
heptacosano	2700	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,3	4,8	-	-	-	-	-
octacosano	2800	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,2	-	-	-	-	0,3	0,8	-	-	-	-	-
hidrocarbonetos monoterpênicos		1,3	-	1,2	0,7	0,8	0,8	0,3	0,5	-	-	-	0,2	0,2	-	0,1	-	0,1	0,1	-	-	-	-	-	0,6	-	-	-
monoterpenos oxigenados		-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
hidrocarbonetos sesquiterpênicos		58,9	15,1	43,7	41,8	44,2	21,0	15,3	14,5	7,2	28,4	18,8	13,2	12,8	10,4	18,1	9,8	12,9	15,3	10,4	15,4	8,3	10,3	14,2	9,8	12,6	8,2	15,7
sesquiterpenos oxigenados		33,7	83,6	55,2	57,5	54,7	78,8	84,0	85,0	92,7	71,1	80,6	85,6	87,6	88,2	79,6	78,8	85,9	83,3	88,7	83,9	90,2	75,8	76,4	90,4	86,8	88,9	71,9
outros		1,5	-	-	-	-	1,5	0,5	1,3	-	0,2	0,5	1,7	1,1	0,3	2,3	1,0	0,3	0,5	0,3	0,6	0,6	12,7	1,1	0,6	0,9	4,7	2,6
n.i. 1 - m/z: 123, 161, 179, 105, 93, 81, 222, 204, 81, 67, 55, 41.																												
n.i. 2 - m/z: 189, 204, 222, 161, 135, 121, 107, 93, 81, 67.																												
n.i. 3 - m/z: 252, 185, 157, 131, 223, 143, 105, 91, 237.																												
n.i. 4 - m/z: 252, 185, 134, 146, 171, 157, 237.																												
n.i. 5 - m/z: 252, 185, 134, 146, 171, 157, 237.																												
n.i. 6 - m/z: 252, 185, 134, 146, 171, 157, 237.																												
n.i. 7 - m/z: 260, 193, 153, 165, 178.																												
n.i. 8 - m/z: 207, 302, 219, 223.																												

Tabela 4. Composição química média (%) dos óleos voláteis de folhas secas de *Myrcia macrocarpa* DC. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga em meses alternados de março a maio de 2005, e mensalmente de julho de 2005 a julho de 2007. IK - Índice de Retenção de Kováts. N.I. - Composto não-identificado.

Composto	IK	2005										2006										2007						
		mar	mai	jul	ago	set	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul	ago	set	out	Nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul
α -tujeno	924	-	-	-	-	-	-	1,4	-	1,3	1,5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
α -pineno	932	8,1	20,8	14,3	11,6	10,5	16,3	31,4	14,1	20,7	24,2	16,1	33,3	16,2	27,8	21,1	27,0	18,8	23,6	19,1	15,8	4,6	9,7	-	-	-	1,0	-
canfeno	946	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,7	-	-	-	-	-	-	-	2,8	-	-	-	-	-	-	-	-	-
β -pineno	974	6,3	11,5	8,1	7,9	6,9	8,3	16,3	7,0	18,6	14,4	8,7	16,5	9,9	15,8	6,5	17,1	8,5	8,5	9,4	7,1	8,0	6,1	-	-	-	1,4	-
mirceno	988	1,2	2,6	1,8	1,7	1,4	1,6	13,9	1,2	2,8	2,1	1,9	2,1	2,3	2,3	0,8	2,5	1,3	1,7	2,2	1,2	1,8	1,1	-	-	-	0,4	-
α -felandreno	1002	-	0,4	-	-	-	-	3,2	-	0,2	-	-	0,2	0,5	-	-	0,3	-	-	-	-	0,5	-	-	-	-	-	-
α -terpineno	1014	1,8	2,9	2,3	2,0	1,8	2,1	2,6	1,4	2,8	1,8	2,2	1,9	3,0	1,9	1,1	1,9	1,3	1,8	1,6	1,6	2,8	1,3	-	-	-	0,9	-
para-cimeno	1020	1,0	-	-	-	-	-	-	0,6	0,1	-	-	-	-	-	2,1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
limoneno	1024	-	2,2	1,7	-	1,5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
β -phellandreno	1025	2,5	2,7	2,0	3,7	1,6	3,6	5,8	2,4	5,0	3,8	3,6	4,2	5,1	4,0	2,4	4,5	2,9	3,2	3,1	2,7	3,9	2,6	-	0,7	-	1,6	-
γ -terpineno	1054	2,3	3,7	3,0	3,0	2,6	2,8	4,1	2,1	4,6	2,9	3,0	3,1	3,7	2,8	1,6	3,1	2,5	2,9	2,6	3,0	4,0	2,7	-	1,0	-	2,2	-
cis-hidrato de sabineno	1070	-	-	-	-	-	-	-	0,8	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
terpinoleno	1088	0,9	1,2	0,9	1,0	0,9	1,0	0,8	0,6	1,0	0,8	1,1	0,6	1,5	0,5	0,7	0,6	0,8	0,9	0,9	1,2	1,6	0,8	-	-	-	0,9	-
para-menta-2,4(8)-dieno	1088	1,0	0,4	0,4	0,5	0,4	-	-	0,7	0,4	0,3	0,4	0,2	0,6	-	-	-	-	0,5	0,4	0,6	0,9	-	-	0,6	-	0,4	-
trans-hidrato de sabineno	1098	0,9	0,3	0,3	0,4	0,4	-	-	0,7	0,3	0,2	0,3	0,1	0,5	-	0,4	-	-	-	0,4	0,5	0,9	-	-	0,7	-	-	-
cis-para-mentha-2-em-1-ol	1121	-	-	-	-	-	-	-	0,7	-	-	-	-	-	-	1,0	-	-	-	-	0,3	-	-	-	0,7	-	-	-
trans-para-mentha-2-en-1-ol	1140	-	-	-	-	-	-	-	0,8	-	-	-	-	-	-	0,6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
terpinen-4-ol	1177	9,1	5,8	5,6	5,9	5,1	4,8	6,8	6,7	8,5	5,7	4,5	5,4	6,8	3,2	-	4,7	-	6,4	5,1	10,8	8,4	2,8	1,1	4,8	1,9	5,2	2,4
α -terpineol	1188	2,7	1,3	1,4	1,4	1,1	1,3	-	1,6	0,9	1,0	0,9	-	1,4	0,3	-	0,5	-	1,5	0,9	2,4	1,6	0,6	-	1,2	-	1,4	0,7
cis-piperitol	1196	0,4	-	-	-	-	-	0,6	1,2	-	-	-	0,6	-	-	4,8	-	4,1	0,4	-	0,5	0,5	-	-	0,6	0,6	-	-
verbenona	1205	-	-	0,4	-	0,3	2,2	-	0,7	0,2	-	-	-	-	-	1,7	-	0,8	-	-	-	0,5	-	-	-	-	-	-
trans-piperitol	1208	0,4	-	-	0,3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,9	-	-	-	-	0,3	-	-	-	-	-	-	-
trans-pulegol	1214	-	-	-	-	-	-	-	-	0,2	0,2	0,3	-	-	-	-	-	-	-	-	1,3	-	-	-	-	-	-	-
δ -elemeno	1338	1,6	0,3	0,3	0,3	0,7	-	-	1,4	-	-	3,3	1,2	2,1	2,3	-	2,7	-	2,3	2,6	0,5	1,6	2,5	4,5	2,1	1,8	2,6	0,9
bicicloelemeno	1338	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,1	-	-	-	-	-	-	-	-
α -cubebeno	1348	-	0,3	0,3	0,4	0,4	0,4	-	-	-	-	0,5	-	0,3	-	-	0,2	2,3	-	-	0,8	0,6	-	0,5	0,6	0,5	-	-
acetato de nerila	1359	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
α -copaeno	1376	-	0,4	0,5	0,5	0,5	0,4	-	-	-	0,2	0,5	-	-	0,1	-	0,2	-	-	-	-	0,5	0,4	0,5	0,6	0,6	-	-

Tabela 4. (Continuação)

Composto	IK	2005										2006										2007						
		mar	mai	jul	ago	set	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul	ago	set	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul
β-cubebeno	1388	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
β-elemenno	1390	0,7	0,5	0,6	0,6	0,8	1,1	-	0,8	0,2	0,3	1,5	0,4	1,1	0,8		0,9	0,2	1,0	-	0,3	0,9	1,2	1,9	1,3	1,2	1,3	0,7
α-gurjuneno	1409	-	1,6	0,3	0,3	2,0	1,9	-	-	-	-	0,4	-	1,3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
n.i. 1	1430	1,0	-	1,3	1,4	-	-	-	1,2	0,5	0,8	2,4	-	-	1,0	0,5	1,4	0,9	1,4	1,4	-	1,2	1,9	3,2	2,4	1,8	2,0	1,1
β-copaeno	1432	0,4	-	-	-	-	0,6	-	-	-	-	0,8	0,6	0,4	-	-	-	-	0,3	-	0,5	-	0,8	0,6	0,5	0,6	-	
γ-elemenno	1436	0,6	-	-	-	-	0,7	-	-	-	-	0,8	-	0,5	0,2	-	0,3	1,5	0,5	0,6	-	-	0,5	1,2	0,8	0,6	0,7	0,5
aromadendreno	1439	0,4	0,5	0,8	0,6	0,5	0,7	-	-	-	0,2	0,6	0,2	0,4	0,3	-	0,4	-	0,4	0,4	-	0,8	0,7	0,7	-	-	0,7	0,5
cis-muurolo-3,5-dieno	1441	-	-	-	-	-	0,9	-	-	-	-	0,4	0,1	-	0,2	-	0,3	0,3	-	-	-	-	0,6	0,4	-	-	-	0,5
trans-muurolo-3,5-dieno	1450	-	-	-	-	-	0,8	-	-	-	-	-	-	0,6	-	-	-	0,6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
α-humuleno	1453	-	0,8	-	-	-	-	-	-	-	-	0,8	-	-	-	-	-	0,5	-	-	-	-	-	0,5	-	0,6	-	0,8
acetato de geranila	1453	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
cis-cadina-1,6(4)-dieno	1453	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,7	-	0,6	-	-	0,2	0,5	0,4	-	-	-	0,4	-	-	-	0,4	1,4
dauca-5,8-dieno	1461	0,4	-	-	0,3	0,4	1,0	-	-	-	0,2	-	0,2	0,7	0,2	-	0,3	-	-	0,7	0,3	0,7	0,6	0,7	1,3	1,7	0,8	0,7
amorfa-4,7(11)dieno	1471	0,4	0,3	-	0,4	0,5	-	-	0,6	-	0,2	0,6	0,2	-	-	0,7	0,2	0,7	-	0,6	0,4	0,4	0,5	0,7	0,6	2,8	0,5	-
germacreno D	1479	1,6	3,6	4,7	4,9	5,7	3,0	1,4	2,6	2,6	3,8	5,4	1,4	2,6	3,4	0,6	4,4	0,5	2,4	3,2	1,6	2,7	3,6	5,7	3,1	0,9	3,0	1,5
β-selineno	1484	0,5	0,4	-	-	-	1,2	-	0,9	-	1,1	-	-	0,6	0,2	0,7	0,3	0,5	0,4	-	0,5	-	0,7	0,5	0,7	0,5	0,5	1,0
(E)-β-ionona	1489	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2,7	-	0,9	-	-	-	0,7	0,6	-	-	-
cis-β-guaieno	1487	1,0	-	-	-	-	2,2	-	1,6	0,6	-	2,5	-	1,5	0,9	0,9	1,3	-	1,3	1,8	1,2	0,5	2,1	3,6	3,1	3,3	2,3	-
biciclogermacreno	1492	2,8	5,9	8,0	8,4	8,9	4,0	2,2	3,0	4,6	5,5	5,1	0,1	4,2	5,7	-	5,9	0,9	3,6	5,3	3,5	2,9	4,7	8,0	3,9	3,4	4,8	2,4
α-muurolo	1500	-	0,5	-	-	0,4	-	-	-	0,2	0,2	-	0,8	-	-	1,0	-	1,9	-	0,8	0,3	0,3	-	0,7	-	-	0,4	2,5
δ-amorfenno	1500	-	0,3	0,4	0,4	0,4	0,6	-	-	0,1	0,2	0,6	3,7	0,6	0,2	1,6	-	5,4	-	0,4	0,4	0,4	-	0,8	0,7	0,6	0,7	0,7
γ-cadineno	1511	0,4	0,6	0,5	0,7	0,8	0,8	-	0,6	0,2	0,4	0,8	0,3	0,5	0,4	-	0,4	-	-	0,6	0,4	-	0,6	1,2	-	1,1	-	0,4
δ-cadineno	1512	2,4	1,7	2,3	1,9	2,1	2,5	0,6	2,0	1,2	1,4	2,7	1,8	3,1	1,6	-	1,6	0,7	1,8	2,8	2,5	3,4	2,7	5,1	4,2	4,1	3,4	3,7
trans-cadina-1,4-dieno	1522	-	-	0,3	0,3	3,9	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,9	-	-	-	-	-	-	-	0,5	-	0,6
α-calacoreno	1533	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,9	-	2,9	-	-	-	-	-	-	-	0,7	-	0,6
elemol	1545	5,9	2,3	3,0	3,4	-	2,8	0,9	4,0	2,1	1,7	2,4	1,7	2,8	2,5		1,9	-	2,8	3,0	4,0	6,2	5,0	7,8	4,8	4,0	5,2	5,2
germacreno B	1549	-	0,5	0,7	0,7	0,7	0,9	-	0,8	0,3	0,4	-	-	-	-	0,9	-	0,2	-	-	-	-	-	-	-	0,7	-	0,5
palustrol	1561	1,2	0,3	0,4	0,4	0,5	4,5	-	-	0,3	0,5	0,9	0,2	0,7	0,4	2,1	0,3	3,3	0,7	0,8	0,6	0,8	1,1	1,4	1,0	0,8	1,3	0,9
espatulenol	1568	4,2	2,3	3,3	3,2	3,8	-	2,1	1-	2,4	2,0	1,7	4,0	2,3	1,5	0,4	0,8	-	3,7	2,5	4,2	3,0	4,6	2,9	13,7	22,5	5,9	19,4
β-copaen-4-α-ol	1578	-	0,5	-	0,6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,7	-	0,9	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
globulol	1590	3,6	1,7	3,2	2,7	3,5	2,5	0,8	2,8	1,8	2,2	2,2	1,6	2,0	2,5	20,2	1,4	2,9	2,7	2,3	3,0	2,7	4,5	5,3	4,0	4,5	5,2	4,8
viridiflorol	1592	3,7	2,5	3,1	3,4	3,6	2,5	0,7	2,3	1,7	2,1	2,3	1,5	2,4	2,3	-	1,3	-	2,7	3,0	3,3	2,9	4,4	5,8	4,0	3,9	5,0	4,0

Tabela 4. (Continuação)

Composto	IK	2005										2006										2007							
		mar	mai	jul	ago	set	out	nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul	ago	set	out	Nov	dez	jan	fev	mar	abr	mai	jun	jul	
guaial	1600	3,9	3,8	4,5	4,9	5,1	4,7	1,3	4,6	2,1	2,6	4,3	1,9	3,7	2,7	-	2,4	2,9	2,9	2,8	3,6	2,5	4,8	6,4	4,7	3,9	5,9	5,9	
rosifoliol	1600	1,9	-	-	-	0,7	0,4	-	-	1,0	1,3	1,6	0,9	1,5	1,2	2,1	0,7	3,4	1,4	1,7	1,7	1,4	1,7	2,7	2,2	2,1	2,9	2,6	
1,10-di-epi- α -cubenol	1619	0,4	-	1,5	1,9	-	-	-	-	0,6	-	-	-	-	0,8	1,3	-	2,8	1,0	-	-	0,4	-	2,4	0,8	0,9	0,4	0,9	
10-epi- γ -eudesmol	1623	1,4	-	0,6	0,7	1,8	1,2	-	0,5	0,2	-	-	0,6	-	0,3	1,4	-	1,8	0,4	-	-	0,9	1,8	1,0	2,1	2,1	2,3	2,1	
trans-isolongifolanona	1626	0,6	-	-	-	-	-	-	-	-	1,1	-	0,2	-	-	1,1	0,5	-	-	1,3	1,4	0,5	0,8	1,5	0,6	0,5	0,8	0,6	
1-epi-cubenol	1628	1,6	1,2	-	-	-	-	-	1,6	2,0	0,3	0,9	0,5	1,0	0,5	0,8	0,6	0,3	0,9	0,6	1,2	1,7	1,4	2,7	1,8	1,9	1,7	2,1	
γ -eudesmol	1632	3,4	2,9	2,9	3,2	3,3	3,0	0,8	2,8	1,0	2,0	1,7	0,8	2,0	1,1	-	1,0	1,4	1,6	1,1	2,1	4,4	2,1	4,3	2,9	2,1	3,5	5,3	
epi- α -cadinol	1640	3,0	-	-	-	-	2,1	0,7	2,1	2,0	1,4	1,8	1,1	2,1	1,2	2,2	0,8	0,8	1,4	1,5	2,3	2,8	3,0	2,3	3,8	3,8	3,8	7,2	
β -eudesmol	1650	4,3	3,5	6,0	5,9	6,0	2,6	0,5	2,8	3,0	1,7	2,0	1,4	2,1	1,6	-	1,4	1,1	2,6	2,2	3,1	5,2	3,8	2,7	3,7	3,0	4,0	7,0	
α -eudesmol	1653	5,1	3,0	4,7	4,5	4,4	3,9	1,2	3,8	1,7	3,2	3,3	2,6	3,5	3,2	2,1	2,3	1,5	3,6	2,4	5,1	5,2	5,8	4,1	6,4	6,4	3,7	4,3	
bulnesol	1671	2,9	2,0	3,2	3,4	3,4	2,3	-	2,3	0,2	2,2	2,2	1,3	1,6	1,9	2,6	1,6	2,4	2,1	3,8	2,8	2,2	3,6	4,0	4,6	3,0	3,3	0,8	
n.i. 2	1683	-	-	-	0,3	-	-	-	0,5	-	-	-	-	-	-	3,1	-	2,6	-	2,3	-	-	-	-	1,1	1,0	-	-	
germacra-4(15),5,10(14)-trien-1- α -ol	1685	-	-	-	0,3	0,8	-	-	0,9	-	-	-	0,1	-	-	2,3	-	4,4	-	-	-	-	0,4	-	1,4	3,3	4,3	1,7	
n.i. 3	1812	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,6	-	2,4	-	-	-	-	-	-	-	-	0,7	0,4	
n.i. 4	2042	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,6	-	0,3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,4	
n.i. 5	2058	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,5	
monoterpenos hidrocarbonetos		25,1	48,4	34,5	31,4	27,5	35,6	79,5	30,9	57,5	53,5	36,8	62,1	42,7	55,1	36,3	57,0	35,9	45,9	39,3	33,1	28,2	24,3	-	2,2	-	8,9	-	
monoterpenos oxigenados		13,6	7,5	7,7	8,0	6,9	8,3	7,4	12,3	10,1	7,2	6,1	6,1	8,7	3,6	9,4	5,2	7,6	8,3	7,3	16,1	11,9	3,3	1,8	8,6	2,6	6,5	3,0	
sesquiterpenos hidrocarbonetos		14,1	18,2	21,1	21,9	28,8	23,4	4,2	15,6	10,5	14,8	30,3	11,1	21,1	17,4	8,8	20,9	21,5	15,5	22,4	12,4	17,2	23,6	40,9	25,7	27,7	24,7	20,8	
sesquiterpenos oxigenados		47,1	25,9	36,3	38,7	36,8	32,4	8,9	41,1	21,8	24,1	26,9	20,5	27,6	23,6	45,0	16,9	34,9	30,4	31,1	38,4	42,8	48,8	57,2	63,5	69,7	59,8	76,2	
n.i. 1 - m/z: 161, 189, 204, 105, 133, 147																													
n.i. 2 - m/z: 123, 161, 179, 105, 93, 81, 222, 204, 81, 67, 55, 41.																													
n.i. 3 - m/z: 189, 204, 222, 161, 135, 121, 107, 93, 81, 67.																													
n.i. 4 - m/z: 252, 185, 157, 131, 223, 143, 105, 91, 237.																													
n.i. 5 - m/z: 252, 185, 134, 146, 171, 157, 237.																													

A análise de PCA dos óleos voláteis de *M. floribunda* nos diferentes meses de coleta é apresentada na Figura 5. Os dados formam uma nuvem de dispersão, não havendo formação de grupamentos entre os meses com características semelhantes de pluviosidade, temperatura e radiação. Isto indica que as variações na composição do óleo volátil da espécie não decorre do efeito sazonal.

Foi observada floração nos três espécimes nos meses de janeiro e fevereiro de 2006 e 2007. Porém, embora existam casos em que a composição do óleo volátil das folhas muda durante o estágio reprodutivo (JUTEAU *et al.*, 2002), isto não ocorreu para *M. floribunda*, uma vez que não houve formação de grupamentos entre os meses 1 e 2. De fato, análise da composição (Tabela 1) não sugere nenhum padrão na composição do óleo entre esses períodos.

Figura 5. Análise de componentes principais (PCA) dos dados de espectros de massas dos óleos voláteis de folhas secas de quatro espécimes de *Myrciaria floribunda* O. Berg. coletadas em 2005 (azul), 2006 (vermelho) e 2007 (verde). Os números representam os meses de análise.

De maneira similar, quando se comparam os espécimes estudados (Figura 6), também se observa uma nuvem de dispersão e a ausência de agrupamentos nos dados, indicando que a variação dos indivíduos não segue um padrão sazonal, ou anual.

Figura 6. Análise de componentes principais (PCA) dos dados de espectros de massas dos óleos voláteis de folhas secas de quatro espécimes de *Myrciaria floribunda* O. Berg. (1, 2, 3 e 4), coletadas em 2005 (azul), 2006 (vermelho) e 2007 (verde).

Diferenças individuais ficaram evidentes para *C. guaviroba* através da análise de PCA comparando os espécimes nos três anos de coleta (Figura 7). Nos três anos, o que se nota é que as amostras do indivíduo 1 estão sempre separadas dos demais, sugerindo que a composição química difere de forma acentuada da dos outros dois. Para os outros indivíduos 2 e 3, parece haver uma separação entre os anos de análise. No entanto, não foi possível associar diretamente esta variação entre e os anos a nenhum aspecto da composição química (Tabela 2).

Figura 7. Análise de Componentes Principais (PCA) dos dados de espectros de massas dos óleos voláteis de folhas secas de três espécimes de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. (1, 2 e 3), coletadas em 2005 (azul), 2006 (vermelho) e 2007 (verde).

Durante o período de estudo, nenhum dos três espécimes de *C. guaviroba* apresentou floração/frutificação. Dessa forma, as variações da composição não poderiam estar relacionadas ao estágio fenológico.

No gráfico de PCA com base nos meses de coleta (Figura 8) nos três anos de análise, verifica-se que as unidades amostrais referentes aos meses (números de 1 a 12) não formam grupamentos, conforme visto para *M. floribunda*.

Os resultados sugerem, portanto, que as alterações observadas nos óleos voláteis de *C. guaviroba* são oriundas da diversidade genética entres os indivíduos analisados, e não aos efeitos da sazonalidade.

Figura 8. Análise de Componentes Principais (PCA) dos dados de espectros de massas dos óleos voláteis de folhas secas de três espécimes de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk., coletadas em 2005 (azul), 2006 (vermelho) e 2007 (verde). Os números representam os meses de análise.

Para *M. splendens*, os dados obtidos foram semelhantes, não sendo observadas diferenças associadas às datas de coleta (Figura 9).

Além disso, a análise de PCA comparando os três espécimes de *M. splendens* (Figura 10) mostra que a maioria das unidades amostrais do espécime 1 estão agrupadas, sugerindo que sua composição química é a que mais difere daquela dos indivíduos 2 e 3, de maneira similar ao que foi observado em *C. guaviroba*. É interessante destacar que, tanto para *C. guaviroba*, quanto para *M. splendens*, o tamanho dos indivíduos 1 sugere que possivelmente eles sejam mais velhos que os demais. Em um estudo com Annonaceae, ITO (2008) verificou uma composição química diferenciada para os óleos voláteis de espécimes mais velhos. Outro aspecto comum à análise de PCA da variabilidade dos óleos de *M. splendens* e de *C. guaviroba*, é que ela indica a existência de uma variação anual na composição química dos indivíduos 2 e 3 (Figura 10), a qual também não se associa diretamente a algum aspecto da constituição.

Figura 9. Análise de Componentes Principais (PCA) dos dados de espectros de massas dos óleos voláteis de folhas secas de três espécimes de *Myrcia splendens* (Sw.) DC., coletadas em 2005, 2006 e 2007. Os números representam os meses de análise.

Assim, os resultados sugerem que, como visto para *C. guaviroba*, as diferenças não composição do óleo de *M. splendens* durante o período de estudo parecem resultar não da sazonalidade, mas da variabilidade individual, que pode ser decorrente do desenvolvimento, ou de fatores genéticos.

Ao contrário do que foi observado para *C. guaviroba*, no entanto, os três espécimes de *M. splendens* floresceram e frutificaram ao longo do estudo, em meses com temperatura, precipitação e radiação elevadas. A floração foi observada entre setembro e outubro de 2005 e 2006, e a frutificação entre outubro e dezembro destes anos. Porém, assim como para *M. floribunda*, e como pode ser visto na Figura 9, não há uma relação entre o estágio fenológico e a composição química dos óleos voláteis de folhas da espécie, já que não são observados agrupamentos entre os meses de estágio reprodutivo.

Figura 10. Análise de Componentes Principais (PCA) dos dados de espectros de massas dos óleos voláteis de folhas secas de três espécimes de *Myrcia splendens* (Sw.) DC. (1, 2 e 3), coletadas em 2005 (azul), 2006 (vermelho) e 2007 (verde).

Efeitos de sazonalidade também não foram verificados para *M. macrocarpa* através da análise de PCA (Figura 11), não havendo, como para as outras três espécies, agrupamento dos meses com características meteorológicas semelhantes.

No entanto, o gráfico feito com base nos três anos de coleta mostrou uma tendência no grupamento das amostras referentes a 2007 (Figura 12).

Figura 11. Análise de Componentes Principais (PCA) dos dados de espectros de massas dos óleos voláteis de folhas secas de três espécimes de *Myrcia splendens* (Sw.) DC., coletadas em 2005, 2006 e 2007. Os números representam os meses de análise.

Figura 12. Análise de componentes principais (PCA) dos dados de espectros de massas dos óleos voláteis de folhas secas de *Myrcia macrocarpa* DC. coletadas em 2005, 2006 e 2007.

A análise da composição química (Tabela 4) sugeriu que as diferenças encontradas pudessem estar relacionadas à variação nas classes predominantes de constituintes do óleo, a qual é representada na Figura 13. Em 2005 e em 2006, os hidrocarbonetos monoterpênicos constituem a classe dominante, enquanto a partir do final de 2006 e em 2007 aumentam os teores dos constituintes sesquiterpênicos nestes óleos.

Figura 13. Classes majoritárias de constituintes químicos dos óleos voláteis de folhas secas de *Myrcia macrocarpa* DC. coletadas no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga em meses alternados de março a maio de 2005, e mensalmente de julho de 2005 a julho de 2007.

Com base nestas observações, houve o interesse em se acrescentar os dados de porcentagem de classes de compostos à análise de componentes principais. Comparando-se o gráfico de PCA que mostra a contribuição dessas classes à variância das amostras (Figura 14), com o gráfico de PCA das unidades amostrais dos diferentes anos, feita com a utilização das porcentagens das classes (Figura 15), observou-se que as diferenças de composição química dos óleos voláteis de *M. macrocarpa* estão associadas principalmente aos teores mais elevados de hidrocarbonetos sesquiterpênicos e sesquiterpenos oxigenados em 2007 e de compostos monoterpênicos nos anos anteriores.

Figura 14. Gráfico de componentes principais mostrando a contribuição das classes de constituintes químicos para a variância entre os óleos voláteis de folhas secas de *Myrcia macrocarpa* DC. coletadas em 2005, 2006 e 2007. Mono_hidro: hidrocarbonetos monoterpênicos; Mono_oxi: monoterpenos oxigenados; Sesqui_hidro: hidrocarbonetos sesquiterpênicos; Sesqui_oxi: sesquiterpenos oxigenados.

Figura 15. Gráfico de Componentes Principais (PCA) dos dados de espectros de massas e de classes majoritárias de constituinte químicos dos óleos voláteis de folhas secas de *Myrcia macrocarpa* DC. coletadas em 2005, 2006 e 2007.

Embora os dados de precipitação, temperatura e radiação do período de estudo (Figuras 2 e 3) não sugerissem diferenças meteorológicas entre os anos, foi realizada análise de PCA com estes dados (Figura 16), que confirmou que os três anos de estudo não diferem entre si quanto a estas características. Dessa forma, os dados obtidos indicam que as mudanças na composição do óleo volátil de *M. macrocarpa* são provavelmente decorrentes de fatores endógenos.

Figura 16. Análise de componentes principais dos dados meteorológicos (precipitação, temperatura e radiação) de 2005, 2006 e 2007.

Este trabalho sugere, portanto, que para as quatro espécies de Myrtaceae analisadas, a sazonalidade não é determinante para a variabilidade química dos óleos voláteis. Para duas das espécies, *C. guaviroba* e *M. splendens*, a variabilidade individual parece ser um componente mais importante, conforme já havia sido sugerido no Capítulo anterior, em que se estudou a composição diuturna de seus óleos. Foram observadas variações na composição química entre os anos de estudo, as quais não puderam ser atribuídas a um determinado constituinte químico ou grupo de constituintes. Para *M. floribunda*, embora a xantoxilina tenha sido o constituinte majoritário, houve diferenças entre o número de constituintes químicos do óleo, porém esta variação não está relacionada às características sazonais. E finalmente, para *M. macrocarpa* parece haver uma flutuação nas classes majoritárias de constituintes químicos.

A maior parte dos estudos que trata da variação sazonal de óleos voláteis foi realizada com espécies herbáceas, em geral Lamiaceae ou Asteraceae. As estratégias de crescimento destas espécies são distintas daquelas de espécies arbóreas e aproximam-se mais ao conceito de estrategistas “r” proposto MacARTHUR & WILSON

(1967), como tamanho reduzido, amadurecimento precoce, maior assimilação reprodutiva nos indivíduos de menor tamanho e sobrevivência variável em função do ambiente. Seria natural que para essas espécies as variações ambientais levassem a alterações mais rápidas no metabolismo secundário. Espécies arbóreas, em contrapartida, estariam mais próximas ao conceito de estrategistas “K”, isto é, tamanho grande, reprodução retardada, menor assimilação reprodutiva, descendentes de maior tamanho e em menor número, investimento em uma sobrevivência mais prolongada e ciclo de vida perene, estas apresentariam um metabolismo menos susceptível às variações ambientais.

Embora ainda sejam escassas, as investigações dos efeitos de sazonalidade em espécies de Myrtaceae parecem demonstrar que estes não são fatores de variabilidade preponderantes para o óleo da família. Mesmo para a espécie brasileira *Myrcia myrtifolia*, a composição química do óleo foi praticamente constante ao longo de uma avaliação feita mensalmente por um ano e sete meses por CERQUEIRA *et al.* (2007). A proporção entre os componentes majoritários α -pineno e terpinen-4-ol não variou significativamente durante o período analisado.

LEACH & WHIFFIN (1989), estudando o óleo volátil de folhas da espécie de Myrtaceae australiana *Angophora costata*, concluíram que as variações sazonais observadas não foram significativas, em função de variabilidade entre os indivíduos, presente mesmo quando estes são geneticamente similares. Estes autores também questionam estudos de variação sazonal em óleos de outras espécies, entre elas *E. ovata* e *E. camphora* (SIMONS & PARSONS, 1987), em que a ontogenia foliar não é levada em consideração e destacam a importância de se utilizar somente folhas maduras, estratégia que foi utilizada no presente trabalho. Em um estudo realizado com plântulas de *Pinus sylvestris* L., NERG *et al.* (1994) referem-se às diferenças encontradas na composição do óleo essencial como “variações sazonais”, no entanto, atribuem as alterações ao estágio de desenvolvimento da plântula.

Com relação às mudanças anuais verificadas neste estudo para os óleos de *M. macrocarpa*, *C. guaviroba* e *M. splendens*, é possível que estas obedeçam a um ciclo endógeno com período mais longo do que o que se observa para a maior parte das espécies em que a variabilidade de óleos voláteis em função do tempo já tenha sido investigada. Assim, seria interessante a realização de estudos futuros estendendo-

se o tempo de análise, a fim de se verificar se estas flutuações são realmente cíclicas e, em caso afirmativo, qual seria o período de cada ciclo.

Para todas as espécies analisadas, mesmo para *M. floribunda* e *M. macrocarpa*, para as quais todos os espécimes apresentavam porte semelhante, não indicando diferenças importantes de idade, foi observada grande variabilidade individual. Isso sugere que o fator genético é um dos fatores determinantes nas variações encontradas para os óleos voláteis.

Assim, os resultados obtidos neste estudo, além de contribuírem para a ampliação do conhecimento acerca da composição química dos óleos voláteis de Myrtaceae, poderá fornecer subsídios para futuros estudos sobre o metabolismo de óleos essenciais durante o desenvolvimento destas espécies, bem como sobre a relação entre diferenças na síntese destes metabólitos e a diversidade genética dos espécimes.

4. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANGELOPOULOU, D.; DMETZOS, C.; PERDETZOGLOU, D. Diurnal and seasonal variation of the essential oil labdanes and clerodanes from *Cistus monspeliensis* L. leaves. *Biochemical Systematics and Ecology*, v.30, p.189-203, 2002.

APEL, M.A. *Óleos voláteis de espécies da subtribo Eugeniinae (Myrtaceae): composição química e atividades antimicrobiana e antiinflamatória*. Porto Alegre, 2001. 256p. Tese de Doutorado – Faculdade de Farmácia – Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

APEL, M.A.; LIMA, M.E.; SOUZA, A.; CORDEIRO, I.; YOUNG, M.C.M.; SOBRAL, M.E.G.; SUFFREDINI, I.B.; MORENO, P.R.H.M. Screening of the biological activity from essential oils of native species from the Atlantic Rain Forest (São Paulo - Brazil), *Pharmacology online*, v.3, p.376-383, 2006.

ARAKIA, N.; KUSUMIA, K.; MASAMOTO, K.; NIWAC, Y.; IBA, K. Temperature-sensitive *Arabidopsis* mutant defective in 1-deoxy-D-xylulose 5-phosphate synthase within the

plastid non-mevalonate pathway of isoprenoid biosynthesis. *Physiologia Plantarum* v.108, p.19–24. 2000.

ASGHARI, G.; HOUSHFAR, G.; MAHAMOUDI, Z. Seasonal variation of mono- and sesquiterpenes in the essential oil of *Pycnocycla spinosa* Decne. Exboiss. *Iranian Journal of Pharmaceutical Research* v.1, p.61-63, 2002.

BAILEY, N.J.C.; OVEN, M.; HOLMES, E.; NICHOLSON, J.K.; ZENK, M.H. Metabolomic analysis of the consequences of cadmium exposure in *Silene cucubalus* cell cultures via ¹H NMR spectroscopy and chemometrics. *Phytochemistry*, v.62, p.851-858, 2003.

BYLAITÈ, E.; VENSKUTONIS, R.; ROOZEN, J.; POSTHUMNUS, M. A. Composition of essential oil of costmary [*Balsamita major* (L.) Desf.] at different growth phases. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, v.48, p.2409-2414, 2000.

CASTRO, A.H.F.; ALVARENGA, A.A.; SOARES, A.M.; YOUNG, M.C.M.; PURCINO, A.A.C. Avaliação sazonal da atividade da fenilalanina amônia-liase e dos teores de fenóis e taninos totais em *Byrsonima verbascifolia* Rich. ex A. Juss.: uma espécie medicinal do cerrado. *Revista Brasileira de Plantas Mediciniais*, v.7, n.3, p.45-55, 2005.

CERQUEIRA, M.D.; SOUZA-NETA, A.L.C.; PASSOS, A.M.G.V.M.; LIMA, B.O.; ROQUE, N.F.; MARTINS, D.; GUEDESC, M.L.S; CRUZ, F.G. Seasonal variation and antimicrobial activity of *Myrcia myrtifolia* essential oils *Journal of the Brazilian Chemical Society*, v.18, n.5, p.998-1003, 2007.

CHAKRABORTY, U.; DUTTA, S.; CHAKRABORTY, B. Drought induced biochemical changes in young tea leaves. *Indian Journal of Plant Physiology*, v.6, n.1, p.103-106, 2001.

FLAMINI, G.; CIONI, P.L. Seasonal variation of the chemical constituents of the essential oil of *Santolina etrusca* from Italy. *Chemistry and Biodiversity*, v.4, p.1008-1019, 2007.

FUENTES, J.D.; LERDAU M.; ATKINSON, R.; BALDOCCHI, D.; BOTTENHEIM, J.W.; CICCIOLO, P.; LAMB, B.; GERON, C.; GU, L.; GUENTHER, A.; SHARKEY, T.D.; STOCKWELL, W. Biogenic hydrocarbons in the atmospheric boundary layer: a review. *Bulletin of the American Meteorological Society* v.81, p.1537-1575, 2000.

HIRATA, J.K.R. Florística e estrutura do componente arbóreo de trilhas no Parque Estadual Das Fontes Do Ipiranga, São Paulo, SP, Brasil. São Paulo, 2006. 91p. Dissertação de Mestrado - Instituto de Botânica de São Paulo.

JANAS, K.; CVIKROVÁ, M.; PALAGIEWICZ, A. Alterations in phenylpropanoid content in soybean roots during low temperature acclimation. *Plant Physiology and Biochemistry*, v.38, n.7, p.587-593, 2000.

JUTEAU, F.; MASOTTI, V.; BESSIE`RE, J.M.; VIANO, J. Compositional characteristics of the essential oil of *Artemisia campestris* var. *glutinosa*. *Biochemical Systematics and Ecology* V.30, P.1065–1070, 2002.

KAPETANOS, C.; KARIOTI, A.; BOJOVIC, S.; MARIN, P.; VELJIC, M.; SKALTSA, H. Chemical and principal-component analyses of the essential oils of apioidae taxa (Apiaceae) from central Balkan. *Chemistry & Biodiversity*, v.5, p.101-119, 2008.

KOUKI, M., MANETAS, Y. Resource availability affects differentially the levels of gallotannins and condensed tannins in *Cerotonia siliqua*. *Biochemical Systematics and Ecology*, v.30, n.7, p.631-9, 2002.

LAVOLA, A.; TITTO, R.J.; de la ROSA, T.M. Allocation of carbon to growth and secondary metabolites in birch seedlings under UV-B radiation and CO₂ exposure. *Physiologia Plantarum*, v.109, n.3, p.260-267, 2000.

LEACH, G.L.; WHIFFIN, T. Ontogenetic, seasonal and diurnal variation in leaf volatile oils and leaf phenolics of *Angophora costata*. *Australian Journal of Systematic Botany*, v.2, p.99-111, 1989.

LORETO, F.; SHARKEY, T.D. On the relationship between isoprene emission and photosynthetic metabolites under different environmental conditions. *Planta*, v.189, p.420-424, 1993.

MacARTHUR, R.H.; WILSON, E.O. *The theory of island biogeography*. Princeton: Princeton University Press, 1967. 203p.

MACHADO, E.C.; MEDINA, C.L.; GOMES, M.M.A.; HABERMANN, G. Variação sazonal da fotossíntese, condutância estomática e potencial da água na folha de laranja 'valência'. *Scientia Agricola*, v.59, n.1, p.53-58, 2002.

MARTINS, S.E.; ROSSI, L.; SAMPAIO, P.S.P; MAGENTA, M.A.G. Caracterização florística de comunidades vegetais de restinga em Bertioga, SP, Brasil. *Acta Botanica Brasilica*, v.22, n.1, p.249-274, 2008.

MASOTTI, V.; JUTEAE, F.; BESSIÈRE, J. M.; VIANO, J. Seasonal and phonological variations of the essential oil from the narrow endemic species *Artemisia molinieri* and its biological activities. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, v.51, p.7115-7121, 2003.

NERG, A.; KAINULAINEN, P.; VUORINEN, M.; HANSO, M.; HOLOPAINEN, J.K.; KURKELA, T. Seasonal and geographical variation of terpenes, resin acids and total phenolics in nursery grown seedlings of Scots pine (*Pinus sylvestris* L.). *New Phytologist*, v.128, p.703-713, 1994.

PARVEEN I.; MOORBY J.M.; FRASER M.D.; ALLISON G.G.; KOPKA J. Application of gas chromatography-mass spectrometry metabolite profiling techniques to the analysis of heathland plant diets of sheep. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, v.55, p.1129-1138, 2007.

PAVÒN, J.L.P.; PENA, A.G.; PINTO, C.G.; CORDERO, B.M. Differentiation of types of crude oils in polluted soil samples by headspace-fast gas chromatography–mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*, v.1137, p.101–109, 2006.

PERRY, N.B.; ANDERSON, R.E.; BRENNAN, N.J.; DOUGLAS, M.H.; HEANEY, A.J.; McGIMPSEY, J.A. & SMALLFIELD, B.M. Essential oils from Dalmatian sage (*Salvia officinalis* L.): Variations among individuals, plant parts, seasons and sites. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* v.47, p.2048-2054, 1999.

RODILLA, J.M.; TINOCO, M.T.; MORAIS, J.C.; GIMENEZ C.; CABRERA, R.; MARTIN-BENITO, D.; CASTILLO, L.; GONZALEZ-COLOMA, A. *Laurus novocanariensis* essential oil: Seasonal variation and valorization. *Biochemical Systematics and Ecology*, v.36, p.167-176, 2008.

SCHÖNWITZ, R.; LOHWASSER, K.; KLOOS, M.; ZIEGLER, H. Seasonal variation in the monoterpenes in needles of *Picea abies* (L.) Karst. *Trees*, v.4, n.1, 1990.

SIMMONS, D.; PARSONS, R.F. Seasonal Variation in the Volatile Leaf Oils of Two Eucalyptus Species. *Biochemical Systematics and Ecology*. v.15, n.2., p.204-215, 1997.

STAUDT, M.; BERTIN, N. Light and temperature dependence of the emission of cyclic and acyclic monoterpenes from holm oak (*Quercus ilex* L.) leaves. *Plant, Cell and Environment*, v.21, p.385-395, 1998.

VEKIARI, S. A.; PROTOPAPADAKIS, E. E.; PAPADOPOULOU, P.; PAPANICOLAO, D.; PANOU, C.; VAMVAKIAS, M. Composition and seasonal variation of the essential oil from leaves and peel of a cretan lemon variety. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* v.50, p.147-153, 2002.

WOLD, S.; ESBENSEN, K.; GELADI, P. Principal component analysis. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v.2, p.37-52, 1987.

ZIPPARRO, V.B.; GUILHERME, F.A.G.; ALMEIDA-SCABBIA, R.J.; MORELLATO, L.P.C. Levantamento florístico de Floresta Atlântica no Sul do Estado de São Paulo, Parque Estadual Intervales, Base Saibadel. *Biota Neotropica*, v.5, n.1, disponível em: <http://www.biotaneotropica.org.br/v5n1/pt/abstract?inventory+BN02605012005>. Acesso em 10 jan. 2008.

CAPÍTULO 4

Variações geográficas nos óleos voláteis
de *Campomanesia guaviroba* (DC.)
Kiaersk., *Eugenia cuprea* (O. Berg) Nied. e
Calypttranthes lucida Mart. ex DC.
(Myrtaceae)

ABSTRACT

Infra-specific variability in volatile oil chemical composition was already verified for several species and may be due to both environmental and genetic features, implying, in this case, the existence of chemotypes. The aim of this work was to investigate the presence of those variations in populations of *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk., *Eugenia cuprea* (O. Berg) Nied. e *Calypttranthes lucida* Mart. Ex DC. from two fragments of the Atlantic Rain Forest: State Parque Ilha do Cardoso (PEIC) and Caragatatuba. *C. guaviroba* volatile oils did not differ between specimens from the two areas, presenting oxygenated sesquiterpenes as the main compounds. For *E. cuprea*, no significant differences were found for the main class of compounds, but variations were observed for the major constituents β -caryophyllene (with higher levels in Caragatatuba) and spathulenol (with higher levels in PEIC). For *C. lucida*, significant differences observed mainly for the major compounds β -caryophyllene (with higher levels in PEIC) and spathulenol (with higher levels in Caragatatuba). Results indicated an inversion in the main sesquiterpene biosynthetic route between *E. cuprea* and *C. lucida* from the different locations. The differential variability for those two species, along with the lack of variation pattern found for *C. guaviroba* suggests that differences observed are due to genetic variations.

RESUMO

Variabilidade infra-específica na composição química de óleos voláteis já foi verificada para diversas espécies e pode ser decorrente tanto de aspectos ambientais quanto genéticos, configurando, neste caso, a existência de quimiotipos. O objetivo deste trabalho foi investigar a existência dessas variações em populações de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk., *Eugenia cuprea* (O. Berg) Nied. e *Calyptranthes lucida* Mart. Ex DC. ocorrentes em dois fragmentos de Mata Atlântica: o Parque Estadual da Ilha do Cardoso (PEIC) e o Parque Estadual da Serra do Mar, Núcleo de Caraguatatuba. A composição do óleo volátil de *C. guaviroba* não diferiu entre os espécimes coletados nas duas áreas, sendo os sesquiterpenos oxigenados os constituintes majoritários. Para *E. cuprea*, não houve variações significativas na proporção das classes de compostos, mas estas foram observadas para os majoritários β -cariofileno (com maior teor em Caraguatatuba) e espatulenol (com maior teor no PEIC). Para *C. lucida*, as diferenças significativas observadas principalmente para os majoritários β -cariofileno (com maior teor no PEIC) e espatulenol (com maior teor em Caraguatatuba). Os resultados sugerem uma inversão na rota biossintética de sesquiterpenos predominante em cada um dos locais para essas duas espécies. As diferenças de variabilidade entre *E. cuprea* e *C. lucida* e a ausência de padrão de variabilidade em *C. guaviroba* sugerem que as variações observadas sejam oriundas do componente genético.

1. INTRODUÇÃO

A variabilidade química dos óleos voláteis e sua relação com a distribuição geográfica de uma determinada espécie tem sido objeto de estudos nas últimas décadas (MERLE *et al.*, 2004), interesse que resulta da crescente importância econômica destes metabólitos e da busca pela indústria de novos cultivares, tendo como alvo principal perfis diferentes de composição química (SCHULZ *et al.*, 2004).

Variações desse tipo são freqüentemente reportadas para táxons de Lamiaceae, tais como *Thymus* L., *Salvia* L., *Lavandula* L., *Mentha* L. e *Ocimum* L. (SALGUEIRO *et al.*, 2000; KAROUSOU *et al.*, 1998; SKOULA *et al.*, 1996; 2000).

Em muitos casos, as variações geográficas estão associadas com os diferentes parâmetros ambientais que caracterizam as localidades das populações naturais. Diferenças climáticas nos habitats das espécies produtoras de óleos essenciais, como disponibilidade hídrica e de nutrientes (como nitrogênio e fósforo), podem modificar sua composição (BARNOLA & CEDEÑO, 2000; MUZIKA *et al.*, 1989; YANI *et al.*, 1993). As diferenças entre fatores de estresse, como herbivoria, também parecem modificar a composição química de óleos essenciais, fato bastante comum em espécies de *Pinus* L. (BARNOLA *et al.*, 1997). Em outros exemplos, no entanto, variedades quanto à composição química do óleo podem crescer lado a lado em uma mesma área, compartilhando as mesmas características climáticas e edáficas, o que indica a base genética da variação. Nestas situações, os óleos essenciais tornam-se importantes ferramentas quimiotaxômicas, e permitem a distinção de fenótipos químicos, chamados quimiotipos ou raças químicas (HILLIG, 2004). Em *Origanum microphyllum* Sieber ex Benth., por exemplo, quatro perfis químicos de óleos voláteis foram descritos por GOTSIOU *et al.* (2002), sendo que todos foram observados nas populações diferentes estudadas pelos autores, indicando, assim o controle genético da composição. O mesmo foi observado em *Citrus reticulata* Blanco, cuja composição química do óleo possibilitou a distinção de nove cultivares (MERLE *et al.*, 2004) e para *Thymus praecox* Opiz, em que a distribuição de treze quimiotipos não é determinada pelo local de ocorrência, embora haja predominância de um ou outro tipo dependendo do local estudado (SCHMIDT *et al.*, 2004).

No entanto, na grande maioria dos estudos de variabilidade infra-específica, especialmente aqueles realizados em campo, o termo “variações geográficas” engloba dois

componentes de difícil dissociação: o ambiental e o genético. Os dois fatores estão intrinsecamente relacionados, uma vez que, além da influência direta dos parâmetros ambientais na síntese dos voláteis, o ambiente pode atuar promovendo uma pressão de seleção em detrimento de um ou outro genótipo (GOTSIOU *et al.*, 2002).

Em Myrtaceae, variações infra-específicas na composição de óleos voláteis já foram verificadas em algumas espécies australianas com importante utilização industrial. A existência de variações populacionais é bem estabelecida para a espécie *Melaleuca alternifolia* Cheel, com base nos teores dos monoterpenos 1,8-cineol, terpineno e terpien-4-ol (LEE *et al.*, 2002; RUSSEL & SOUTHWELL, 2003). O mesmo ocorre com *Chamelaucium uncinatum* Schauer, que apresenta quatro variedades, com dominância de citronelal, α -pineno ou limoneno, ou co-dominância destes três monoterpenos (EGERTON-WARBURTON *et al.*, 1998).

Apesar de ainda ser um aspecto pouco estudado em Myrtaceae brasileiras, variações infra-específicas já foram observadas para algumas espécies da família. Em duas variedades de *Eugenia brasiliensis* Lam. cultivadas no mesmo habitat (região de cerrado), foram encontrados dois perfis químicos diferentes, um com predomínio de α -selineno e o outro, de β -selineno (FISCHER *et al.*, 2005). Além disso, a composição dos espécimes de cerrado diferiu de espécimes coletados na região sul do Brasil, com predomínio de α - e β - pineno (APEL *et al.*, 2004). Em diferentes morfo-tipos de *Pimenta pseudocaryophyllus* (Gomes) Landrum, já foram identificados um quimiotipo rico em eugenol e outro rico em metil-eugenol (LIMA *et al.*, 2006). Em *Myrceugenia cucullata* D. Legrand, LIMBERGER *et al.* (2005) identificaram dois quimiotipos, um rico em *E*-nerolidol e outro em (-)- α - e (-)- β -pinenos.

No entanto, a despeito da grande frequência de Myrtaceae na Mata Atlântica e da extensão deste bioma, estudos de variações geográficas na composição do óleo volátil da família ainda são pouco comuns.

Nesse aspecto, o objetivo deste trabalho foi analisar possíveis diferenças no rendimento e na composição dos óleos voláteis de espécies de Myrtaceae que co-ocorrem em dois fragmentos distintos de Mata Atlântica: o Parque Estadual da Ilha do Cardoso (Cananéia, SP) e o Parque Estadual da Serra do Mar, Núcleo Caraguatatuba (Caraguatatuba, SP). Para este estudo, foram selecionadas as seguintes espécies: *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk., *Eugenia cuprea* (O. Berg) Nied. e *Calypttranthes lucida* Mart. ex DC. As três espécies são amplamente distribuídas no Brasil, sendo que *C. guaviroba* é bastante

conhecida pelo consumo de seu fruto, conhecido como “gabirola”. Apesar de existirem estudos da composição de espécies de *Campomanesia*, bem como de *E. cuprea* e *C. lucida* (LIMBERGER *et al.*, 2002; APEL *et al.*, 2004), a possível existência de variabilidade nos óleos voláteis destas espécies ainda é desconhecida.

2. MATERIAL E MÉTODOS

2.1. Locais de estudo

2.1.1. Parque Estadual da Ilha do Cardoso

Localiza-se no litoral sul do estado de São Paulo, no município de Cananéia, entre os paralelos 25°03'05'' e 25°18'18''S e os meridianos 47°53'48'' e 47°05'42''W. Apresenta topografia predominantemente montanhosa. O clima é do tipo megatérmico superúmido, com temperatura média anual de 21,2°C. Encontram-se na Ilha 134 famílias de Fanerógamas (986 espécies no total), destacando-se Orchidaceae (118 espécies), Myrtaceae (70 espécies), Leguminosae (63 espécies), Poaceae (57 espécies) e Rubiaceae (50 espécies) (BARROS *et al.*, 1991).

2.1.2. Parque Estadual da Serra do Mar, Núcleo Caraguatatuba

Localiza-se no Litoral Norte do Estado de São Paulo (23°32' a 23°41' S e 45°26' a 45°43' W). As famílias mais abundantes da região são Arecaceae e Myrtaceae, sendo que a maior riqueza de espécies é apresentada por Myrtaceae, Lauraceae, Rubiaceae, Leguminosae e Euphorbiaceae, nesta ordem (Dra Inês Cordeiro, Instituto de Botânica de São Paulo, SP, comunicação pessoal).

2.2. Coleta do material vegetal

Folhas íntegras e completamente expandidas de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk., *Eugenia cuprea* (O. Berg) Nied. e *Calyptanthus lucida* Mart. ex DC. foram coletadas

no Parque Estadual da Ilha do Cardoso (PEIC) e em Caraguatuba em nov/dez de 2004, jun/jul de 2006 e abr/jun de 2007, respectivamente. Foram coletados três indivíduos de cada uma das espécies, em cada local e em cada período de coleta. As folhas foram secas à sombra em temperatura ambiente até peso constante para a extração do óleo volátil.

Exsicatas destes espécimes foram depositadas no Herbário do Instituto de Botânica de São Paulo sob os seguintes números de registro: Souza 204, Souza 205, Souza 206, Cordeiro 2955, Moreno 176, Moreno 201 (para espécimes de *C. guaviroba* coletados no PEIC), Nascimento 19, Nascimento 30, Nascimento 31, Moreno 201, Moreno 202 e Árvore 380 (para espécimes de *C. guaviroba* coletados em Caraguatuba), Cordeiro 2830, Nascimento 17, Nascimento 25 (para espécimes de *C. lucida* coletados no PEIC), Árvore 85, Árvore 48 e Árvore 551 (para espécimes de *C. lucida* coletados em Caraguatuba), Árvore 338, Moreno 197, Nascimento 12, Nascimento 16 (para espécimes de *E. cuprea* coletados no PEIC) e Cordeiro 2929, Árvore 76, Moreno 172, Moreno 186, Souza 195 e Souza 212 (para espécimes de *E. cuprea* coletados em Caraguatuba).

2.3. Extração e análise química dos óleos voláteis

A extração dos óleos voláteis, sua análise química e a identificação dos componentes foram realizadas segundo a metodologia descrita no capítulo 2.

2.4. Análise estatística

A comparação das médias foi realizada utilizando-se o teste *t* ($p \leq 0,5$), conforme descrito no Capítulo 2.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O estudo da variabilidade infra-específica de óleos essenciais, além de sua importância econômica, uma vez que pode permitir que novos perfis químicos sejam encontrados (LEWINSOHN *et al.*, 2000; PERRY *et al.*, 1999), pode ser uma ferramenta valiosa para a elucidação da diversidade genética de uma espécie, em especial quando esta apresenta diversidades morfológicas com distribuição geográfica distinta (AZEVEDO *et al.*, 2001; ADAMS *et al.*, 2001).

Neste trabalho, foram analisados óleos voláteis de espécies de Myrtaceae em dois fragmentos de Mata Atlântica, de amostras coletadas em três anos. A análise dos óleos voláteis de um mesmo indivíduo não apresentou variação entre as três datas de coleta, tanto no que diz respeito ao rendimento, quanto à composição química do óleo (os mesmos componentes foram encontrados, nas mesmas proporções), para as três espécies estudadas. Diante deste fato, optou-se pela análise das amostras dos diferentes anos de forma conjunta, permitindo assim aumentar o espaço amostral, totalizando um valor de “n” igual a 9, a fim de que mesmo variações sutis na composição pudessem ser identificadas.

O rendimento do óleo volátil das espécies analisadas é apresentado na Figura 1.

Em *C. guaviroba*, os valores médios foram de 2,01 mg.g⁻¹MS no PEIC e de 1,29 mg.g⁻¹MS em Caraguatatuba. Em *E. cuprea*, estes valores foram de 0,51 e 0,67 mg.g⁻¹MS, respectivamente, enquanto para *C. lucida*, 1,53 e 1,63 mg.g⁻¹MS. Os resultados obtidos para *C. guaviroba* são semelhantes aos obtidos para os espécimes coletados no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga (Capítulo 2), sendo similares aos rendimentos obtidos para outras espécies do gênero *Campomanesia* por LIMBERGER *et al.* (2001). Os valores obtidos para *E. cuprea* e *C. lucida* também foram semelhantes àqueles obtidos em estudos prévios (APEL *et al.*, 2004; LIMBERGER *et al.*, 2002).

Para as três espécies, a análise estatística pelo teste t (0,05) das médias de rendimentos não mostrou diferença significativa entre os dois locais de estudo.

Figura 1. Rendimento médio (mg.g⁻¹MS) dos óleos voláteis de folhas secas de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. (A), *Eugenia cuprea* (O. Berg) Nied. (B) e *Calypttranthes lucida* Mart. ex DC. (C) coletadas no Parque Estadual da Ilha do Cardoso e no Parque Estadual da Serra do Mar, Núcleo de Caragutatuba. Barras indicam o erro padrão das médias (n=9).

A composição do óleo volátil de *C. guaviroba* nos dois locais é mostrada na tabela 1 e a estrutura química dos compostos majoritários é apresentada na Figura 2.

Tabela 1. Composição química média do óleo volátil de folhas secas de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. coletadas no Parque Estadual da Ilha do Cardoso (n= 9) e no Parque Estadual da Serra do Mar, Núcleo de Caraguatatuba (n = 9). IK - Índice de Retenção de Kováts. N.I. - composto não identificado.

Composto	IK	Área (%)	
		Ilha do Cardoso	Caraguatatuba
α -pineno	932	2,1	0,2
trans- β -ocimeno	1056	0,2	0,6
β -pineno	1139	1,8	0,2
δ -elemeno	1338	2,4	0,3
α -ylangeno	1345	0,2	0,2
α -copaeno	1384	1,7	1,3
β -bourboneno	1394	-	0,1
β -elemeno	1410	1,9	1,0
α -gurjuneno	1417	0,7	0,8
β -cariofileno	1420	3,5	1,7
β -ylangeno	1429	-	-
β -copaeno	1435	0,9	0,5
γ -elemeno	1438	1,0	0,5
α -guaieno	1443	1,5	-
trans-muurola-3,5-dieno	1447	0,4	1,7
n.i. 1	1452	-	0,2
α -humuleno	1458	1,1	0,9
allo-aromadendreno	1460	1,6	0,8
trans-cadina-1(6),4-dieno	1473	0,1	0,2
germacreno D	1475	1,0	0,5
γ -muuroleno	1482	2,4	1,6
α -amorfenos	1484	0,7	2,3
β -selineno	1488	0,9	1,7
δ -selineno	1492	0,4	0,9
trans-muurola-4(14),5-dieno	1493	0,5	-
γ -amorfenos	1495	0,4	1,6
biciclogermacreno	1500	9,0	1,2
α -muuroleno	1503	0,5	1,8
δ -amorfenos	1508	0,5	0,7
γ -cadineno	1520	0,9	1,7
δ -cadineno	1540	2,7	6,5
trans-cadina-1,4-dieno	1544	0,2	0,6

Tabela 1. (Continuação)

Composto	IK	Área (%)	
		Ilha do Cardoso	Caraguatatuba
α -cadineno	1557	0,3	0,3
α -calacoreno	1560	0,4	0,5
selina-3,7(11)-dieno	1568	1,5	0,5
palustrol	1573	2,8	1,6
maaliol	1576	0,6	0,3
espatulenol	1578	4,2	3,5
cis- β -elemenona	1587	-	0,4
viridiflorol	1595	13,6	13,5
rosifoliol	1600	4,0	3,1
guaiol	1610	6,9	7,1
β -oplopenona	1612	-	0,1
1,10-di-epi-cubenol	1627	1,5	3,0
junenol	1637	2,4	1,0
10-epi- γ -eudesmol	1645	1,3	2,5
1-epi-cubenol	1652	1,5	2,1
cis-cadin-4-en-7-ol	1654	4,6	2,1
epi- α -cadinol	1655	1,4	0,9
α -cadinol	1659	6,6	12,0
valerianol	1663	0,5	2,0
cis-calamalen-10-ol	1666	0,4	0,4
trans-calamenen-10-ol	1672	-	0,8
eudesma-7(11)-en-4-ol	1688	0,4	7,1
cadaleno	1750	0,4	0,5
γ -costol	1754	-	0,3
14-oxi- α -muuroleno	1771	-	0,4
eudesma-7(11)-en-4-ol	1775	-	0,2
14-hidroxi- α -muuroleno	1778	1,4	0,2
criptomeridiol	1813	-	0,2
n.i. 2	1915	1,1	0,9
n.i. 3	1945	-	0,1
isofitol	1946	0,2	-
hidrocarbonetos monoterpênicos		4,0	0,9
monoterpenos oxigenados		-	-
hidrocarbonetos sesquiterpênicos		39,9	33,2
sesquiterpenos oxigenados		55,3	65,8
outros		0,2	0,1

n.i. 1 - m/z :159, 128, 105, 44, 204, 77
n.i. 2 - m/z: 43, 58, 71, 109, 85, 95, 124
n.i. 3 - m/z: 252, 185, 134, 171, 146, 157, 237, 119, 105

A composição do óleo volátil desta espécie foi semelhante nos dois fragmentos de Mata Atlântica estudados, o que pôde ser confirmado com a análise estatística pelo teste t ($p \leq 0,05$) das classes majoritárias de compostos. Os hidrocarbonetos sesquiterpênicos corresponderam a 39,9% do óleo no PEIC e a 33,2% em Caraguatatuba, enquanto os sesquiterpenos oxigenados corresponderam a 55,3 e 68,8%, respectivamente. No entanto, essa diferença não foi significativa, pois a variabilidade entre os indivíduos de uma mesma localidade é maior, não havendo um padrão geográfico de distribuição entre as classes de compostos para a espécie.

O componente majoritário dos espécimes tanto da Ilha do Cardoso quanto de Caraguatatuba foi o viridiflorol, com médias de 13,6% no PEIC e 13,5% em Caraguatatuba, valores não distintos estatisticamente. Componentes como espatulenol (4,2 e 3,5%), guaiol (6,9 e 7,1%) e rosifoliol (4,0 e 3,1%) também não diferiram entre as duas localidades. Adicionalmente, embora alguns componentes como α -cadinol (6,6 e 12,0%), δ -cadineno (2,7 e 6,5%), biciclogermacreno (9,0 e 1,2%) e eudesma-7(11)-en-4-ol (0,4 e 7,1%) tenham apresentado valores não tão próximos no PEIC e em Caraguatatuba, esta diferença não foi significativa, em virtude da grande variabilidade entre as unidades amostrais de cada uma das localidades, o que novamente sugere que não existe um padrão geográfico de perfil de óleo volátil para *C. guaviroba* nestas duas áreas de Mata Atlântica.

A composição do óleo de *C. guaviroba* de plantas coletadas no PEIC e em Caraguatatuba também foi semelhante àquela dos indivíduos coletados no Parque Estadual das Fontes do Ipiranga (Capítulos 2 e 3), em termos de distribuição e proporção de majoritários, sendo que as pequenas diferenças observadas não foram significativas pelo teste de Tukey ($p \leq 0,05$) e podem estar relacionadas à idade dos indivíduos. A vegetação do Parque Estadual das Fontes do Ipiranga é bem menos preservada e os espécimes coletados lá são aparentemente mais jovens. Além disso, no PEFI foram coletados três espécimes, contra nove de cada uma das duas outras localidades.

Figura 2. Estrutura química dos componentes majoritários do óleo volátil de folhas secas de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. coletadas no Parque Estadual da Ilha do Cardoso e no Parque Estadual da Serra do Mar, Núcleo de Caraguatatuba.

Ao contrário do que foi observado para *C. guaviroba*, a composição química do óleo volátil de indivíduos de *C. lucida* coletados nas duas diferentes áreas apresentou diferenças (Tabela 2). As classes majoritárias são inversamente proporcionais nas duas áreas (Figura 3). Na Ilha do Cardoso, predominaram os hidrocarbonetos sesquiterpênicos (75,4%), seguidos pelos sesquiterpenos oxigenados (24,5%). Já em Caraguatatuba, os sesquiterpenos oxigenados (74,0%) foram mais abundantes do que os hidrocarbonetos (24,5%).

Tabela 2. Composição química média do óleo volátil de folhas secas de *Calyptanthus lucida* Mart. ex DC. coletadas no Parque Estadual da Ilha do Cardoso (n=9) e no Parque Estadual da Serra do Mar, Núcleo de Caraguatatuba (n=9). IK - Índice de Retenção de Kováts. N.I. - composto não identificado.

Composto	IK	Área (%)	
		Ilha do Cardoso	Caraguatatuba
1,8 cineol	1026	0,1	0,8
dauceno	1380	0,3	-
α -copaeno	1376	0,4	1,4
α -gurjuneno	1409	4,2	-
α -ionona	1428	-	0,3
β -cariofileno	1417	14,2	1,6
β -ylangeno	1420	0,5	-
β -gurjuneno	1431	2,8	-
aromadendreno	1439	8,0	-
trans-muuro-la-3,5-dieno	1450	3,1	-
α -humuleno	1454	8,9	0,7
E- β -farneseno	1454	1,8	-
dauca-5,8-dieno	1471	0,2	1,3
10-epi- β -acoradieno	1474	0,2	0,6
germacreno-D	1484	1,7	0,4
β -selineno	1490	13,7	3,8
δ -selineno	1492	1,0	-
α -selineno	1498	1,8	1,7
α -muurolenob	1500	0,1	-
δ -amorfeno	1512	5,4	-
zonareno	1528	0,4	-
γ -cadineno	1513	0,1	0,6
δ -cadineno	1522	1,4	0,6
cis-calameneno	1528	-	1,0
trans-cadina-1,4-dieno	1534	1,7	0,4
α -cadineno	1538	1,8	-
α -calacoreno	1544	1,7	1,4
cis-muurol-5-em-4- β -ol	1551	0,6	0,9
occidentalol	1552	0,8	0,8
trans-dauca-4(11),7-dieno	1556	0,1	0,3
espatulenol	1577	0,6	26,8
óxido de cariofileno	1583	3,8	2,1
globulol	1590	1,3	0,7
viridiflorol	1592	1,1	0,4
carotol	1594	6,5	0,4
salvia-4(14)-em-1-ona	1594	-	0,9
rosifoliol	1600	0,8	-
guaiol	1610	0,9	2,4

Tabela 2. (Continuação)			
Composto	IK	Área (%)	
		Ilha do Cardoso	Caraguatatuba
1,3,5-bisabolatrien-7-ol	1601	-	0,7
n.i. 1	1605	-	0,6
β -oplopenona	1607	-	2,2
β -epóxido de cedreno	1622	-	0,8
1,10-di-epi-cubenol	1619	0,2	0,5
junenol	1619	0,2	0,5
α -corocaleno	1622	-	5,8
10-epi- γ -eudesmol	1623	2,3	3,0
1-epi-cubenol	1628	0,5	5,3
n.i. 2	1629	0,1	0,3
5-cedranona	1630	-	2,2
epi- α -muurolol	1642	1,7	3,1
α -eudesmol	1653	1,8	3,7
α -cadinol	1654	0,4	3,5
n.i. 3	1660	0,2	-
7-epi- α -eudesmol	1663	0,4	0,7
14-hidroxi-9-epi-(E)-cariofileno	1669	-	3,3
cadaleno	1676	-	2,9
mustacona	1677	-	1,0
acetato de elemolila	1680	-	0,5
eudesma-4(15),7-dien-1 β -ol	1688	-	1,7
amorpha-1,9-dien-2-ol	1700	-	1,6
10-nor-calamenen-10-ona	1702	-	0,2
cis-thujopsenal	1709	-	0,8
γ -costol	1745	-	0,4
criptomeridiol	1813	-	0,4
n.i. 4	1825	-	0,7
occidol	1837	-	0,6
fitol	1943	-	0,5
hidrocarbonetos monoterpênicos		-	-
monoterpenos oxigenados		0,1	0,8
hidrocarbonetos sesquiterpênicos		75,4	24,5
sesquiterpenos oxigenados		24,2	74,5
outros		-	0,5
n.i. 1 - m/z: 1 138, 109, 95, 177, 95, 67			
n.i. 2 - m/z: 136, 91, 105, 119, 79, 41, 69, 55, 157, 161			
n.i. 3 - m/z: 179, 109, 89, 41, 137, 222			
n.i. 4 - m/z: 43, 58, 71, 109, 85, 95, 124

Figura 3. Porcentagem das classes majoritárias de compostos (sesquiterpenos oxigenados e hidrocarbonetos sesquiterpênicos) nos óleos voláteis de folhas secas de *Calyptanthus lucida* Mart. ex DC. coletadas no Parque Estadual da Ilha do Cardoso (barras de cor preta) e no Parque Estadual da Serra do Mar, Núcleo de Caraguatatuba (barras de cor cinza). O asterisco indica valores significativamente diferentes pelo teste t ($p \leq 0,05$).

Esta diferença é oriunda principalmente dos níveis dos compostos majoritários β -cariofileno, cujos teores foram 14,2% no PEIC e 1,6% em Caraguatatuba e espatulenol, cujos valores foram 0,6 e 26,8%, respectivamente. As diferenças foram significativas nestes dois casos (Figura 4). Já para β -selineno, presente em níveis elevados no PEIC (13,7%), mas nem tanto em Caraguatatuba (3,8%), esta diferença não chegou a ser significativa, devido à variabilidade entre as amostras de cada local. O mesmo foi observado com α -humuleno (8,9 e 0,7%), α -corocaleno (0 e 5,8%) e 1-*epi*-cubenol (0,5 e 5,3%). Estes resultados indicam o predomínio de rotas de ciclização de sesquiterpenos distintas entre as duas localidades (Figura 6). Nas plantas de *C. lucida* oriundas do PEIC, a rota que se origina do cátion *E,E*-farnesila, a partir da qual são sintetizados o β -cariofileno, o α -humuleno e o β -selineno, parece predominar, enquanto que nos espécimes de Caraguatatuba a rota que se origina do cátion *E,Z*-farnesila, que dá origem ao espatulenol, α -calacoreno e 1-*epi*-cubenol (Figuras 5 e 6), está aparentemente mais ativa. A composição química do óleo volátil de *C. lucida* nestes dois locais foi notadamente distinta daquela obtida por LIMBERGER *et al.* (2002) para um

espécime coletado em uma área de Mata Atlântica da região sul do país. Neste espécime, apesar de o β -cariofileno estar presente (9,4% do óleo volátil), assim como o espatulenol (0,4%), o composto majoritário encontrado foi o β -bisaboleno (25,5%). Apesar da diferença nos componentes majoritários, a rota biossintética envolvida é a mesma observada nas plantas de Caraguatatuba, uma vez que a via de ciclização do bisabolano que leva à formação do β -bisaboleno, também deriva do cátion *E,Z*-farnesila (Figura 6).

Figura 4. Porcentagem dos componentes majoritários dos óleos voláteis de folhas secas de *Calyptanthus lucida* Mart. ex DC. coletadas no Parque Estadual da Ilha do Cardoso (barras de cor preta) e no Parque Estadual da Serra do Mar, Núcleo de Caraguatatuba (barras de cor cinza). O asterisco indica valores significativamente diferentes pelo teste t ($p \leq 0,05$), $n=9$.

Figura 5. Estrutura química dos componentes majoritários dos óleos voláteis de folhas secas de *Calyptanthus lucida* Mart. ex DC. coletadas no Parque Estadual da Ilha do Cardoso e no Parque Estadual da Serra do Mar, Núcleo de Caraguatuba.

Figura 6. Rota biossintética dos precursores dos sesquiterpenos. Adaptado de DEWICK (1997).

A composição do óleo volátil de folhas de *E. cuprea* coletadas na Ilha do Cardoso e em Caraguatatuba é apresentada na Tabela 3. Os resultados foram semelhantes aos obtidos por APEL *et al.* (2004) com espécimes coletados na região sul do país onde o óleo também era composto majoritariamente por sesquiterpenos (78,6%). No entanto, no presente trabalho essa proporção foi ainda mais elevada, sendo de 99,3% no PEIC e 97,0% em Caraguatatuba.

Tabela 3. Composição química média do óleo volátil de folhas secas de *Eugenia cuprea* (O. Berg) Nied. coletadas no Parque Estadual da Ilha do Cardoso (n= 9) e no Parque Estadual da Serra do Mar, Núcleo de Caraguatatuba (n= 9). IK - Índice de Retenção de Kováts. N.I. - composto não identificado.

Composto	IK	Ilha do Cardoso (%)	Caraguatatuba (%)
α -pineno	932	-	0,6
n-nonanal	1100	0,2	-
γ -terpineol	1054	1,8	0,4
α -cubebeno	1345	0,5	0,9
α -copaeno	1374	6,2	4,3
β -bourboneno	1387	0,3	0,7
β -elemeno	1389	0,9	0,7
β -cariofileno	1417	10,0	19,1
β -copaeno	1435	0,3	0,6
γ -elemeno	1438	1,3	1,0
α -guaiano	1443	0,4	-
trans-muurolo-3,5-dieno	1447	0,2	-
α -humuleno	1458	3,3	2,7
allo-aromadendreno	1460	2,9	3,3
trans-cadina-1(6),4-dieno	1473	1,2	0,4
germacreno D	1475	0,9	3,3
γ -muuroleno	1482	-	0,5
α -amorfeno	1484	1,6	-
β -selineno	1488	0,3	2,2
δ -selineno	1492	-	1,9
biciclogermacreno	1500	7,7	1,8
α -muuroleno	1503	0,6	0,5
δ -amorfeno	1508	0,8	0,2
γ -cadineno	1520	0,8	0,8
δ -cadineno	1540	6,1	5,1
trans-cadina-1,4-dieno	1544	0,2	0,3
α -calacoreno	1560	0,4	0,2
selina-3,7(11)-dieno	1568	0,5	0,5
β -calacoreno	1571	0,7	-
palustrol	1573	1,4	0,5
maaliol	1576	0,6	0,2
espatulenol	1578	19,6	8,6
óxido de cariofileno	1583	5,4	8,0
rosifoliol	1600	2,0	0,5

Tabela 3. (Continuação)			
Composto	IK	Área (%)	
		Ilha do Cardoso	Caraguatatuba
guaíol	1610	3,1	1,7
1,10-di-epi-cubenol	1627	1,7	1,6
junenol	1637	1,0	1,6
10-epi- γ -eudesmol	1645	1,2	0,7
1-epi-cubenol	1652	2,3	1,3
cis-cadin-4-en-7-ol	1654	1,2	3,5
epi- α -cadinol	1655	2,8	2,9
α -cadinol	1659	2,9	4,9
valerianol	1663	2,1	1,3
eudesma-7(11)-em-4-ol	1688	0,9	1,1
cadaleno	1750	0,7	-
γ costol	1754	1,2	2,0
14-oxi- α -muuroleno	1771	0,6	2,3
eudesma-7(11)-en-4-ol	1775	0,9	3,0
14-hidroxi- α -muuroleno	1778	-	0,3
(Z)-isobutirato de nerolidila	1784	-	0,6
n.i. 1	1915	0,2	1,2
n.i. 2	1945	-	0,3
monoterpenos hidrocarbonetos		-	0,6
monoterpenos oxigenados		0,2	-
hidrocarbonetos sesquiterpênicos		48,4	51,1
sesquiterpenos oxigenados		50,8	45,9
outros		0,5	0,1
n.i. 1 - m/z: 43, 58, 71, 109, 85, 95, 124			
n.i. 2 - m/z: 252, 185, 134, 171, 146, 157, 237, 119, 105			

Assim como para *C. lucida*, foram observadas diferenças significativas nos teores dos componentes majoritários de *E. cuprea* (Figura 7) nas diferentes localidades. No PEIC, o componente majoritário foi o espatulenol, com 19,6%, seguido do β -cariofileno, com 10,0%. Em Caraguatatuba, a proporção desses dois constituintes foi inversa, sendo de 19,1% para β -cariofileno e 8,6% de espatulenol. Já os outros componentes majoritários δ -cadineno (com 6,1% no PEIC e 5,1 em Caraguatatuba) e óxido de cariofileno (5,4 e 8,0%, respectivamente) e biciclogermacreno (7,7 e 1,8%, respectivamente) não variaram significativamente. A estrutura química destes majoritários é apresentada na Figura 8. A composição observada na Ilha do Cardoso é mais semelhante ao resultado obtido previamente por APEL *et al.* (2204), onde o espatulenol foi o constituinte majoritário (12,1%), seguido pelo β -cariofileno (9,2%).

Figura 7. Porcentagem dos componentes majoritários dos óleos voláteis de folhas secas de *Eugenia cuprea* (O. Berg) Nied. coletadas no Parque Estadual da Ilha do Cardoso (barras de cor preta) e no Parque Estadual da Serra do Mar, Núcleo de Caraguatatuba (barras de cor cinza). O asterisco indica valores significativamente diferentes pelo teste t ($p \leq 0,05$), $n=9$.

Embora apresentem compostos majoritários com padrão de oxidação distintos, a proporção entre hidrocarbonetos sesquiterpênicos e oxigenados foi semelhante nos óleos de plantas de *E. cuprea* coletadas no PEIC e em Caraguatatuba, não apresentando diferenças significativas. Os valores de hidrocarbonetos sesquiterpênicos foram de 48,4% na Ilha do Cardoso e 51,1% em Caraguatatuba, enquanto os de sesquiterpenos oxigenados foram de 50,8 e 45,9%, respectivamente. Isso se deve ao fato de que, embora o β-cariofileno seja o composto majoritário nos espécimes de Caraguatatuba, as rotas oxidativas de sesquiterpenos estão bastante ativa nestas plantas, o que pode ser observado pelos teores de óxido de cariofileno, α-cadinol e cis-cadin-4-en-7-ol. No entanto, essas plantas empregam rotas biossintéticas divergentes para a produção destes compostos. Nas plantas de Caraguatatuba, predomina a rota biossintética derivada do cátion *E,E*-farnesila, que origina

o cátion humulila e, posteriormente, o cariofilila, precursor do β -cariofileno e subsequente do óxido de cariofileno (Figura 6). Nos espécimes do PEIC, por outro lado, predomina a rota oriunda do *E,Z*-farnesila, que sofre rearranjo para formar o cátion carotila, precursor do espatulenol.

Cabe, ainda, ressaltar que tanto em *C. lucida* como em *E. cuprea* ambas as rotas biossintéticas, as derivadas do cátion *E,E*-farnesila e do *E,Z*-farnesila, estavam atuando nas duas áreas de coleta, havendo apenas diferenças no controle da expressão para cada uma delas.

Figura 8. Estrutura química dos componentes majoritários do óleo volátil de folhas secas de *Eugenia cuprea* (O. Berg) Nied. coletadas no Parque Estadual da Ilha do Cardoso e no Parque Estadual da Serra do Mar, Núcleo de Caraguatatuba.

Alguns autores sugerem que diferenças geográficas na composição química dos óleos voláteis possam estar relacionadas a fatores nutricionais do solo (BARNOLA & CEDEÑO, 2000). A existência de herbívoros específicos de uma localidade também poderia promover

tais alterações metabólicas, afetando qualitativamente o óleo essencial (NICHOLS-ORIAN, 1991; WAGNER & EVANS, 1985). Entretanto, mais do que afetar qualitativamente a composição do óleo, estes fatores tendem a alterar dramaticamente o rendimento do óleo (SCHOONHOVEN *et al.*, 2005). Diferenças quantitativas não foram observadas em nenhuma das espécies estudadas neste trabalho.

Embora compartilhem algumas características climáticas, como altos índices pluviométricos ao longo de todo ano e temperaturas elevadas (GOMES *et al.*, 2008; MELO & MANTOVANI, 1994), os dois fragmentos de Mata Atlântica considerados para o presente estudo resultam de formações geomorfológicas distintas e pertencem compartimentos diferentes do litoral paulista (SUGUIO & TESSLER, 1992). A Ilha do Cardoso ocupa a porção meridional da planície costeira de Cananéia/Iguape, delimitada (a nordeste e sudoeste) pelo embasamento cristalino. Já Caraguatatuba pertence à área costeira norte-nordeste do estado, caracterizando-se pela presença de relevos escarpados da Serra do Mar, compostos por rochas metamórficas pré-cambrianas com intrusões de granito e diques de diabásico (FARINACCIO & TESSLER, 2006). Durante as coletas, foi possível observar diferenças no gradiente de vegetação entre as duas áreas. No PEIC, a transição entre as formações pioneiras (mangue e restinga) e a Floresta Pluvial não é bem definida e o solo conseqüentemente é mais arenoso. Já em Caraguatatuba, as coletas foram realizadas em uma área bem definida de Floresta Ombrófila Densa, com solos mais argilosos. Dessa forma, seria esperado que os espécimes das três espécies analisadas coletados nas duas localidades apresentassem diferenças quanto à composição química do óleo.

Porém, em relação às variações geográficas da composição do óleo, as três espécies apresentaram comportamento diferente. Para *C. campomanesia* nenhum padrão geográfico pôde ser identificado. Para *E. cuprea*, não houve variações significativas na proporção das classes de compostos, mas estas foram observadas para os majoritários β -cariofileno e espatulenol. Finalmente, para *C. lucida*, as diferenças significativas observadas principalmente para os majoritários β -cariofileno e espatulenol refletiu-se de forma também significativa na proporção entre sesquiterpenos na forma de hidrocarbonetos ou na forma oxigenada. É interessante destacar, entretanto, que a proporção entre os majoritários de *C. lucida* e *E. cuprea*, β -cariofileno e espatulenol, foi inversa entre as localidades. Para *C. lucida*, o espatulenol foi mais elevado em Caragutatuba, enquanto que para *E. cuprea* os teores mais elevados desse sesquiterpeno oxigenado foram maiores na Ilha do Cardoso, ocorrendo

o inverso com o β -cariofileno. Isto sugere uma inversão na rota biossintética de sesquiterpenos predominante em cada um dos locais para essas duas espécies. Para *E. cuprea*, predominam as rotas derivadas do cátion *E,Z*-farnesila no PEIC e aquelas derivadas do cátion *E,E*-farnesila em Caraguatatuba, ocorrendo o oposto para *C. lucida*.

A biossíntese da ampla gama de estruturas de sesquiterpenos ainda não foi elucidada. É comum que algumas sesquiterpeno ciclases possam originar diferentes estruturas. Imprecisões no fechamento do anel são provavelmente responsáveis pela multiplicidade de estruturas encontradas nessa classe de metabólitos (WANG *et al.*, 2008; van DER HOEVEN *et al.*, 2000). Já a síntese do α - e β -farneseno, que são precursores dos cátions *E,E*-farnesila e *E,Z*-farnesila, respectivamente, envolve preniltransferases específicas (DEGUERRY *et al.*, 2006). O controle da interconversão destas duas formas também ainda não foi elucidado. No entanto, resultados obtidos com espécies como *Lycopersicon esculentum* e *L. hisutum* sugerem que genes diferentes estão envolvidos na síntese de classes diferentes de sesquiterpenos (WANG *et al.*, 2008).

No presente trabalho, as diferenças de variabilidade entre *E. cuprea* e *C. lucida*, aliadas à ausência de padrão de variabilidade em *C. guaviroba* e às similaridades entre os fatores climáticos e edáficos das áreas de estudo, sugerem que as variações observadas possam ser oriundas do componente genético. De fato, na maior parte dos estudos de variabilidade geográfica dos óleos voláteis de Myrtaceae, as diferenças são atribuídas não ao ambiente, mas a uma divergência genética, como observado para os gêneros australianos *Angophora* Cav. (LEACH & WHIFFIN, 1989), *Eucalyptus* L'Hér. (SIMMONS & PARSONS, 1987) e *Chamelaucium* Desf. (EGERTON-WARBURTON *et al.*, 1998).

Nos poucos exemplos com Myrtaceae brasileiras, o componente genético também parece ser preponderante, uma vez que diferenças qualitativas foram observadas em indivíduos de uma mesma espécie coletados num mesmo habitat (FISCHER *et al.*, 2005; LIMBERGER *et al.*, 2005), ou, de forma oposta, não foram observadas diferenças quando uma determinada espécie é cultivada em ambientes distintos, como é o caso de *Myrciaria floribunda*, que, conforme apresentado no Capítulo 3, apresenta composição química do óleo bastante conservada, mesmo em espécimes ocorrentes na Mata Atlântica da região sul do país, ou no cerrado, tendo xantoxilina como majoritário em todos os casos (APEL, 2004). A estabilidade na composição química reflete a baixa diversidade genética encontrada para esta espécie por FRANCESCHINELLI *et al.* (2007).

A diversidade populacional de espécies de Myrtaceae que ocorrem em ecossistemas brasileiros é ainda pouco conhecida. Um estudo com *Eugenia uniflora* O. Berg demonstrou a existência de três populações geneticamente distintas entre as regiões nordeste e sul do país (MARGIS *et al.*, 2002). A análise da variação genética de *Eugenia dysenterica* DC. também mostrou grande diversidade nesta espécie de cerrado (TELLES *et al.*, 2003).

Os resultados obtidos no presente trabalho sugerem que a análise da composição do óleo volátil de espécies de Myrtaceae pode ser uma ferramenta importante nos estudos de diversidade genética da família, ajudando a fornecer subsídios para a definição de estratégias na escolha de áreas prioritárias nos programas de conservação da biodiversidade.

4. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

APEL, M.A.; LIMA, M.E.; SOUZA, A.; CORDEIRO, I.; YOUNG, M.C.M.; SOBRAL, M.E.G.; SUFFREDINI, I.B.; MORENO, P.R.H.M. Screening of the biological activity from essential oils of native species from the Atlantic Rain Forest (São Paulo - Brazil), *Pharmacolgy on line*, v.3, p.376-383, 2006.

APEL, M.A.; SOBRAL, M.E.G.; SCHAPOVAL, E.E.S.; HENRIQUES, A.T.; MENUT, C.; BESSIERE, J.M. Essential oils from *Eugenia* species-Part VII: sections Phyllocalyx and Stenocalyx. *Journal of Essential Oil Research*, v.16, n. 2, p.135-138, 2004.

BARNOLA, L.F.; CEDEÑO, A. Inter-population differences in the essential oils of *Pinus caribea* needles. *Biochemical Systematics and Ecology*, v.28, p.923-931, 2000.

BARNOLA, L.F.; HASEGAWA, M.; CEDEÑO, A. Intraindividual variations of volatile terpene contents in *Pinus caribea* needles and its possible relationship with *Alta laevigata* herbivory. *Biochemical Systematics and Ecology*, v.25, p.707-715, 1997.

BARROS, F.; FIUZA DE MELO, M.M.; CHIEA, S.A.C.; KIRIZAWA, M.; WANDERLEY, M.G.L. & JUNG-MENDAÇOLLI, S.L. Caracterização geral da vegetação e listagem das espécies ocorrentes. *Flora Fanerogâmica da Ilha do Cardoso*, v.1, p.1-184, 1991.

DEWICK, P.M. *Medicinal natural products: a biosynthetic approach*. Chichester, New York: Wiley, 1997. p.152-194.

EGERTON-WARBURTON, L.M.; GHISALBERTI, E.L.; CONSIDINE, J.A.; Infraespecific variability in the volatile leaf oils of *Chamelaucium uncinatum* (Myrtaceae). *Biochemical Systematics and Ecology*, v.26, p.973-888, 1988.

FARINACCIO, A.; TESSLER, M.G. Dinâmica de sedimentação atual na ponta do Camaroeiro, Porção norte da enseada de Caraguatatuba, SP. *Geociências*, 25, 3, 331-344, 2006.

FRANCESCHINELLI, E.V.; VASCONCELOS, G.M.P.; LANDAU, E.C.; ONO, K.Y.; SANTOS, F.A.M. The genetic diversity of *Myrciaria floribunda* (Myrtaceae) in Atlantic Forest fragments of different sizes. *Journal of Tropical Ecology*, v.23, p.361–367, 2007.

GOMES, F.H.; VIDAL-TORRADO, P.; MACÍAS, F.; GHERARDI, B.; PEREZ, X.L.O. Solos sob vegetação de restinga na Ilha do CARDOSO (SP). I - Caracterização e classificação. *Revista Brasileira de Ciência do Solo*, v.31, p.1563-1580, 2007.

GOTSIUO, P.; NAXAKIS, G.; SKOULA, M. Diversity in the composition of monoterpenoids of *Origanum microphyllum* (Labiatae). *Biochemical Systematics and Ecology*, v.30, p.865-879, 2002.

FISCHER, D.C.H.; LIMBERGER, R.P.; HENRIQUES, A.T.; MORENO, P.R.H. Essential oils from leaves of two *Eugenia brasiliensis* specimens from southeastern Brazil. *Journal of Essential Oil Research*, v.17, n.5, 499-500, 2005.

HILLIG, K.W. A chemotaxonomic analysis of terpenoid variation in *Cannabis*. *Biochemical Systematics and Ecology*, v.32, p.875-891, 2004.

KAROUSOU, R., LANARAS, T., KOKKINI, S. Piperitone oxide-rich essential oils from *Mentha longifolia* subsp. *petiolata* and *M. × villosa-nervata* grown wild on the island of Crete (S. Greece). *Journal of Essential Oil Research* V.10, p.375–379, 1998.

LEACH, G.L.; WHIFFIN, T. Ontogenetic, seasonal and diurnal variation in leaf volatile oils and leaf phenolics of *Angophora costata*. *Australian Journal of Systematic Botany*, v.2, p.99-111, 1989.

LEE, L.S.; BROOKS, L.O.; HOMER, L.E.; ROSETTO, M.; HENRY, R.J. & BAVERSTOCK, P.R. Geographic variation in the essential oils and morphology of natural populations of *Melaleuca alternifolia* (Myrtaceae). *Biochemical Systematics and Ecology*, v.30, p.343-360, 2002.

LIMA, M.E.L.; CORDEIRO, I.; YOUNG, M.C.M.; SOBRAL, M.E.G., MORENO, P.R.H. Antimicrobial activity of the essential oil from two specimens of *Pimenta pseudocaryophyllus* (Gomes) L. R. Landrum (Myrtaceae) native from São Paulo State- Brazil, *Pharmacologyonline*, v.3, p.589-593, 2006.

LIMBERGER, R.P.; SIMÕES-PIRES, C.A.; SOBRAL, M.E.G.; MENUT, C.; BESSIERE, J.M.; HENRIQUES, A.T. Essential oils from *Calyptanthus concinna*, *C. lucida* and *C. rubella* (Myrtaceae). *Brazilian Journal of Pharmaceutical Sciences*, v.38, n.3, 2002.

LIMBERGER, R.P.; SIMÕES-PIRES, C.; SOBRAL, M.E.G.; MENU, C.; BESSIERE, J.M.; HENRIQUES, A.T. Essential oils from some *Myrceugenia* species (Myrtaceae). *Flavor and Fragrance Journal*, v.17, n.5, 341-344, 2002.

LIMBERGER, R.P.; SOBRAL, M.E.G.; HENRIQUES, A.T. Intraspecific volatile oil variation in *Myrceugenia cucullata* (Myrtaceae). *Biochemical Systematics and Ecology*, v.33, p.287–293, 2005.

MARGIS, R.; FELIX, D.; CALDAS, J.F.; SALGUEIRO, F.; ARAÚJO, D.S.D.; BREYNE, P.; VAN MONTAGU, M.; OLIVEIRA, D.; MARGIS-PINHEIRO, M. Genetic differentiation among three

neighboring Brazil-cherry (*Eugenia uniflora* L.) populations within the Brazilian Atlantic rain forest. *Biodiversity and Conservation*, v.11, p.149-163, 2002.

MELO, M.R.F.; MANTOVANI, W. Composição florística e estrutura fitossociológica da mata atlântica de encosta na Ilha do Cardoso (Cananéia, SP. Brasil). *Boletim do Instituto de Botânica*, v.9:107-158, 1994.

MERLE, H.; MORÓN, M.; BLÁZQUEZ, M. A.; BOIRA, H. Taxonomical contribution of essential Oil in mandarins cultivars. *Biochemical Systematics and Ecology*, v.32, p. 491-497, 2004.

MUZIKA, R.M.; PREGITZER, K.S.; HANOVER, J.W. Changes in terpene production following nitrogen fertilization of grand fir (*Abies grandis* (Dougl.) Lindl.) seedlings. *Oecologia*, v.80, p.485-489, 1989,

NICHOLS-ORIAN, C.M. Environmentally induced differences in plant traits: consequences for susceptibility to a leaf-cutter ant. *Ecology*, v.72, p.1609-1623, 1991.

RIBEIRO, J.P.N.; URBANETZ, C.; LIMA, M.I.S. Influência do spray marinho e das características da água do estuário do Rio Massaguaçu (Caraguatatuba, SP) sobre a vegetação adjacente Anais do VIII Congresso de Ecologia do Brasil, 23 a 28 de Setembro de 2007, Caxambu.

RUSSEL, M.F.; SOUTHWELL, I.A. Monoterpenoid accumulation in 1,8-cineole, terpinolene and terpinen-4-ol chemotypes of *Melaleuca alternifolia* seedlings. *Phytochemistry*, v.62, p.683-689, 2003.

SALGUEIRO, L.R., VILA, R., TOMI, F., TOMAS, X., CANIGUER, S., CASANOVA, J., DA CUNHA, A.P., ADZET, T. Chemical polymorphism of the essential oil of *Thymus carnosus* from Portugal. *Phytochemistry*, v.38, p.391–396, 1995.

SCHIMIDT, A., BISCHOF-DEICHNIK, C.; STAHL-BISKUP, E.; Essential oil polymorphism of *Thymus praecox* subsp. *arcticus* on the British Isles. *Biochemical Systematics and Ecology*, v.32, p409-421, 2004.

SCHOONHOVEN, L.M.; van LOON, J.J.A.; DICKE, M. *Insect-plant biology*. Oxford: University Press. 2005. 421p.

SCHULZ, H.; BARANSKA, M., BELZ, H.H.; RÖSCH, P.; STREHLE, M. A., POPP, J. Chemotaxonomica characterization of essential oil plants by vibrational spectroscopy measurements. *Vibrational Spectroscopy*, v.35, p.81-86, 2004.

SESTINI, M.F.; FLORENZANO, T.G. Caracterização de Cicatrizes de Deslizamentos por Processamento de Dados TM Landsat em Caraguatatuba - SP. *Geologia USP Série Científica*, v.4, n.2, p.57-69, 2004.

SIMMONS, D.; PARSONS, R.F. Seasonal variation in the volatile leaf oils of two *Eucalyptus* species. *Biochemical Systematics and Ecology*, v.15, n.2, p.209-215.

SKOULA, M., ABBES, J.E., JOHNSON, C.B. Genetic variation of volatiles and rosmarinic acid in populations of *Salvia fruticosa* Mill. growing in Crete. *Biochemical Systematics and Ecology*, v.28, p.551–561, 2000.

SKOULA, M., ABIDI, C., KOKKALOU, E. Essential oil variation of *Lavandula stoechas* L. ssp. *stoechas* growing wild in Crete (Greece). *Biochemical Systematics and Ecology*, v.24, p.255–260, 1996.

SUGUIO, K.; TESSLER, M.G. Depósitos quaternários da planície costeira de Cananéia-Iguape (SP). *Publicação Especial Instituto Oceanográfico*, n.9, p.1-33, 1992.

TELLES, M.P.C.; COELHO, A.S.G.; CHAVES, L.J.; DINIZ-FILHO, J.A.F.; D'AYALA VALVA, F. Genetic diversity and population structure of *Eugenia dysenterica* DC. (cagaiteira - Myrtaceae) in Central Brazil: spatial analysis and implications for conservation and management. *Conservation Genetics*, v.4, p.685-695, 2003.

WANG, G.; TIAN, L.; AZIZ, N.; BROUN, P.; DAI, X.; HE, J. KING, A.; ZHAO, P.X.; DIXON, R.A. Terpene biosynthesis in glandular trichomes oh Hop. *Plant Physiology*, v.148, p.1254-1266, 2008.

VAN DEER HOEVEN, R.S.; MONFORTE, A.J.; BREEDEN, D.; TANKSLEY, S.D.; STEFFENS, J. Genetic control and evolution of sesquiterpene biosynthesis in *Lycopersicon esculentum* and *L. hirsutum*. *The Plant Cell*, v.12, p.2283-2294, 2000.

YANI, A.; PAULY, G.; FAYE, M.; SALIN. F.; GLEIZES, M. The effect of long-term water stress on the metabolism and emission of terpenes of the foliage of *Cupressus semepervirens*. *Plant Cell and Environment*, v.16, p.975-981, 1983.

CAPÍTULO 5

Atividades Biológicas de Óleos Voláteis de Espécies de Myrtaceae Nativas da Mata Atlântica

ABSTRACT

Several pharmacological properties are attributed to volatile oils, such as anti-inflammatory, analgesic, antimicrobial, antifungal, anti-cholinesterase activities. However, the pharmacological potential of many native Myrtaceae species is yet to be investigated. Thus, the aim of this work was to analyze the antimicrobial activity of oils from seven species against *Candida albicans*, *Aspergillus niger*, *Cladosporium cladosporioides*, *C. sphaerospermum*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa* and *Staphylococcus aureus*, as well as to evaluate their anti-cholinesterase activity. *S. aureus* growth was strongly inhibited by the volatile oil of a *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. specimen, as well as by *Calypttranthes lucida* Mart. Ex. DC. and *Myrcia splendens* (Sw.) DC. oils, whilst *E. coli* was more strongly inhibited by *Myrcia macrocarpa* DC. oil. All tested oils were active against *C. albicans*, especially those from *M. macrocarpa*, *M. splendens*, *C. lucida* and *Eugenia cuprea* (O. Berg.) Nied. The three oils tested against *C. cladosporioides* and *C. sphaerospermum* (*C. guaviroba*, *M. splendens* and *M. macrocarpa*) presented strong activity, but none of the tested oils against *A. niger* (*C. guaviroba*, *C. lucida* e *C. cuprea*) showed such an activity. The most potent inhibition of acetyl-cholinesterase was observed for *Eugenia riedeliana* O. Berg. and *Marlierea racemosa* (Vell.) Kiaersk, however IC₅₀ values were relatively high (67.3 e 65.2 µg.mL⁻¹, respectively). The obtained results indicate that analyzed oils do not exhibit a great potential as anti-cholinesterasic substances, but present a potential for their use as antimicrobials by food, cosmetic and pharmaceutical industries.

RESUMO

Diversas propriedades farmacológicas são atribuídas a óleos voláteis, como atividades antiinflamatória, analgésica, antimicrobiana e antifúngica, além de anticolinesterásica. No entanto, o potencial farmacológico dos óleos essenciais de muitas espécies Myrtaceae nativas da Mata Atlântica ainda não foi verificado. Assim, o objetivo deste trabalho foi avaliar a atividade antimicrobiana de sete destas espécies frente a *Candida albicans*, *Aspergillus niger*, *Cladosporium cladosporioides*, *C. sphaerospermum*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa* e *Staphylococcus aureus*, bem como avaliar sua atividade inibidora de acetilcolinesterase. O crescimento de *S. aureus* foi fortemente inibido pelo óleo volátil de um espécime de *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk., bem como *Calypttranthes lucida* Mart. Ex. DC. e *Myrcia splendens* (Sw.) DC., enquanto *E. coli* foi mais fortemente inibida pelo óleo de *Myrcia macrocarpa* DC. Todos os óleos testados foram ativos contra *C. albicans*, destacando-se os de *M. macrocarpa*, *M. splendens*, *C. lucida* e *Eugenia cuprea* (O. Berg.) Nied. Os três óleos testados contra *C. cladosporioides*, *C. sphaerospermum* (*C. guaviroba*, *M. splendens* e *M. macrocarpa*) foram fortemente ativos, mas nenhum dos óleos testados contra *A. niger* (*C. guaviroba*, *C. lucida* e *C. cuprea*) apresentaram atividade. As atividades anticolinesterásicas mais potentes foram a do óleo volátil de *Eugenia riedeliana* O. Berg. e de um espécime de *Marlierea racemosa* (Vell.) Kiaersk, porém com valores de IC_{50} muito elevados (67,3 e 65,2 $\mu\text{g.mL}^{-1}$, respectivamente). Assim, os resultados indicam que os óleos voláteis analisados não demonstram grande potencial como anticolinesterásicos, mas possuem potencial para a utilização como antimicrobianos pela indústria alimentícia, em preparações farmacológicas e cosméticas.

1. INTRODUÇÃO

A utilização de plantas aromáticas na medicina popular é bastante difundida, em especial no tratamento de infecções microbianas, inflamações, dores e eczemas. As propriedades anti-sépticas dos óleos voláteis são as mais reconhecidas, sendo inclusive mencionadas na Bíblia. Os egípcios antigos utilizavam óleos essenciais durante o processo de mumificação, como forma de prevenir o crescimento de bactérias (APEL *et al.*, 2007).

Compostos voláteis fenólicos como timol, carvacrol e eugenol apresentam conhecida atividade contra um amplo espectro de bactérias e, por este motivo, são largamente utilizados pela indústria, como, por exemplo, na produção de cremes dentais e enxagüantes bucais (EDRIS *et al.*, 2007; CHAIEB *et al.*, 2007; DUSAN *et al.*, 2006). Ainda, a ação antimicrobiana de vários monoterpenos como α - e β -pineno e 3-careno é bem estabelecida (LUDLEY, 2008; PAYNE *et al.*, 2001). Estudos demonstram que estas substâncias são ligeiramente mais ativas contra microrganismos gram-positivos do que contra gram-negativos (BURT, 2004).

A atividade antifúngica também já foi reportada para óleos voláteis de diversas espécies vegetais, tanto contra fungos filamentosos (ZOLLO *et al.*, 2008; GRAYER & HARBONE, 1994; GORDON, 1996), quanto leveduras, como *Candida albicans* (PAULI *et al.*, 2005). Nos últimos anos, a busca de compostos antifúngicos tem sido intensificada, visando à identificação de novos fármacos que possam ser empregados no tratamento da AIDS e suas complicações (SILVA, 2007). Existe, ainda, uma crescente necessidade de se encontrar alternativas aos fungicidas sintéticos aplicados atualmente na agricultura, devido à sua grande toxicidade e ao surgimento de cepas resistentes. Neste aspecto, óleos voláteis podem ser alternativas potenciais aos agentes tradicionais de controle de fungos fitopatogênicos, uma vez que não apenas estes compostos já são utilizados como agentes flavorizantes em alimentos e bebidas, mas também constituem uma rica fonte de substâncias bioativas (LEE *et al.*, 2008).

Além das atividades antimicrobiana e antifúngica, diversas outras ações farmacológicas já foram atribuídas a óleos voláteis através de estudos científicos, dentre as quais efeitos analgésico, antimalárico, anticarcinogênico, antiinflamatório, anticonvulsivo, antioxidante e gastro-protetor (LAHLOU, 2004; EDRIS, 2007). Devido à complexidade da composição química de um óleo volátil, muitas vezes torna-se difícil

relacionar a atividade farmacológica com as substâncias presentes. Em geral, a ação atribuída a um composto isolado pode não ser exata, devido a possíveis interações (sinergismo ou antagonismo) que podem ocorrer entre os componentes do óleo (ULTEE *et al.*, 2000).

Óleos voláteis vêm sendo investigados quanto à sua atividade inibidora de acetilcolinesterase (AChE) (BARBOSA-FILHO *et al.*, 2006). O óleo de *Salvia lavandulifolia* Vahl, por exemplo, inibiu a atividade desta enzima tanto *in vitro* quanto *in vivo* (PERRY *et al.*, 2000; 2006). Adicionalmente, alguns monoterpenos bicíclicos isolados, em especial α -pineno e (+)-3-careno também apresentaram efeito inibidor (MIYAZAWA & YAMAFUJI, 2005), bem como alguns sesquiterpenos, tais como α - e β - ionona e nootkatona (MIYAZAWA *et al.*, 1998a; 2000). A aplicação de inibidores de AChE é atualmente a única terapia aprovada para a melhora da função colinérgica central em portadores do mal de Alzheimer, a fim de compensar sua deficiência nas funções do sistema nervoso central. Essa é uma doença degenerativa, progressiva, que leva a diminuição da memória, dificuldade de raciocínio e alterações comportamentais e vem afetando um número cada vez maior de pessoas. Por esta razão, a busca de produtos naturais com atividade inibitória de AChE vem se tornando uma questão de grande importância (ROLLINGER *et al.*, 2005).

Diversas espécies de Myrtaceae já foram estudadas quanto à atividade biológica de seus óleos voláteis, em especial pertencentes aos gêneros de *Eucalyptus* L'Hér. e *Eugenia* Mich. ex L., cujas atividades antiinflamatórias, analgésica, antifúngica e antimicrobiana foram comprovadas (PATTNAIK *et al.*, 1996; LIMBERGER *et al.*, 1998; COSTA *et al.*, 2000.; SILVA *et al.*, 2003). O óleo de *Syzigium aromaticum* (L.) Merr. & Perry, rico em eugenol, é amplamente utilizado tanto pela medicina tradicional quanto em odontologia, como antimicrobiano e anestésico (CHAIÉB *et al.*, 2007). O óleo de espécies de *Melaleuca* L. também apresentou atividade antimicrobiana e antifúngica (LEE *et al.*, 2008; COX *et al.*, 2000).

A grande diversidade de Myrtaceae na Floresta Atlântica faz com este bioma seja, portanto, uma fonte importante para a busca de compostos voláteis bioativos. No entanto, ainda existe pouca informação disponível à cerca do potencial farmacológico das espécies brasileiras de Myrtaceae, mesmo de espécies cuja composição química do óleo já foi estudada. Adicionalmente, a o potencial anticolinesterásico dos óleos voláteis dessas espécies ainda não foi verificado.

Diante disso, o objetivo deste estudo foi verificar as atividades antifúngica, antimicrobiana e inibidora de acetilcolinesterase em óleos voláteis de espécies de Myrtaceae que ocorrem com relativa frequência em fragmentos de Mata Atlântica. Foram selecionadas, para este estudo, espécies utilizadas nos estudos de variabilidade apresentados nos capítulos anteriores *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk, *Myrcia macrocarpa* DC., *Myrcia splendens* (Sw.) DC., *Calypttranthes lucida* Mart. Ex. DC. e *Eugenia cuprea* (O. Berg.) Nied., além de *Marlierea racemosa* (Vell.) Kiaersk, *Eugenia riedeliana* O. Berg. e *Myrceugenia myrcioides* (Cambess.) O. Berg. Destas espécies, apenas *M. myrcioides* já foi analisada quanto à composição do óleo volátil (LIMBERGER *et al.*, 2002), mas a atividade biológica de seus óleos não foi investigada.

2. MATERIAL E MÉTODOS

2.1. Atividade antifúngica por bioautografia em placas de gel de sílica

Os ensaios de atividade antifúngica por bioautografia em placas de sílica gel foram realizados no Instituto de Botânica de São Paulo – Seção de Fisiologia e Bioquímica de Plantas.

Cepas dos fungos *Cladosporium sphaerospermum* e *C. cladosporioides* obtidos da micoteca do Instituto de Botânica da São Paulo foram incubados em meio de cultura BDA (Batata, Dextrose, Agar – Difco) a 22 °C por 14 dias. Após esse período foi feita a extração dos esporos com solução de sais e glicose (6:1). A suspensão foi filtrada e armazenada a 18 °C para posterior nebulização nas cromatofolhas.

Amostras dos óleos (200µg) e o controle positivo Nistatina (1 µg), foram aplicados em cromatofolhas de alumínio de gel de sílica GF254 Merck e eluídas em hexano:acetona (9:1, V:V). Após a evaporação do eluente, as placas foram nebulizadas com a suspensão contendo esporos dos fungos ($> 2 \times 10^6$ esporos.mL⁻¹) e solução de glicose e sais (6:1) e incubadas em câmara úmida a 27°C, no escuro, por 48 horas (HOMANS & FUCHS, 1970; RAHALISON *et al.*, 1994). Após incubação, as zonas de inibição de crescimento dos fungos correspondem às áreas claras apresentadas nas placas.

2.2. Atividade antimicrobiana por diluição em microplaca

Os ensaios de atividade antibacteriana e antifúngica por diluição em microplaca foram realizados no laboratório de Controle Microbiológico da Faculdade de Ciências Farmacêuticas da Universidade de São Paulo.

Amostras de óleos voláteis (50 μ L) foram diluídas em 150 de DMSO(Dimetilsufóxido)/Metanol (1:1) de modo que a proporção final no ensaio fosse de 3,125 μ L de óleo mL⁻¹.

Para cada ensaio, os microrganismos *Candida albicans* (ATCC 10231) e *Aspergillus niger* (ATCC 16404), foram incubados em tubos inclinados contendo o meio Sabouraud Dextrose Agar (SDA, Difco) a 25°C por 24 h. Ao final deste período, os microrganismos foram ressuspendidos com solução salina (0,85 %) e submetidos a padronização através de diluição seriada, onde as diluições 10⁴, 10⁵ e 10⁶ foram plaqueadas em duplicata, utilizando meio SDA, em seguida incubadas em estufa bacteriológica por 48h na temperatura de 25°C (TORTORA *et al.*, 2004). As soluções microbianas padronizadas posteriormente foram diluídas com solução salina e inoculadas no meio de cultura líquido SDB (Caldo Dextrose Sabouraud). Já os microrganismos *Escherichia coli* (ATCC 8739), *Pseudomonas aeruginosa* (ATCC 9027) e *Staphylococcus aureus* (ATCC 8538), foram incubados em tubos inclinados contendo o meio Agar Triptose Soja (TSA, Difco) a 37°C por 24 h. Ao final deste período, o mesmo procedimento de padronização foi utilizado, porém utilizando meio TSA e incubação por 24h na temperatura de 35°C (TORTORA *et al.* 2000). As soluções microbianas padronizadas posteriormente foram diluídas com solução salina e inoculadas no meio de cultura líquido TSB (Caldo Triptose Soja). Para todos os microrganismos, as diluições foram realizadas de modo que a concentração final dos microrganismos em cada poço da microplaca apresentasse um numero de 200 a 400 UFC em 200 μ L.

A distribuição das substancias nas microplacas, com 96 cavidades, obedeceu a um padrão preestabelecido com a presença de controle do meio (200 μ L de meio SDB sem microrganismos), controle de crescimento (200 μ L de meio SDB ou TSB com microrganismos), controle negativo (190 μ L de meio SDB inoculado com microrganismos acrescido de 10 μ L de DMSO: MeOH – 1:1) e controle positivo (190 μ L de meio SDB ou TSB inoculado com microrganismos acrescentando 10 μ L do antibiótico), em quatro repetições. O antibiótico utilizado foi a Nistatina para *A. niger* e *C. albicans* e Cloranfenicol para *S.*

aureus e *E. coli* e Amicacina para *P. aeruginosa*, na concentração de 1mg.mL^{-1} . Amostras dos óleos voláteis ($10\mu\text{L}$) já diluídas em DMSO:MeOH (1:1) foram adicionadas nas cavidades contendo $190\mu\text{L}$ de meio SDB para os fungos e TSB, para as bactérias. Para se obter um controle do número de colônias por cavidade, $200\mu\text{L}$ do meio inoculado foram plaqueados em duplicata. As placas e microplacas foram incubadas em estufa bacteriológica por 48h na temperatura de 25°C no caso de *A. niger* e *C. albicans* e 24h na temperatura de 35°C para as bactérias. Após o período de incubação, foi feita a contagem do número de colônias nas placas e a leitura das microplacas em leitor (SLT Spectra) a 630nm (SALIE *et al.*, 1996; WILLINGER *et al.*, 2000; DEVIENNE & RADDI, 2002).

2.3. Atividade anticolinesterásica

Os ensaios de atividade anticolinesterásica foram realizados no Instituto de Botânica de São Paulo – Seção de Fisiologia e Bioquímica de Plantas.

Para a realização do ensaio foram preparadas previamente as seguintes soluções: Solução A : Tris/HCL 50mmol.L^{-1} M, pH=8; Solução B: Tris/HCL 50mmol.L^{-1} , pH=8, com 0,1% de albumina bovina fração V; e Solução C: Tris/HCL 50mmol.L^{-1} , pH=8, com $0,1\text{mol.L}^{-1}$ de NaCl e $0,02\text{mol.L}^{-1}$ de $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. Para cada cavidade da placa foram adicionados $25\mu\text{L}$ de iodeto de acetiltiocolina 15mmol.L^{-1} , $125\mu\text{L}$ de 5,5–ditiobis-[2-nitrobenzóico] 3mmol.L^{-1} na solução (C), $50\mu\text{L}$ da solução (B) e $25\mu\text{L}$ da amostra do óleo diluída vezes na solução (A). Os óleos foram testados nas concentrações finais de $4,68$ a $600\mu\text{g.mL}^{-1}$. Após esse preparo, foi medida a absorbância a 405nm em leitor KC4-Biotek a cada 30 segundos por três vezes. Em seguida, foram adicionados $25\mu\text{L}$ da enzima acetilcolinesterase ($0,22\text{U.mL}^{-1}$) e a absorbância medida novamente a cada 10 minutos por duas vezes (ELLMAN *et al.* 1961, RHEE *et al.* 2001). A porcentagem de inibição da acetilcolinesterase foi calculada através da comparação das velocidades de reação (hidrólise do substrato) das amostras em relação ao branco (10% de MeOH na solução A, atividade total AChE=100%).

2.4. Locais de estudo e material vegetal

Foram utilizados os óleos voláteis de *C. guaviroba*, *M. splendens* e *M. macrocapa* obtidos para a realização do estudo sazonal, apresentado no Capítulo 3, referentes às

coletas de março, maio e de agosto a dezembro de 2005 (com exceção de *C. guaviroba*, que não foi coletada no mês de setembro). As demais espécies foram coletadas no Parque Estadual da Serra do Mar, Núcleo de Caraguatatuba (*E. riedeliana*, *C. lucida* e *M. racemosa*) e no Parque Estadual da Ilha do Cardoso (*C. lucida*, *E. cuprea*, *M. myrcioides* e *M. racemosa*). Folhas íntegras e completamente expandidas secas à sombra até peso constante foram utilizadas para a extração. Os números de registro das exsicatas de *C. guaviroba*, *M. splendens*, *M. macrocarpa*, *C. lucida* e *E. cuprea* depositadas no Herbário do Instituto de Botânica de São Paulo são os mesmos descritos no Capítulo 4. Os demais foram os seguintes: Árvore 61 para *E. riedeliana*, Árvore 05 e Cordeiro 2828 para *M. racemosa* (de Caraguatatuba e do PEIC, respectivamente) e Cordeiro 2820 para *M. myrcioides*.

2.5. Extração e análise química dos óleos voláteis

A extração dos óleos voláteis, sua análise química e a identificação dos componentes foram realizadas segundo a metodologia descrita no capítulo 2.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

As propriedades anti-sépticas dos óleos voláteis já foram observadas frente a variados patógenos, incluindo cepas antibiótico-resistentes (CARSON *et al.*, 2006).

A fim de se verificar o potencial anti-fúngico e antibacteriano de óleos voláteis de espécies de Myrtaceae nativas da Mata Atlântica, foram selecionadas algumas espécies apresentadas nos Capítulos anteriores. Foram utilizados óleos voláteis de folhas de *C. guaviroba* coletadas no Parque Estadual da Ilha do Cardoso (*C. guaviroba* 1) e em Caraguatatuba (*C. guaviroba* 2), compostos majoritariamente por sesquiterpenos oxigenados, destacando-se o viridiflorol; de *C. lucida* coletadas no PEIC, com predominância de espatulenol (*C. lucida* 1) e em Caraguatatuba, com predominância de α -cariofileno (*C. lucida* 2); *E. cuprea* coletadas no PEIC, com teores elevados de espatulenol (Capítulo 4). Foram utilizados também óleos obtidos para o estudo de sazonalidade (Capítulo 3), de *M. macrocarpa*, com 23,3% de hidrocarbonetos monoterpênicos, 14,5% de monoterpênicos oxigenados, 14,4% de hidrocarbonetos sesquiterpenênicos e 47,1% de sesquiterpenos

oxigenados, de *M. splendens*, com 45,1% de hidrocarbonetos sesquiterpênicos e 54,0% de sesquiterpenos oxigenados e de *C. guaviroba*, como composição semelhantes à dos espécimes acima citados.

A composição química dos óleos voláteis das demais espécies utilizadas para a avaliação de atividades biológicas é apresentada na Tabela 1. Para *M. myrcioides*, os hidrocarbonetos monoterpênicos foram os principais constituintes (58,3%), destacando-se o α -pineno (23,2%). Em *E. riedeliana* predominaram os sesquiterpenos oxigenados, seguidos dos hidrocarbonetos sesquiterpênicos (42,6%), sendo o valerianol o constituinte majoritário (28,1%). Já para *M. racemosa*, embora o espatulenol tenha sido o composto majoritário nos dois espécimes (25,0% no de Caragatatuba e 31,9% no do PEIC), o óleo obtido do indivíduo de Caragatatuba não apresentou constituintes monoterpênicos em sua composição, enquanto aquele do indivíduo do PEIC apresentou 31,4% de monoterpênicos oxigenados e 9,8% de hidrocarbonetos monoterpênicos.

Tabela 1. Composição química dos óleos voláteis de folhas secas de *Myrceugenia myrcioides* (Cambess.) O. Berg., *Eugenia riedeliana* O. Berg. e dois indivíduos de *Marlierea racemosa* (Vell.) Kiaersk. - Parque Estadual da Ilha do Cardoso; C - Parque Estadual da Serra do Mar, Núcleo Caragatatuba. IK - Índice de Retenção de Kováts. N.I. - Composto não identificado.

Composto	IK	Área (%)			
		<i>M. myrcioides</i>	<i>E. riedeliana</i>	<i>M. racemosa</i> C	<i>M. racemosa</i> P
α -pineno	920	23,2	3,2	-	4,6
canfeno	928	0,3	-	-	-
tuja-2,4(10)-dieno	953	-	-	-	1,0
β -pineno	954	4,2	-	-	-
verbeneno	967	-	-	-	0,5
β -mirceno	971	0,5	-	-	-
α -felandreno	1002	6,9	-	-	-
o-cimeno	1022	4,2	-	-	1,3
limoneno	1024	18,3	-	-	0,6
γ -terpineno	1054	0,4	-	-	-
para-cimeneno	1089	-	-	-	1,3
1,3,8-para-mentatrieno	1108	-	-	-	0,6

Tabela 1. (Continuação)

Composto	IK	Área (%)			
		<i>M. myrcioides</i>	<i>E. riedeliana</i>	<i>M. racemosa</i> C	<i>M. racemosa</i> P
α -canfonelal	1122	-	-	-	2,1
l-terpineol	1130	0,7	-	-	-
trans-sabinol	1137	-	-	-	2,7
cis-verbenol	1141	-	-	-	0,9
trans-verbenol	1144	-	-	-	2,6
α -terpineol	1152	0,5	-	-	-
para-menta-1,5-dien-8-ol	1166	-	-	-	2,4
pinocarvona	1164	-	-	-	1,8
<i>p</i> -menta-1,5-dien-8-ol	1166	-	-	-	6,6
<i>m</i> -cimen-9-ol	1179	-	-	-	1,9
epóxido de α -felandreno	1186	0,4	-	-	-
α -terpineol	1188	-	-	-	1,3
mirtenal	1195	-	-	-	3,8
verbenona	1205	-	-	-	3,2
trans-carveol	1216	-	-	-	1,8
carvona	1243	-	-	-	0,5
acetato de bornila	1287	0,5	-	-	-
2-undecanona	1293	0,3	-	-	-
carvacrol	1298	0,4	-	-	-
δ -elemeno	1335	-	-	2,0	-
α -cubebeno	1345	-	2,3	-	-
1-hidróxi-undecan-3-ona	1350	5,9	-	-	-
β -elemeno	1389	-	-	-	-
(E)-cariofileno	1408	-	10,9	0,7	-
α -humuleno	1452	1,5	1,8	1,3	-
allo-aromadendreno	1458	0,3	0,8	-	-
cis-tujopsadieno	1467	-	-	-	0,6
γ -gurjuneno	1477	-	-	-	0,5
γ -muuroleno	1478	-	-	0,7	-
amorfa-4,7(11)-dieno	1479	-	-	0,7	-
n.i. 1	1482	1,3	-	1,4	1,4
aristolocheno	1487	-	1,5	-	-

Tabela 1. (Continuação)

Composto	IK	Área (%)			
		<i>M. myrcioides</i>	<i>E. riedeliana</i>	<i>M. racemosa</i> C	<i>M. racemosa</i> P
β -selineno	1489	-	5,2	-	-
2-tridecanona	1495	2,5	-	-	-
α -selineno	1498	-	6,1	-	-
biciclogermacreno	1500	-	-	0,6	0,7
α -muuroleno	1500	-	-	0,9	-
n.i. 2	1511	0,7	-	0,6	-
γ -cadineno	1513	-	1,2	-	-
δ -cadineno	1522	-	5,7	2,0	1,1
β -sesquifelandreno	1522	-	1,8	0,6	-
α -calacoreno	1544	-	3,8	2,1	0,8
selina-3,7(11)-dieno	1545	-	1,5	2,9	1,1
n.i. 3	1550	1,5	-	1,1	-
1,5-epóxisalvial-4(14)-eno	1559	-	-	2,0	0,9
n.i. 4	1561	2,2	-	0,8	-
álcool cariofilenílico	1570	-	1,1	-	-
trans-hidrato de sesquisabineno	1577	-	0,9	-	-
espatulenol	1577	6,2	-	25,0	31,9
óxido de cariofileno	1582	2,3	2,6	-	-
thujopsan-2- α -ol	1587	-	-	3,3	1,2
β -copaen-4- α -ol	1590	-	-	1,0	0,6
globulol	1590	-	-	1,4	1,0
viridiflorol	1592	2,3	-	-	-
ledol	1602	0,5	-	-	-
5- <i>epi</i> -7- <i>epi</i> - α -eudesmol	1607	-	0,9	-	-
époxido de humuleno II	1608	-	-	2,8	1,2
β -atlantol	1608	-	-	1,4	0,6
junenol	1619	-	-	1,3	-
10- <i>epi</i> - γ -eudesmol	1622	-	12,6	1,2	1,1
α -colocaleno	1623	-	-	0,8	-
muurola-4,10(14)-dien-1- β -ol	1631	-	-	13,2	0,9
cariofila-4(12),8(13)-dien-5- β -ol	1639	0,3	-	3,3	1,8
<i>epi</i> - α -muurolol	1641	-	-	2,2	0,8

Tabela 1. (Continuação)

Composto	IK	Área (%)			
		<i>M. myrcioides</i>	<i>E. riedeliana</i>	<i>M. racemosa</i> C	<i>M. racemosa</i> P
α -muurolol	1644	-	0,9	1,3	1,0
cubenol	1645	1,0	1,4	-	-
β -eudesmol	1649	-	0,8	1,3	1,1
α -eudesmol	1652	0,2	-	-	-
<i>epi</i> - α -cadinol	1654	-	-	3,1	1,9
valerianol	1656	-	28,1	-	-
selin-11-en-4- α -ol	1658	-	2,3	-	-
cariofila-3,8(13)-dien-5 β -ol	1660	-	-	3,7	0,5
n.i. 5	1661	-	-	0,7	-
valerenol	1665	-	-	1,3	-
14-hidróxi-9- <i>epi</i> -(E)-cariofileno	1669	-	-	5,5	1,3
mustacona	1677	-	-	2,4	1,6
amorfa-4,9-dien-2-ol	1700	-	-	1,9	-
amorfa-4,9-dien-14-al	1704	-	-	1,2	-
2- α -hidróxi-amorfa-4,7(11)-dieno	1776	6,6	-	0,6	-
6,10,14-trimetil-2-pentadecanona	1801	-	0,5	0,8	-
Hidrocarbonetos monoterpênicos		58,3	3,2	-	9,8
Monoterpenos oxigenados		2,4	-	-	31,4
Hidrocarbonetos sesquiterpênicos		5,2	42,6	18,2	6,3
Sesquiterpenos oxigenados		21,7	51,4	81,8	49,1
outros		8,7	0,5	0,8	-
n.i. 1 - m/z: 177, 162, 145, 119, 105, 91, 134, 91, 43, 79, 65, 200					
n.i. 2 - m/z: 123, 133, 149, 164, 93, 107					
n.i. 3 - m/z: 109, 123, 151, 93, 82, 43, 135, 178, 161					
n.i. 4 - m/z: 123, 79, 93, 149, 164, 107, 133, 67, 55					
n.i. 5 - m/z: 109, 123, 91, 159, 43, 79, 69, 175, 186					

A atividade antimicrobiana dos óleos voláteis foi avaliada através do método da microdiluição frente a uma bactéria gram-positiva, duas gram-negativas, uma levedura e um fungo filamentoso. Três dos óleos analisados inibiram fortemente o crescimento da bactéria gram-positiva *S. aureus*: o indivíduo 1 de *C. guaviroba* (94,86%), os dois indivíduos de *C. lucida* (99,22 e 100%) e *M. splendens* (89,80%), sendo que todos os óleos analisados

apresentaram algum efeito de inibição sobre este microrganismo (Tabela 2). De fato, bactérias gram-positivas costumam ser mais susceptíveis à ação de óleos essenciais (DEMO *et al.*, 2005; BURT *et al.*, 2004), uma vez que as gram-negativas possuem uma membrana externa envolvendo a parede celular, que restringe a difusão de compostos hidrofóbicos (VAARA, 1992).

O óleo de *M. macrocarpa*, o mais abundante em monoterpenos (Tabela 1), foi o que inibiu mais fortemente o crescimento da bactéria gram-negativa *E. coli*. Existem estudos que demonstram a ação inibitória desta bactéria por esta classe de compostos, como α -terpineol, carvacrol, geranial e neral (KIM *et al.*, 1995, COSENTINO *et al.*, 1999). É possível que a atividade do óleo de *M. macrocarpa* contra *E. coli* esteja relacionada, portanto, aos monoterpenos presentes em sua constituição.

A bactéria *P. aeruginosa*, também gram-negativa, é tida na literatura como a menos susceptível a óleos voláteis (DEMO *et al.*, 2005; BURT *et al.*, 2004; RUBERTO *et al.*, 2000). No entanto, seu crescimento foi fortemente inibido pelo óleo volátil do indivíduo de *C. lucida* coletado em Caraguatuba e pelo óleo de *M. macrocarpa*.

Tabela 2. Porcentagem de inibição dos óleos voláteis de folhas secas de *C. guaviroba*, *C. lucida*, *E. cuprea*, *M. macrocarpa* e *M. splendens* frente a diferentes microorganismos. (NT = não testado).

Óleos voláteis	Microorganismos				
	<i>S. aureus</i>	<i>E. coli</i>	<i>P. aeruginosa</i>	<i>C. albicans</i>	<i>A. niger</i>
<i>C. guaviroba</i> 1	94,86	-	32,88	61,32	-
<i>C. guaviroba</i> 2	28,04	32,94	7,99	41,11	NT
<i>C. lucida</i> 1	99,22	-	-	38,80	-
<i>C. lucida</i> 2	100,00	-	100,00	83,75	-
<i>E. cuprea</i>	61,79	-	-	73,09	-
<i>M. macrocarpa</i>	61,86	99,82	98,66	100,00	NT
<i>M. splendens</i>	89,80	48,00	10,15	100,00	NT

Todos os óleos analisados apresentaram atividade frente à *C. albicans*, em especial os de *M. macrocarpa* e *M. splendens*, que inibiram em 100% o crescimento desta levedura. A inibição de *C. albicans* por óleos ricos em mono- e sesquiterpenos é esperada, uma vez que vários compostos dessas classes são reconhecidamente inibidores desse microrganismo. Diversos monoterpenos testados demonstraram atividade frente essa levedura, como canfeno, cânfora, carvacrol, neral e geranial, limoneno e terpinoleno (PAULI *et al.*, 2005; SALGUEIRO *et al.*, 2004; TIRILLINI *et al.*, 1996; MORRIS *et al.*, 1979), bem como para sesquiterpenos oxigenados, como elemol e nerolidol, e lactonas sesquiterpênicas tipo germacrolídeo (PAULI *et al.*, 2005; TAN *et al.*, 1999).

Por outro lado, nenhum destes óleos voláteis foi capaz de inibir o crescimento do fungo filamentoso *A. niger*. A inibição desse fungo por óleos voláteis já foi relatada, mas principalmente para óleos ricos em compostos fenólicos como timol e carvacrol, que não foram observados nos óleos das espécies analisadas (PASTER *et al.*, 1995). Em um estudo realizado com citral, citronelal, geraniol e mentol foi comprovado que esses componentes não eram capazes de inibir o crescimento de *A. niger* (MOLEYAR & NARASIMHAM, 2004). Como não havia volume suficiente de óleo volátil de *C. guaviroba*, *M. splendens* e *M. macrocarpa* para o ensaio antifúngico frente a *A. niger*, uma vez que este é feito pelo método de microdiluição, houve o interesse de testar a ação inibitória desses óleos frente a outros fungos filamentosos, *C. cladosporioides* e *C. sphaerospermum*, uma vez que para isso se utiliza a metodologia de bioautografia, que requer um volume mais reduzido de óleo. Dessa forma, a atividade contra estes fungos foi avaliada para os óleos coletados em diferentes meses, a fim de se verificar se as pequenas variações na composição observadas no decorrer de um ano (Capítulo 3) ocasionariam uma mudança na capacidade de inibição do crescimento dos fungos.

Embora sejam espécies de ocorrência bastante comum em fragmentos de Mata Atlântica, não existem estudos investigando as atividades biológicas dos óleos voláteis de *C. guaviroba*, *M. splendens* e *M. macrocarpa*. Nesse trabalho, análise da atividade antifúngica dos óleos dessas espécies frente a *C. cladosporioides* e *C. sphaerospermum* mostrou um potencial antifúngico para as três espécies analisadas. A figura 1 mostra a bioautografia com *Cladosporium cladosporioides* e *C. sphaerospermum* dos óleos voláteis de *C. guaviroba* obtidos em março, maio, julho, agosto, outubro, novembro e dezembro de 2005.

Figura 1. Bioautografia com *Cladosporium cladosporioides* (A) e *C. sphaerospermum* (B) dos óleos voláteis de *Campomanesia guaviroba* obtidos em março, maio, julho, agosto, outubro, novembro e dezembro de 2005. A seta indica substâncias de $R_f = 0,13$.

Os óleos desta espécie inibiram fortemente o crescimento de *C. cladosporioides* (Figura 1A) para todo o período analisado, observando-se uma grande mancha de inibição cobrindo toda a cromatoplaca. Contra *C. sphaerospermum* (Figura 1B), também foi observada forte atividade inibitória. Nos meses de março e maio, foi observada uma maior inibição para um composto de $R_f 0,13$, indicado pela seta. No entanto, ao analisarmos a tabela de composição do óleo de *C. guaviroba* (Capítulo 3), não é possível associar esta inibição a nenhum componente. A composição química do óleo volátil das espécies estudadas é tão complexa, que torna difícil a atribuição das atividades biológicas a determinados constituintes, o que é bastante comum para óleos essenciais.

Figura 2. Bioautografia com *Cladosporium cladosporioides* (A) e *C. sphaerospermum* (B) dos óleos voláteis de *Myrcia splendens* obtidos em março, maio, julho, agosto, setembro, outubro, novembro e dezembro de 2005.

Os óleos voláteis de *M. splendens* também apresentaram forte atividade inibitória contra os fungos utilizados, em especial *C. cladosporioides* (Figura 2A). Não foram observadas variações na atividade entre os meses analisados. Já os óleos de *M. macrocarpa* (Figura 3) apresentaram atividade antifúngica menor do que aquela observada para as outras espécies analisadas, embora esta também tenha sido observada. Para essa espécie, a atividade inibitória também foi a mesma em todos os meses analisados.

Figura 3. Bioautografia com *Cladosporium cladosporioides* (A) e *C. sphaerospermum* (B) dos óleos voláteis de *Myrcia macrocarpa* obtidos em março, maio, julho, agosto, setembro, outubro, novembro e dezembro de 2005.

Existem muitos estudos sobre a atividade antifúngica de monoterpenos, como α - e β -pineno, limoneno, cânfora, 1,8-cineol, mirceno, entre outros (TULLIO *et al.*, 2006). No entanto, no presente trabalho, *M. macrocarpa* foi a que apresentou maior proporção de componentes monoterpênicos nos óleos voláteis, porém a atividade antifúngica foi a menor observada. A inibição do crescimento de fungos por sesquiterpenos isolados não é muito estudada. Em geral, compostos oxigenados, exibindo grupo cetona, álcool e éter parecem apresentar maior atividade frente a fungos filamentosos (DORMAN & DEANS, 2000; INOUE *et al.*, 2001). A atividade antifúngica de óleos voláteis ricos em sesquiterpenos já foi demonstrada por diversos autores, no entanto não é possível relacioná-la a um determinado componente (SILVA *et al.*, 2007; CONSTANTIN *et al.*, 2001; CYSNE *et al.*, 2005; FACH *et al.*, 2002). As três espécies analisadas apresentam teores elevados dessa classe de compostos, e possivelmente as atividades observadas devem-se às interações entre os constituintes.

Assim como a atividade antifúngica, o efeito inibitório de acetilcolinesterase por alguns componentes de óleos voláteis já foi demonstrado (MIYAZAWA *et al.*, 1998a; PERRY

et al., 2000). Recentemente, MIYAZAWA E YAMAFUJI (2005) demonstraram que alguns monoterpenos são potentes inibidores de acetilcolinesterase. Estudando a cinética de inibição, estes autores verificaram que alguns desses compostos, como α - e β -pineno, atuam como inibidores não-competitivos, enquanto outros, como fenchol e fenchona, atuam como inibidores competitivos da enzima.

A ação anticolinesterásica dos óleos voláteis de seis espécies de Myrtaceae é mostrada na Figura 4. A maior atividade foi observada para *E.riedeliana*, cuja inibição da enzima chegou a 88,9% na concentração de 600 $\mu\text{g.mL}^{-1}$ (Figura 5), apresentando IC_{50} de 67,3 $\mu\text{g.mL}^{-1}$. Em seguida, o indivíduo de *M. racemosa* coletado no PEIC inibiu em 75% a atividade da enzima, com IC_{50} de 65,2 $\mu\text{g.mL}^{-1}$. Para os outros óleos analisados, a atividade anticolinesterásica foi baixa, sendo de no máximo 54,9% para o óleo de *M. macrocarpa*, 51,2% para o de *C. guaviroba* e 20,9% para o de *M. splendens*, os três na concentração de 1000 $\mu\text{g.mL}^{-1}$. Já para o indivíduo *M. racemosa* coletado em Caraguatatuba, o óleo volátil inibiu em no máximo 35%, enquanto para *M. myrcioides* a inibição máxima foi de 28,9%, na concentração de 600 $\mu\text{g.mL}^{-1}$.

A atividade anticolinesterásica de óleos voláteis resulta de uma complexa interação entre seus constituintes químicos (SAVELEV *et al.*, 2003). A relação estrutura-atividade para a inibição de AChE já foi estudada para alguns monoterpenos. Entre aqueles que possuem esqueleto do tipo *p*-mentano, a oxigenação da molécula, em especial através da presença de grupo cetona resulta em um aumento na atividade. Por outro lado, em monoterpenos bicíclicos, a presença de grupos funcionais oxigenados tende a diminuir o efeito inibitório (MIYAZAWA *et al.*, 1997; MIYAZAWA & YAMAFUJI, 2005). Os dados obtidos podem sugerir, portanto que a inibição elevada observada para o indivíduo de *M. racemosa* coletado no PEIC e para *M. macrocarpa* sejam resultante do alto teor de monoterpenos, já que na primeira a maioria deles é oxigenada e apresenta o esqueleto *p*-mentano, como carvona, pinocarvona, *p*-mentha-3-en-8-ol, *p*-menta-1,5-dien-8-ol, *m*-cimen-9-ol e α -terpineol, e na outra, além de um alto teor de terpinen-4-ol, foram encontrados níveis elevados dos monoterpenos bicíclicos α - e β -pineno (Capítulo 3, Tabela 3).

Embora α - e β -pineno já tenham sido demonstrados como inibidores de AChE, atividade inibidora do óleo de *M. myrcioides*, que apresenta alta proporção destes constituintes, em especial α -pineno, foi baixa. Este fato pode estar relacionado a um efeito de antagonismo promovido por outros componentes do óleo. Este tipo de interação já foi

observado na inibição de AChE por óleos voláteis de *Melaleuca alternifolia* Chell (MILLS *et al.*, 2004) e espécies de *Mentha* L. (MYAZAWA *et al.* 1998b).

No caso dos sesquiterpenos, embora maior efeito inibitório tenha sido observado para compostos oxigenados, os resultados obtidos neste estudo também sugerem que a interação entre os componentes do óleo pode afetar notadamente a atividade observada, uma vez que os espécimes com maiores proporções dessa classe de constituintes (*E. riedeliana* e indivíduo de *M. racemosa* coletado em Caraguatatuba) apresentaram atividades tão distintas. Os alcoóis sesquiterpênicos viridiflorol e elemol foram considerados por MIYAZAWA *et al.* (1998a) como inibidores potentes de AChE, com valores de IC₅₀ de 25 e 34 µg.mL⁻¹, respectivamente. Porém, ainda não existem estudos sobre o componente majoritário de *E. riedeliana*, valerianol. Já cetonas sesquiterpênicas, cuja atividade anticolinesterásica também já foi demonstrada (MIYAZAWA *et al.*, 2000) praticamente não foram observadas nos óleos destas Myrtaceae. O alto poder de inibição de AChE verificados neste óleo volátil sugerem que este constituinte, assim como outro sesquiterpenos majoritários (como 10-epi-γ-eudesmol e β-cariofileno) devam ser considerados para futuros estudos a fim de se verificar sua atividade anticolinesterásica em sua forma isolada.

Figura 5. Porcentagem de inibição da atividade de acetilcolinesterase por óleos voláteis de folhas secas de *Campomanesia guaviroba*, *Myrceugenia myrcioides*, *Myrcia splendens*, *Eugenia riedeliana*, *Myrcia macrocarpa*, e *Marlierea racemosa*. PEIC - Parque Estadual da Ilha do Cardoso. CA - Parque Estadual da Serra do Mar, Núcleo Caraguatatuba.

Devido à complexidade da composição química dos óleos voláteis, freqüentemente observam-se efeitos de sinergismo ou antagonismo entre os compostos (BURT, 2004). Alguns estudos demonstram que o óleo volátil é mais ativo do que a mistura de seus componentes majoritários, o que sugere que os constituintes minoritários são importantes na potencialização da ação observada (GILL *et al.*, 2002; MOUREY & CANILLAC, 2002). Dessa forma, o estudo das atividades biológicas dos óleos voláteis das espécies aromáticas nativas dos ecossistemas brasileiros é uma ferramenta importantíssima na busca de alternativas aos antimicrobianos utilizados atualmente, devido às inúmeras peculiaridades que podem ser encontradas em termos de composição química.

Neste estudo, quase todos os óleos voláteis avaliados apresentaram pelo menos algum tipo de atividade biológica. Com relação à atividade inibidora de acetilcolinesterase, embora os óleos de *E. riedeliana* e de um espécime de *M. racemosa* tenham apresentado inibição considerada forte, a concentração de óleo utilizada foi muito alta. A galantamina, um dos fármacos mais utilizados como anticolinesterásico, apresenta, *in vitro*, IC₅₀ de 0,3 µg.mL⁻¹. Assim, os valores obtidos neste estudo não demonstram grande potencial dos óleos para esta atividade. Em contrapartida, as inibições verificadas frente aos fungos filamentosos *C. cladosporium* e *C. cladosporioides* sugerem, por exemplo, o potencial dos óleos de *C. guaviroba*, *M. splendens* e *M. macrocarpa* para a utilização com conservantes alimentícios, além de preparações cosméticas e farmacêuticas. O óleo de folhas de *C. lucida* coletadas em Caraguatuba também se mostrou promissor para estudos mais aprofundados de atividade antimicrobiana, já que inibiu fortemente o crescimento de uma bactéria gram-positiva (*S. aureus*), uma gram-negativa (*P. aeruginosa*) e a levedura *C. albicans*. Assim, os resultados obtidos com estas espécies de Myrtaceae reforçam a importância de se aumentar o conhecimento acerca da diversidade química das espécies vegetais da Floresta Atlântica, fornecendo informações que podem ser fundamentais para o estabelecimento de estratégias efetivas de preservação da biodiversidade desse bioma.

4. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BURT, S. Essential oils: their antibacterial properties and potential applications in foods - a review. *International Journal of Food Microbiology* v.94, p.223– 253, 2004.

CARSON, F.; HAMMER, A.; RILEY, V. *Melaleuca alternifolia* (Tea Tree) oil: a review of antimicrobial and other medicinal properties. *Clinical Microbiology Reviews* v.19; p.50-62, 2006.

CHAIEB, K.; HAJLAOUI, H.; ZMANTAR, T.; KAHLA-NAKBI, A.B.; ROUABHIA, M.; MAHDOUANI, K.; BAKHROUF, A. The Chemical Composition and Biological Activity of Clove Essential Oil, *Eugenia caryophyllata* (*Syzigium aromaticum* L. Myrtaceae): A Short Review. *Phytotherapy Research* v.21, p.501–506, 2007.

CONSTANTIN, M.B.; SARTORELLI, P.; LIMBERGER, R.; HENRIQUES, A.T.; STEPPE, M.; FERREIRA, M.J.P.; OHARA, M.T.; EMERENCIANO, V.P.; KATO, M.J. Essential oils from *Piper cernuum* and *Piper regnellii*: antimicrobial activities and analysis by CG/MS and C-NMR. *Planta Medica*, v.63, p.771-773, 2001.

COSENTINO, S.; TUBEROSO, C.I.G.; PISANO, B.; SATTA, M.; MASCIA, V.; ARZEDI, E.; PALMAS, F. In vitro antimicrobial activity and chemical composition of Sardinian *Thymus* essential oils. *Letters in Applied Microbiology* v.29, p.130-135, 1999.

COX, S.D.; MANN, C.M.; MARKHAM, J.L.; BELL, H.C.; GUSTAFSON, J.E.; WARMINGTON, J.R.; WYLLIE, S.G. The mode of antimicrobial action of the essential oil of *Melaleuca alternifolia* (tea tree oil). *Journal of Applied Microbiology*, v.88, p.170–175, 2000.

CYSNE, J.B.; CANUTO, K.M.; PESSOA, O.D.L.; NUNES, E.P.; SILVEIRA, E.R. Leaf essential oils of four *Piper* species from the State of Ceará - Northeast of Brazil. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, v.16, n.6B, p.1378-1381, 2005.

DEMO, M.; OLIVA, M.L.M.; LOPEZ, M.L.; ZUNINO, M.P.; ZYGADLO, J.A. Antimicrobial activity of essential oils obtained from aromatic plants of Argentina. *Pharmaceutical Biology*, v.43, n.2, p.129–134, 2005.

DEVIIENNE, K.F.; RADDI, M.S.G. Screening for antimicrobial activity of natural products using a microplate photometer. *Brazilian Journal of Microbiology*, v.33, p.166-168, 2002.

DORMAN, H.J.D.; DEANS, S.G. Antimicrobial agents from plants: antibacterial activity of plant volatile oils. *Journal of Applied Microbiology*, v.88, p.308–316, 2000.

DUNAN, F.; MARIÁN, S.; KATARÍNA, D.; DOBROSLAVA, B. Essential oils - their antimicrobial activity against *Escherichia coli* and effect on intestinal cell viability. *Toxicology in Vitro* v.20, p.1435–1445, 2006.

EDRIS, A.E. Pharmaceutical and therapeutic potential of essential oils and their individual volatile constituents: a review. *Phytotherapy Research* v.21, p.308-323, 2007.

ELLMAN, G.L., COURTNEY, K.D., ANDRES, V.JR., FEATHERSTONE, R.M. A new and rapid colorimetric determination of acetylcholinesterase activity. *Biochemical Pharmacology*, v.7, p.88-95, 1961.

FACH, A.; GREGEL, B.; SIMIONATTO, E.; DA SILVA, U.F.; ZANATTA, N.; MOREL, A.F.; LINARES, C.E.; ALVES, S.H. Chemical analysis and antifungal activity of the essential oil of *Calea clematidea*. *Planta Medica*, v.68, p.836-839, 2002.

GILL, A.O.; DELAQUIS, P.; RUSSO, P.; HOLLEY, R.A. Evaluation of antilisterial action of cilantro oil on vacuum packed ham. *International Journal of Food Microbiology*, v.73, p.83-92, 2002.

HOMANS, A.L.; FUCHS, A. Direct bioautography on thin-layer chromatograms as a method for detecting fungitoxic substances. *Journal of Chromatography*, v.51, p.327-329, 1970.

INOUE, S., TAKIZAWA, T. AND YAMAGUCHI, H. Antibacterial activity of essential oils and their major constituents against respiratory tract pathogens by gaseous contact. *Journal of Antimicrobial Chemotherapy*, v.47, p.565–573, 2001.

KIM, J.; MARSHALL, M.R.; WEI, C.I. Antibacterial activity of some essential oil components against five foodborne pathogens. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, v.43, p.2839–2845, 1995.

LAHLOU, M. Essential oils and fragrances compounds: bioactivity and mechanisms of action. *Flavor and Fragrance Journal* v.19, p.159-165, 2004.

LUDLEYA, K.E.; ROBINSON, C.H.; JICKELSC, S.; HAMBERLAINA, P.M.; WHITAKER, J. Differential response of ectomycorrhizal and saprotrophic fungal mycelium from coniferous forest soils to selected monoterpenes. *Soil Biology & Biochemistry* v.40, p. 669–678, 2008.

MILLS, C.; CLEARY B.J.; GILMER, J.F.; WALSH, J.J. Inhibition of acetylcholinesterase by Tea Tree oil. *Journal of Pharmacy and Pharmacology*, v.56, p.375-379, 2004.

MIYAZAWA, M.; KAKIUCHI, A.; WATANABE, H.; KAMEOKA, H. Inhibition of acetylcholinesterase activity by volatile α,β -unsaturated ketones. *Natural Product Letters*, v.12, p.131-134, 1998a.

MIYAZAWA, M.; TOUGO, H.; ISHIHARA, M. Inhibition of acetylcholinesterase activity by essential oil from *Citrus paradise*. *Natural Product Letters*, v.15, p.205-210, 2001.

MIYAZAWA, M.; WATANABE, H.; KAMEOKA, H. Inhibition of acetylcholinesterase activity by monoterpenoids with a *p*-menthane skeleton. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* v.45, p.677-679, 1997.

MIYAZAWA, M.; WATANABE, H.; UMEMOTO, K.; KAMEOKA, K. Inhibition of acetylcholinesterase activity by essential oils of *Mentha* species. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, v.46, p.3431-3434, 1998b.

MIYAZAWA, M.; YAMAFUJI, C. Inhibition of acetylcholinesterase activity by bicyclic monoterpenoids. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, v.53, p.1765-1768, 2005.

MOLEYAR, V.; NARASIMHAM, P. Antifungal activity of some essential oil components. *Food Microbiology*, v.3, n.4, p.331-336, 2004.

MORRIS, J.A.; KHETTRY, A.; SEITZ, E.W. Antimicrobial activity of aroma chemicals and essential oils. *Journal of the American Oil Chemists Society*, v.56, p.595-603, 1979.

MOUREY, A.; CANILLAC, N. Anti-*Listeria monocytogenes* activity of essential oils components of conifers. *Food Control*, v.13, p.289-292, 2002.

PASTER, N.; MENASHEROV, M.; RAVID, U.; JUVEN, B. Antifungal activity of oregano and thyme essential oils applied as fumigants against fungi attacking stored grain. *Journal of Food Protection*, v.58, n.1, p. 81-85, 1995.

PAYNE, C., WOODWARD, S., PETTY, J.A. Modification of the growth habit of the softwood disfiguring fungus *Ophiostoma piceae* by monoterpene vapors. *Forest Products Journal* v.51, p.89–92, 2001.

PERRY, N.S.L.; HOUGHTON, P.J.; THEOBALD, A.; JENNER, P.; PERRY, E.K. In-vitro inhibition of human erythrocyte acetylcholinesterase by *Salvia lavandulaefolia* essential oil and constituent terpenes. *Journal of Pharmacy and Pharmacology*, v.52, p.895-902, 2000.

RAHALISON, L., HAMBURGER, M., MONOD, M., FRENK, E.; HOSTETTMANN, K. Antifungal tests in phytochemical investigations comparison of bioautographic methods using phytopatogenic and human pathogenic fungi. *Planta Medica*, v.60, p.41-44, 1994.

RHEE, I.K.; MEENT, M.; INGKANINAN, K.; VERPOORTE, R. Screening for Acetylcholinesterase Inhibitors from Amaryllidaceae using Sílica Gel Thin-layer Chromatography in Combination with Bioactivity Staining. *Journal of Chromatography, A*, v.915, p.217-223, 2001.

RUBERTO, G.; BARATTA, M.T.; DEANS, S.G.; DORMAN, H.J.D. Antioxidant and antimicrobial activity of *Foeniculum vulgare* and *Crithmum maritimum* essential oils. *Planta Medica* v.66, p.687– 693, 2000.

SALGUEIRO, L.R.; PINTO E.; GONCALVES, M.J.; PINA-VAZ, C.; CAVALEIRO, C.; RODRIGUES, A.G.; PALMEIRA, A.; TAVARES, C.; COSTA-DE-OLIVEIRA, S.; MARTINEZ-DE-OLIVEIRA, J. Chemical composition and antifungal activity of the essential oil of *Thymbra capitata*. *Planta Medica*, v.70, p.572-575, 2004.

SALIE, F.; EAGLES, P.F.K.; LENG, H.M.J. Preliminary antimicrobial screening of four South African Asteraceae species. *Journal of Ethnopharmacology*, v.52, p.27-33, 1996.

SAVELEV S.; OKELLO E.; PERRY N.S.; WILKINS R.M.; PERRY E.K. Synergistic and antagonistic interactions of anticholinesterase terpenoids in *Salvia lavandulaefolia* essential oil. *Pharmacology, Biochemistry and Behavior*, v.75, p.661-668, 2003.

SILVA, L.; ONIKI, G.H.; AGRIPINO, D.; MORENO, P.R.H.M.; YOUNG, M.C.M.; MAYWORM, M.A.S.; LADEIRA, A.M. Biciclogermacreno, resveratrol e atividade antifúngica em extratos de folhas de *Cissus verticillata* (L.) Nicolson & Jarvis (Vitaceae). *Brazilian Journal of Pharmacognosy*, v.17, n.3, p.361-367, 2007.

TAN, R.X.; LU, H.; WOLFENDER, J.L.; YU, T.T.; ZHENG, W.F.; YANG, L.; GAFNER, S.; HOSTETTMANN, K. Mono- and sesquiterpenes and antifungal constituents from *Artemisia* species. *Planta Medica*, v.65, p.64-67, 1999.

TIRILLINI, B.; VELASQUES, E.R.; PELLEGRINO, R. Chemical composition and antimicrobial activity of essential oil of *Piper angustifolium*. *Planta Medica*, v.62, p. 372-373, 1996.

TORTORA, G.J.; FUNKE, B.R.; CASE, C.L. *Microbiologia*. Porto Alegre: ARTMED, 2004. 920p.

TULLIO, V.; NOSTRO, A.; MANDRAS, N.; DUGO, P.; BANCHE, G.; CANNATELLI, M.A.; CUFFINI, A.M.; ALONZO, V.; CARLONE, N.A. Antifungal activity of essential oils against filamentous

fungi determined by broth microdilution and vapour contact methods. *Journal of Applied Microbiology* v.102, p.1544–1550, 2007.

ULTEE, A., SLUMP, R.A., STEGING, G., SMID, E.J. Antimicrobial activity of carvacrol toward *Bacillus cereus* on rice. *Journal of Food Protection* v.63, n.5, p.620–624, 2000.

VAARA, M. Agents that increase the permeability of the outer membrane. *Microbiological Reviews* v.56, n. 3, p.395-411, 1992.

WILLINGER, B.; APFALFER, P.; HIRSCHL, A.M.; MAKRISTATHIS, A.; ROTTER, M.; SEIBOLD, M. Susceptibility testing of *Candida* species: comparison of NCCLS microdilution method with Fungitest®. *Diagnostic Microbiology and Infectious Disease*, v.38, p.11-15, 2000.

CAPÍTULO 6

Discussão geral e Conclusões

1. DISCUSSÃO GERAL

Os óleos voláteis têm sido objeto de inúmeros estudos, principalmente devido às suas ações farmacológicas e ampla utilização industrial. Espécies utilizadas comercialmente, como aquelas pertencentes à Lamiaceae e aos gêneros *Citrus* L., *Pinus* L. e *Eucalyptus* L'Hér, são amplamente investigadas quanto à variabilidade no rendimento e na composição destes metabólitos em resposta a diferentes condições, época e local de cultivo, bem como quanto à existência de quimiotipos. A grande variabilidade dos óleos essenciais em função de fatores extrínsecos e endógenos, tão destacada na literatura, é decorrente destas investigações.

No entanto, a variabilidade e mesmo a composição química de óleos voláteis é ainda desconhecida para muitas espécies. Entre as Myrtaceae, a despeito da grande diversidade da família, poucos táxons já foram investigados neste sentido e aqueles já analisados comumente pertencem aos gêneros australianos *Eucalyptus* L'Hér, *Melaleuca* L., *Angophora* Cav. e *Chamelaucium* Desf., além, evidentemente, da espécie *Syzygium aromaticum* (L.) Merr. & Perry, largamente estudada devido à importância econômica de seu constituinte majoritário, eugenol. Os táxons neotropicais da família são estudados em frequência consideravelmente menor.

O Brasil possui uma enorme riqueza de Myrtaceae, representada em cerca de 1.000 espécies, em especial dos gêneros *Eugenia* Mich. ex L., *Myrcia* DC. ex Guill. e *Calypttranthes* Sw.. Muitas destas espécies ocorrem nos fragmentos de Mata Atlântica e produzem frutos comestíveis, consumidos pelas populações locais, além de serem utilizadas pela medicina popular. Todavia, essa utilização representa apenas uma fração do potencial econômico da família. Existem estudos da composição química de algumas destas espécies, porém, devido à grande interferência humana que resulta na devastação deste bioma, muitas espécies estão ameaçadas e é possível que desapareçam antes de terem sido estudadas.

Todas as propostas de estratégias de conservação da Mata Atlântica enfatizam a necessidade de se aprofundar o conhecimento da fauna e da flora do bioma, visando à criação de propostas de uso sustentável dos recursos. Diante disso, surgiu o interesse pelo estudo dos óleos voláteis de espécies de Myrtaceae que ocorrem em fragmentos de Mata Atlântica, tendo como objetivo aumentar o conhecimento sobre a diversidade química destes metabólitos na família, bem como seu potencial para utilização econômica.

A análise da composição química dos óleos das nove espécies de Myrtaceae estudadas neste trabalho revelou similaridades com estudos anteriores realizados com estas espécies ou com outras da mesma subtribo. Oito delas apresentaram predominantemente compostos terpênicos em seus óleos, sendo em sua maioria sesquiterpenos. Apenas *Myrcia macrocarpa* DC. (Capítulo 2), *Myrceugenia myrcioides* (Cambess.) O. Berg. e um dos indivíduos *Marlierea racemosa* Kiaersk. apresentaram teores mais elevados de constituintes monoterpênicos. Apel (2001), estudando a composição química do óleo de 48 espécies de Myrtaceae do Rio Grande do Sul (incluindo representantes de *Eugenia* e *Myrciaria* O. Berg) também verificou a predominância de sesquiterpenos em 40 delas. Assim como foi observado no presente estudo (Capítulo 2), a única espécie que apresentou um composto majoritário aromático foi *Myrciaria floribunda* O. Berg., em que se encontrou elevado teor da acetofenona xantoxilina. Esta substância apresenta potente atividade anti-espasmódica e vem sendo utilizada para a síntese de outros fármacos com esta atividade, além de também apresentar atividade antinociceptiva e antiedematogênica (CECHINEL-FILHO *et al.*, 1996; 1998). *M. floribunda* apresenta, portanto, potencial como fonte produtora de xantoxilina, devido à alta concentração desta substância, a qual chegou a atingir 100%, e ao rendimento elevado do óleo volátil (até 2%).

Embora a composição química já tenha sido estudada para algumas espécies de Myrtaceae neotropicais, apenas uma pequena parte destes trabalhos levou em consideração a variabilidade química. Diversos fatores constituem-se obstáculos para este tipo de investigação em espécies nativas. A maioria das Myrtaceae, por exemplo, apresenta baixa taxa de produção e baixa longevidade de sementes (ANDRADE & FERREIRA, 2000; ANDRADE, *et al.*, 1997; BARBEDO *et al.*, 1998; SILVA *et al.*, 2005), o que dificulta o cultivo em casas de vegetação. Além disso, no caso de espécies arbóreas, seria necessário um tempo muito extenso de cultivo para que obtivesse a massa necessária para a extração do óleo volátil. Nos estudos de campo, torna-se difícil o isolamento de variáveis para se determinar os fatores responsáveis por variações encontradas. Adicionalmente, muitas vezes existem dificuldades em se encontrar um número significativo de indivíduos em uma mesma área. Devido a estes fatores, a variabilidade de óleos voláteis em espécies arbóreas não é tão conhecida quanto para espécies herbáceas.

No presente trabalho optou-se pelo estudo de espécimes em três áreas de Mata Atlântica: o Parque Estadual das Fontes do Ipiranga, para os estudos mais longos, de

variabilidade sazonal e diuturna, e dois fragmentos de origem geomorfológica distinta, o Parque Estadual da Ilha do Cardoso e o Núcleo Caraguatatuba do Parque Estadual da Serra do Mar para os estudos do efeito de localização geográfica.

No estudo da variação diuturna (Capítulo 2), não foi observado padrão de variação para *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk. ou para *Myrcia splendens* (Sw.) DC. Para as duas espécies, as variações individuais foram mais importantes. Para os fatores de variabilidade analisados nos capítulos seguintes (variações sazonais e geográficas), a resposta variou dependendo da espécie.

No Capítulo 3, não foram identificadas flutuações na composição química dos óleos voláteis decorrentes de efeito de sazonalidade para nenhuma das quatro espécies estudadas. Em *M. floribunda*, as variações individuais e mensais foram randômicas. Em *C. guaviroba* e *M. splendens*, foram observadas flutuações entre os anos de análise que não puderam ser associadas a um determinado constituinte ou uma classe de compostos. Para estas duas espécies, as variações individuais observadas no Capítulo 2 também foram evidentes na análise de componentes principais. Nos dois casos, os resultados sugerem que os espécimes mais velhos são o que apresentam composição mais diferente dos demais, indicando que o desenvolvimento possa ser um fator importante na variabilidade dos óleos de Myrtaceae. Resultados similares foram observados por ITO (2008) em um estudo de variação sazonal com espécies de Annonaceae. Já para *Myrcia macrocarpa* O. Berg., as diferenças entre os espécimes foi menor, uma alteração na proporção entre as classes de majoritárias foi observada a partir do final de 2006, mantendo-se até julho de 2007. Esta mudança não está associada a sazonalidade.

No Capítulo 4, observou-se que a localização geográfica não é um fator relevante de variabilidade para os óleos de *C. guaviroba*. Já para *Eugenia cuprea* (O. Berg.) Mattos e *Calypttranthes lucida* Mart. Rotas de ciclização de sesquiterpenos diferenciadas foram encontradas para espécimes ocorrendo em diferentes fragmentos de Mata Atlântica, havendo, todavia, uma inversão de qual rota é predominante para qual local entre as duas espécies. Esses resultados indicam que as variações encontradas entre as duas populações são decorrentes mais devido à diversidade genética, do que às diferenças ambientais entre as localidades.

Finalmente, no Capítulo 5, a importância de se conhecer a diversidade química dos óleos voláteis de espécies de Myrtaceae nativas da Mata Atlântica foi demonstrada, através

das atividades biológicas encontradas para estes compostos. Embora os óleos das espécies analisadas tenham apresentado pouco potencial anticolinesterásico, atividades antimicrobianas promissoras foram verificadas, em especial a antifúngica de *C. guaviroba*, *M. macrocarpa* e *M. splendens* e a antibacteriana de *C. lucida*, *M. macrocarpa* e *C. guaviroba*.

2. CONCLUSÕES

Os resultados obtidos neste trabalho sugerem que para espécies de Myrtaceae os fatores endógenos, sejam resultantes da fase de desenvolvimento ou de variações genéticas entre indivíduos, são mais importantes do que os fatores extrínsecos no que se refere à variabilidade dos óleos voláteis. Assim, é possível que, para que se observem padrões de variabilidade determinados por fatores ambientais, um número de amostras consideravelmente maior se faça necessário para os estudos. Resultados semelhantes vêm sendo observados para outras espécies de plantas arbóreas, como algumas Lauraceae (RAGGI, 2008) e Annonaceae (ITO, 2008), indicando que para estas famílias os efeitos ambientais na composição química dos óleos voláteis são mais sutis do que para espécies herbáceas.

Ainda existem poucos estudos sobre a genética de populações de Myrtaceae em fragmentos florestais no Brasil, porém a grande variabilidade individual na composição dos óleos essenciais para as espécies estudadas é um indicativo de alta diversidade. Este aspecto é fundamental para a definição de áreas prioritárias de conservação de ecossistemas e de corredores de biodiversidade. Assim, além de aumentar o conhecimento sobre os óleos voláteis de espécies de Myrtaceae nativas da Mata Atlântica, os dados aqui obtidos poderão fornecer subsídios para estudos de diversidade genética da família e para a criação de programas de conservação deste bioma.

3. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANDRADE, A.C.S.; CUNHA, R.; REIS, R.B. & ALMEIDA, K.J. Conservação de sementes de cagaita (*Eugenia dysenterica* DC.) - Myrtaceae. In: congresso brasileiro de sementes, 10. Foz do Iguaçu. Informativo ABRATES, Brasília. v.7, n.1/2, p.205, 1997.

ANDRADE, R.N.B.; FERREIRA, A.G. Germinação e armazenamento de sementes de uvaia (*Eugenia pyriformis* Camb.) - Myrtaceae. *Revista Brasileira de Sementes*, v.22, n.2, p.118-125, 2000.

APEL, M.A. *Óleos voláteis de espécies da subtribo Eugeniinae (Myrtaceae): composição química e atividades antimicrobiana e antiinflamatória*. Porto Alegre, 2001. 256p. Tese de Doutorado – Faculdade de Farmácia – Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

BARBEDO, C.J.; KOHAMA, S.; MALUF, A.M.; BILIA, D.A.C. Germinação e armazenamento de diásporos de cerejeira (*Eugenia involucrata* DC. - Myrtaceae) em função do teor de água. *Revista Brasileira de Sementes*, v.20, n.1, p.184-188, 1998.

CECHINEL-FILHO, V.; VAZ, Z.R.; ZUNINO, L.; CALIXTO, J.B.; YUNES, R.A. synthesis of xanthoxylene derivatives with antinociceptive and antioedematogenic activities. *European Journal of Medicinal Chemistry*, v.31, p.833-839, 1996.

CECHINEL-FILHO, V.; YUNES, R.A. Estratégias para a obtenção de compostos farmacologicamente ativos a partir de plantas medicinais. Conceitos sobre modificação estrutural para otimização da atividade. *Química Nova*, v.21, n.1

ITO, R.K. Avaliação da variação sazonal e atividade biológica dos óleos voláteis em duas espécies de Annonaceae. São Paulo, 2008. 100p. Dissertação de Mestrado - Faculdade de Ciências Farmacêuticas - Universidade de São Paulo.

RAGGI, L. Estudo da composição química e das atividades biológicas de óleos voláteis de espécies de Lauraceae, em diferentes épocas do ano. São Paulo, 2008. 67p. Dissertação de Mestrado - Instituto de Botânica de São Paulo.

VENDRAME-SILVA, C.; BILIA, D.A.C.; BARBEDO, C.J.B Fracionamento e germinação de sementes de *Eugenia*. *Revista Brasileira de Sementes*, v.27, n.1, p.86-92, 2005.

RESUMO

A conservação das áreas remanescentes de Mata Atlântica envolve o desenvolvimento de programas de uso sustentável que requerem um amplo conhecimento da fauna e da flora. Myrtaceae é uma família de grande importância no bioma, sendo dominante em muitos fragmentos, e destaca-se pela produção de óleos voláteis, substâncias com grande potencial de utilização pelas indústrias alimentícia, cosmética e farmacêutica. Considerando-se que a variabilidade de óleos essenciais é pouco conhecida para espécies brasileiras de Myrtaceae, este trabalho teve por objetivo avaliar as alterações destes metabólitos nas folhas algumas destas espécies, em função de aspectos diurnos, sazonais e de localização geográfica, bem como investigar algumas atividades biológicas. Os óleos foram obtidos por hidrodestilação e analisados por CG-EM. Os resultados demonstraram uma predominância de compostos sesquiterpênicos para sete das nove espécies estudadas, especialmente espatulenol, β -cariofileno, α -cadinol e δ -elemeno. Entretanto, não foram verificados padrões de variabilidade diurna ou de sazonalidade para os óleos em nenhuma das espécies alvo, observando-se, porém, alterações na composição entre os diferentes anos de coleta para as espécies *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk., *Myrcia splendens* (Sw.) DC., e *Myrcia macrocarpa* DC. Alterações na composição dos óleos de espécimes coletados em fragmentos distintos foram verificadas em *Eugenia cuprea* (O. Berg) Nied. e *Calyptranthes lucida* Mart. Ex DC., porém com inversão, entre as duas espécies, da rota biossintética de sesquiterpenos mais ativa em cada localidade, sugerindo que as variações não são decorrentes de diferenças ambientais. A análise das atividades biológicas demonstrou que os óleos voláteis investigados não apresentam potencial anticolinesterásico, mas possuem potencial para a utilização como antimicrobianos, destacando-se a atividade antifúngica dos óleos de *C. guaviroba*, *M. splendens* e *M. macrocarpa* frente a *Cladosporium cladosporioides* e *C. sphaerospermum*. Os resultados obtidos neste trabalho sugerem que os fatores endógenos são mais importantes para a variabilidade dos óleos voláteis nas espécies de Myrtaceae estudadas do que os aspectos ambientais. A ampla variabilidade individual verificada sugere grande diversidade genética para estas espécies, informação fundamental a ser considerada para a definição de estratégias de conservação da Mata Atlântica.

ABSTRACT

The conservation of the Atlantic Rain Forest remnants involves the development of sustainable use programs that require an extensive knowledge of its flora and fauna. Myrtaceae is an important family in this biome, being dominant in many fragments, and is also recognized by the production of volatile oils, substances with great potential for food, cosmetic and pharmaceutical industries. Considering that there is a lack of scientific information on essential oil variability for Brazilian Myrtaceae species, this work aimed to evaluate the changes of these metabolites in the leaves of some species, considering diurnal and seasonal aspects, and geographical location, as well as to investigate some biological activities. The oils were obtained by hydrodistillation and analyzed by GC-MS. The results showed a predominance of sesquiterpenes compounds for seven of the nine species studied, especially espatulenol, β -caryophyllene, α -cadinol and δ -elemene. However, no diurnal or seasonal patterns of variability were observed for all target species, but changes in the composition among the analyzed years were found for *Campomanesia guaviroba* (DC.) Kiaersk., *Myrcia splendens* (Sw.) DC. and *Myrcia macrocarpa* DC.. Differences in volatile oil composition for specimens collected in different locations were observed for *Eugenia cuprea* (O. Berg) Nied. and *Calypttranthes lucida* Mart. Ex DC., but with an inversion, between the two species, of the main sesquiterpene biosynthetic routes acting in each area, suggesting that the variations are not due to environmental differences. The analysis of the biological activities showed that the investigated volatile oils do not exhibit an important anticholinesterasic potential, but rather an antimicrobial one, particularly the antifungal activity of *C. guaviroba*, *M. splendens* and *M. macrocarpa* oils against *Cladosporium cladosporioides* and *C. sphaerospermum*. The obtained results suggested that endogenous factors are more important for the volatile oil variability in the studied Myrtaceae species than the environmental aspects. The wide individual variability observed suggests a high genetic diversity for these species, which is an important issue for the establishment of strategies for Atlantic Rain Forest conservation programs.

ANEXO I

Estruturas químicas de compostos
encontrados nos óleos voláteis das
espécies estudadas

COMPOSTO AROMÁTICO

xantoxilina

HIDROCARBONETOS MONOTERPÊNICOS

α-pineno

β-pineno

limoneno

mirceno

β-felandreno

α-terpinene

MONOTERPENOS OXIGENADOS

terpinen-4-ol

α -terpinenol

terpinen-4-ol

HIDROCARBONETOS SESQUITERPÊNICOS

biciclogermacreno

δ -cadineno

α -humuleno

β -selineno

α -calacoreno

α -amorfenno

óxido de cariofileno

β -cariofileno

β -elemenno

SESQUITERPENOS OXIGENADOS

espatulenol

guaiaol

rosifoliol

viridiflorol

α-cadinol

1-epi-cubenol

epi-α-cubenol

α-muuroiol

α-eudesmol

β-eudesmol

γ-eudesmol

10-epi-γ-eudesmol

ANEXO II

Exemplo de cromatograma e espectros de massas de
Campomanesia guaviroba (DC.) Kiaersk.

Library Search Report

Data File : C:\MSDCHEM\1\DATA\DIUTURNAL\CGE_0904.D Vial: 8
Acq On : 26 Mar 2008 21:55 Operator:
Sample : CGE_0904 Inst : CG-MS
Misc : Multiplr: 1.00
Sample Amount: 0.00

MS Integration Params: autoint1.e

Method : C:\MSDCHEM\1\METHODS\DEFAULT.M (Chemstation Integrator)

Title :

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 1 at 26.91 min Area: 44918967 Area % 1.25

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	28.83	Bicyclogermacrene	1359	024703-35-3	53
2	15.73	Terpineol<gamma->	1527	000586-81-2	53
3	26.16	Isobazzanene	1868	088661-59-0	50

C:\Database\Wiley275.L

1	2-(Bromomethyl)-1,3,3-trimethylc...	25405	000000-00-0	64
2	2,6,6-TRIMETHYL-1-METHYLEN-CYCLO...	25110	000514-95-4	64
3	.alpha.-Terpinene \$\$ 1,3-Cyclohe...	24980	000099-86-5	62

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 2 at 28.53 min Area: 22164740 Area % 0.62

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	23.49	Copaene<alpha->	828	003856-25-5	97
2	22.33	Cubebene<alpha->	826	017699-14-8	94
3	27.60	Dauca-5,8-diene	1573	142928-08-3	93

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-Copaene	\$\$ Tricyclo[4.4....	89532	003856-25-5	97
2	.alpha.-Copaene	\$\$ Tricyclo[4.4....	89529	003856-25-5	97
3	.ALPHA.-COPAENE		89659	003856-25-5	97

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 3 at 28.89 min Area: 15398813 Area % 0.43

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	24.05	Bourbonene<beta->	653	005208-59-3	95
2	19.18	Ethyl chrysanthemumate<tra...	666	041641-25-2	38
3	18.87	Ethyl chrysanthemumate<cis->	665	041641-26-3	38

C:\Database\Wiley275.L

1	.BETA. BOURBONENE	89648	005208-59-3	98
2	.beta.-Bourbonene \$\$ Cyclobuta[1...	89548	005208-59-3	97
3	.beta.-Bourbonene \$\$ Cyclobuta[1...	89545	005208-59-3	78

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 4 at 29.31 min Area: 82185983 Area % 2.28

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	24.15	Elemene<beta->	309	000515-13-9	91
2	27.80	Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	43
3	29.05	Premnaspirodiene	1661	082189-85-3	43

C:\Database\Wiley275.L

1		.BETA. ELEMENE	89661	000515-13-9	98
2		(-)-.beta.-Elemene \$\$ Cyclohexan...	89181	000515-13-9	80
3		Eremophilene \$\$ Naphthalene, 1,2...	89361	010219-75-7	64

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 5 at 29.96 min Area: 54885219 Area % 1.53

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	25.00	Gurjunene<alpha->	764	000489-40-7	98
2	24.54	Cyperene	829	002387-78-2	93
3	29.97	Zonarene	1051	041929-05-9	76

C:\Database\Wiley275.L

1	(-)-.ALPHA.-GURJUNENE	89794	000000-00-0	99
2	.alpha.-Gurjunene \$\$ 1H-Cyclopro...	89464	000489-40-7	99
3	.alpha.-Gurjunene \$\$ 1H-Cyclopro...	89465	000489-40-7	99

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 6 at 30.35 min Area: 77969836 Area % 2.17

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.60	Dauca-5,8-diene	1573	142928-08-3	70
2	28.15	Germacrene D	500	023986-74-5	70
3	25.95	Gurjunene<beta->	763	017334-55-3	64

C:\Database\Wiley275.L

1	.beta.-cubebene	89691	013744-15-5	90
2	Isolongifolene \$\$ 2H-2,4a-Methan...	89400	001135-66-6	76
3	Calarene \$\$ 1H-Cyclopropa[a]naph...	89494	017334-55-3	64

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 7 at 30.76 min Area: 34942486 Area % 0.97

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	25.90 Copaene<beta->	1319	018252-44-3	96
2	28.53 Muurola-4(14),5-diene<trans->	510	054324-03-7	70
3	24.04 Cubebene<beta->	468	013744-15-5	70

C:\Database\Wiley275.L

1	.beta.-cubebene	89691	013744-15-5	95
2	BICYCLO[4.4.0]DEC-1-EN, 2-ISOPRO...	89341	000000-00-0	94
3	germacrene d	89580	023986-74-5	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 8 at 31.13 min Area: 10539139 Area % 0.29

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	28.91 Patchoulene<gamma->	1242	000508-55-4	93
2	28.66 Valencene	1528	004630-07-3	90
3	26.39 Guaiadiene<6,9->	1795	037839-64-8	68

C:\Database\Wiley275.L

1	valencene 1	89600	046030-07-3	93
2	VALENCENE	89599	046030-07-3	93
3	Alloaromadendrene \$\$ 1H-Cyclopro...	89477	025246-27-9	92

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 9 at 31.38 min Area: 13537986 Area % 0.38

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	24.04 Cubebene<beta->	468	013744-15-5	95
2	27.18 Cadina-1(6),4-diene<cis->	1870	246522-85-0	90
3	28.15 Germacrene D	500	023986-74-5	86

C:\Database\Wiley275.L

1	GERMACRENE-D	89658	023986-74-5	89
2	BICYCLO[4.4.0]DEC-1-EN, 2-ISOPRO...	89341	000000-00-0	89
3	GERMACRENE-D	89649	023986-74-5	87

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 10 at 31.64 min Area: 19169775 Area % 0.53

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	26.78 Muurola-3,5-diene<trans->	511	189165-77-3	93
2	26.64 Muurola-3,5-diene<cis->	514	157374-44-2	93
3	27.60 Dauca-5,8-diene	1573	142928-08-3	87

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-Cubebene \$\$ 1H-Cyclopent...	89538	017699-14-8	90
2	.delta.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89349	000483-76-1	89
3	.delta.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89354	000483-76-1	86

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 11 at 31.75 min Area: 46696318 Area % 1.30

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	26.82 Humulene<alpha>	827	006753-98-6	96
2	5.12 Santolina Triene	226	002153-66-4	49
3	29.09 Bisabolene<(Z)-alpha>	1221	070332-15-9	47

C:\Database\Wiley275.L

1	.ALPHA.-HUMULENE \$\$ ALPHA-HUMULENE	89650	006753-98-6	94
2	.alpha.-Humulene \$\$ 1,4,8-Cyclou...	89192	006753-98-6	94
3	.alpha.-Humulene \$\$ 1,4,8-Cyclou...	89194	006753-98-6	94

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 12 at 32.03 min Area: 14934451 Area % 0.42

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	29.05	Premnaspirodien	1661	082189-85-3	96
2	27.91	Murolene<gamma->	1342	030021-74-0	91
3	24.62	Sibirene	1853	014029-18-6	89

C:\Database\Wiley275.L

1	AROMADENDRENE	89682	000489-39-4	99
2	ALLOAROMADENDRENE	89772	000000-00-0	98
3	Alloaromadendrene \$\$ 1H-Cyclopro...	89480	025246-27-9	98

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 13 at 32.14 min Area: 26305746 Area % 0.73

The 3 best hits from each library.

	Ref#	CAS#	Qual

C:\Database\HPCH2205.L			
1 28.53 Muurola-4(14),5-diene<trans->	510	054324-03-7	97
2 28.63 Amorphenes<gamma->	1320	006980-46-7	95
3 27.60 Dauca-5,8-diene	1573	142928-08-3	90
C:\Database\Wiley275.L			
1 BICYCLO[4.4.0]DEC-1-EN, 2-ISOPRO...	89341	000000-00-0	91
2 EPI-BICYCLOSESQUIPELLANDRENE \$\$...	89157	054324-03-7	91
3 .beta.-Cubebene \$\$ 1H-Cyclopenta...	89544	013744-15-5	90

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 14 at 32.65 min Area: 65494787 Area % 1.82

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.77 Cadina-1(6),4-diene<trans->	1052	020085-11-4	94
2	29.97 Zonarene	1051	041929-05-9	87
3	28.88 Epizonarene	515	041702-63-0	81

C:\Database\Wiley275.L

1	EPIZONAREN \$\$ Naphthalene, 1,2,3...	89389	041702-63-0	93
2	1(5),6-Guaiadiene \$\$ (1R)-1,2,4,...	89722	111900-51-7	91
3	Cadinene \$\$ Naphthalene, 1,2,4a,...	89342	000523-47-7	90

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 15 at 32.99 min Area: 264168253 Area % 7.34

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCHE2205.L

1	28.15 Germacrene D	500	023986-74-5	97
2	27.91 Muurolene<gamma->	1342	030021-74-0	94
3	29.35 Cadinene<gamma->	832	039029-41-9	91

C:\Database\Wiley275.L

1	GERMACRENE-D	89684	023986-74-5	97
2	GERMACRENE-D	89649	023986-74-5	97
3	.beta.-Cubebene \$\$ 1H-Cyclopenta...	89543	013744-15-5	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 16 at 33.14 min Area: 17200733 Area % 0.48

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	26.20 Guaiene<alpha>	831	003691-12-1	99
2	28.37 Selinene<beta>	420	017066-67-0	99
3	27.80 Gurjunene<gamma>	762	022567-17-5	95

C:\Database\Wiley275.L

1	.BETA.-SELINENE	89676	017066-67-0	99
2	Aromadendrene	89476	000489-39-4	98
3	.beta.-Selinene \$\$ Naphthalene, ...	89380	017066-67-0	95

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 17 at 33.34 min Area: 33508906 Area % 0.93

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	28.53 Muurola-4(14),5-diene<trans->	510	054324-03-7	96
2	27.60 Dauca-5,8-diene	1573	142928-08-3	91
3	26.78 Muurola-3,5-diene<trans->	511	189165-77-3	90

C:\Database\Wiley275.L

1	.delta.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89359	000483-76-1	90
2	.beta.-cubebene	89691	013744-15-5	87
3	EPI-BICYCLOSQUIPHELLANDRENE \$\$...	89157	054324-03-7	86

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 18 at 33.54 min Area: 127884112 Area % 3.55

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	28.68 Viridiflorene	6	021747-46-6	93
2	25.95 Gurjunene<beta->	763	017334-55-3	93
3	22.33 Cubebene<alpha->	826	017699-14-8	87

C:\Database\Wiley275.L

1	Ledene \$\$ 1H-Cycloprop[e]azulene...	89483	021747-46-6	91
2	Valencene \$\$ Naphthalene, 1,2,3,...	89393	004630-07-3	90
3	Ledene \$\$ 1H-Cycloprop[e]azulene...	89485	021747-46-6	90

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 19 at 33.78 min Area: 145476975 Area % 4.04

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	28.83 Muurolene<alpha>	907	031983-22-9	98
2	27.97 Amorpha-4,7(11)-diene	1899	486998-53-2	95
3	29.97 Zonarene	1051	041929-05-9	94

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-Muurolene \$\$ Naphthalene...	89427	031983-22-9	95
2	.alpha.-Muurolene \$\$ Naphthalene...	89421	031983-22-9	94
3	.alpha.-Muurolene-(-) \$\$ Naphtha...	89417	010208-80-7	94

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 20 at 34.01 min Area: 32860260 Area % 0.91

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	29.29 Amorphene<delta->	1298	189165-79-5	99
2	29.72 Cadinene<delta->	833	000483-76-1	90
3	27.77 Cadina-1(6),4-diene<trans->	1052	020085-11-4	64

C:\Database\Wiley275.L

1	.delta.-cadinene (armoise-Maroc)...	89582	000483-76-1	98
2	.DELTA.-CADINENE	89652	039029-41-9	98
3	.delta.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89358	000483-76-1	95

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 21 at 34.31 min Area: 121802357 Area % 3.39

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	29.35 Cadinene<gamma->	832	039029-41-9	97
2	28.15 Germacrene D	500	023986-74-5	91
3	27.91 Muurolene<gamma->	1342	030021-74-0	90

C:\Database\Wiley275.L

1	.gamma.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89347	039029-41-9	96
2	.alpha.-amorphene \$\$.ALPHA. AMO...	89416	023515-88-0	95
3	.gamma.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89345	039029-41-9	94

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 22 at 34.86 min Area: 470979778 Area % 13.09

The 3 best hits from each library.

	Ref#	CAS#	Qual
C:\Database\HPC2205.L			
1 29.29 Amorphene<delta->	1298	189165-79-5	98
2 29.72 Cadinene<delta->	833	000483-76-1	87
3 27.77 Cadina-1(6),4-diene<trans->	1052	020085-11-4	68
C:\Database\Wiley275.L			
1 .beta.-cadinene	89610	000523-47-7	94
2 .DELTA.-CADINENE	89652	039029-41-9	93
3 .delta.-cadinene (armoise-Maroc)...	89582	000483-76-1	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 23 at 35.05 min Area: 27490513 Area % 0.76

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	30.18	Cadina-1,4-diene<trans->	1315	038758-02-0	94
2	28.62	Cadina-1,4-diene<cis->	1317	029837-12-5	91
3	28.20	Himachala-1,4-diene<11-alp...	1863	000000-00-0	64

C:\Database\Wiley275.L

1	Naphthalene, 1,2,3,4,4a,7-hexahy...	89391	016728-99-7	95
2	Naphthalene, 1,2,3,4,4a,7-hexahy...	89390	016728-99-7	89
3	.alpha.-Ylangene \$\$ Tricyclo[4.4...	89523	014912-44-8	64

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 24 at 35.22 min Area: 45572875 Area % 1.27

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	30.33 Cadinene<alpha>	947	082468-90-4	98
2	27.97 Amorpha-4,7(11)-diene	1899	486998-53-2	94
3	24.62 Sibirene	1853	014029-18-6	90

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-cadinene	89612	000000-00-0	98
2	.alpha.-Muurolene \$\$ Naphthalene...	89420	031983-22-9	93
3	EPIZONAREN \$\$ Naphthalene, 1,2,3...	89389	041702-63-0	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 25 at 35.38 min Area: 10148776 Area % 0.28

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	30.62 Calacorene<alpha->	1344	021391-99-1	95
2	31.43 Calacorene<beta->	1345	050277-34-4	94
3	35.51 Calamenen-10-ol<trans->	1427	123931-36-2	12

C:\Database\Wiley275.L

1	CALACORENE \$\$ 1,1,6-trimethyl-1,...	57844	000000-00-0	72
2	1,4,5,8-Tetramethyl-1,4-dihydron...	85446	068185-75-1	72
3	Quinoline, 2,6-dimethyl- (CAS) \$...	43270	000877-43-0	59

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 26 at 36.27 min Area: 30816048 Area % 0.86

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	25.00	Gurjunene<alpha>	764	000489-40-7	53
2	31.56	Palustrol	4	005986-49-2	46
3	30.66	Selina-3,7(11)-diene	133	006813-21-4	45

C:\Database\Wiley275.L

1	(+)-.delta.-Selinene	89385	028624-28-4	83
2	endo-7-methyl-3-methylene-exo-7-...	89761	089044-35-9	70
3	.alpha.-Gurjunene	89462	000489-40-7	70

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 27 at 36.62 min Area: 43678158 Area % 1.21

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.91 Muurolene<gamma>	1342	030021-74-0	94
2	29.97 Zonarene	1051	041929-05-9	91
3	29.35 Cadinene<gamma>	832	039029-41-9	89

C:\Database\Wiley275.L

1	.gamma.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89347	039029-41-9	93
2	.delta.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89349	000483-76-1	93
3	.alpha.-amorphene \$\$.ALPHA. AMO...	89415	023515-88-0	92

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 28 at 36.95 min Area: 72673858 Area % 2.02

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	24.92	Longifolene	1027	000475-20-7	83
2	27.80	Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	59
3	30.66	Selina-3,7(11)-diene	133	006813-21-4	53

C:\Database\Wiley275.L

1	Ledene \$\$ 1H-Cycloprop[e]azulene...	89487	021747-46-6	95
2	.gamma.-Selinene \$\$ Naphthalene,...	89383	000515-17-3	93
3	VIRIDIFLOROL	108486	000552-02-3	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 29 at 37.06 min Area: 10661260 Area % 0.30

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	20.14	Carvacrol	1507	000499-75-2	47
2	22.38	Thymol acetate	1227	000528-79-0	47
3	22.30	Acetophenone<4'-methoxy->	10	000100-06-1	47

C:\Database\Wiley275.L

1	Phenol, 2-methyl-5-(1-methylethy...	35738	000499-75-2	58
2	1-VINYL-2,6,6-TRIMETHYLCYCLOHEX-...	36235	005293-90-3	55
3	1-methyladamantane \$\$ Tricyclo[3...	36307	000768-91-2	53

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 30 at 37.24 min Area: 79820308 Area % 2.22

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	28.66	Valencene	1528	004630-07-3	64
2	27.91	Murolene<gamma->	1342	030021-74-0	64
3	23.70	Patchoulene<beta->	1240	000514-51-2	62

C:\Database\Wiley275.L

1	viridiflorol	108383	000552-02-3	99
2	VIRIDIFLOROL	108486	000552-02-3	99
3	.gamma.-Selinene \$\$ Naphthalene,...	89383	000515-17-3	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 31 at 37.64 min Area: 44655280 Area % 1.24

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	17.19	Thymol, methyl ether	1506	001076-56-8	38
2	17.61	Carvacrol, methyl ether	1503	006379-73-3	38
3	40.86	Cryptomeridiol	499	004666-84-6	28

C:\Database\Wiley275.L

1	1H-Indene, 1-ethylideneoctahydro...	49570	056324-68-6	86
2	Benzene, 1-(1,1-dimethylethyl)-4...	49282	005396-38-3	60
3	Phenol, 4-(1,1-dimethylethyl)-2-...	49262	000098-27-1	49

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 32 at 37.88 min Area: 15375151 Area % 0.43

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	31.70 Amorph-4-ene<1-alpha, 10-a...	1714	257293-86-0	72
2	36.72 Nootkatol<epi->	1773	050763-66-1	49
3	28.30 Ionone<(E)-beta->	843	000079-77-6	49

C:\Database\Wiley275.L

1	.BETA. IONONE	76625	000079-77-6	59
2	.beta.-ionone	76614	000079-77-6	49
3	trans-.beta.-Ionone \$\$ 3-Buten-2...	76514	000079-77-6	45

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 33 at 38.04 min Area: 11290135 Area % 0.31

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	28.91	Patchoulene<gamma->	1242	000508-55-4	59
2	34.08	Eudesmol<gamma->	921	001209-71-8	47
3	29.31	Macrocarpene<(Z)-gamma->	1925	847374-81-6	42

C:\Database\Wiley275.L

1	(+)-Aromadendrene \$\$ 1H-Cyclopro...	89471	000489-39-4	93
2	(+)-5-Epi-Neointermedeol	108606	136734-26-4	90
3	4-methyl-1-(3',3'-dimethylbicycl...	89711	116947-98-9	89

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 34 at 38.14 min Area: 26965853 Area % 0.75

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	33.60 Cubenol<1,10-di-epi->	1440	073365-77-2	90
2	23.49 Copaene<alpha->	828	003856-25-5	60
3	33.95 Cubenol<1-epi->	255	019912-67-5	52

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-Gurjunene \$\$ 1H-Cyclopro...	89467	000489-40-7	58
2	.alpha.-Copaene \$\$ Tricyclo[4.4....	89530	003856-25-5	53
3	rac-(1R,2S,5R,6R)-5-Isopropyl-2,...	108347	071300-63-5	52

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 35 at 38.20 min Area: 36536636 Area % 1.02

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	33.61 Junenol	1641	000472-07-1	97
2	27.91 Muurolene<gamma->	1342	030021-74-0	35
3	25.42 Cedrene<beta->	940	000546-28-1	35

C:\Database\Wiley275.L

1	EPIZONAREN \$\$ Naphthalene, 1,2,3...	89389	041702-63-0	91
2	1-Naphthalenol, decahydro-4a-met...	108328	030951-17-8	91
3	FONENOL	108376	000000-00-0	91

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 36 at 38.41 min Area: 25874680 Area % 0.72

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	32.89	Rosifoliol	1595	063891-61-2	35
2	40.86	Cryptomeridiol	499	004666-84-6	25
3	25.06	Thujaplicin<alpha->	1494	001946-74-3	25

C:\Database\Wiley275.L

1	1-.alpha.,9-.alpha.-Dimethyl-cis...	49321	077494-84-9	55
2	Cyclohexane, 1,1,4,4-tetramethyl...	49545	040482-18-6	52
3	2,3,4,5-Tetramethyl-5-vinyl-2-cy...	49235	054277-22-4	43

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 37 at 38.64 min Area: 65380511 Area % 1.82

The 3 best hits from each library.

	Ref#	CAS#	Qual
C:\Database\HPCH2205.L			
1 33.95 Cubenol<1-epi->	255	019912-67-5	99
2 28.62 Cadina-1,4-diene<cis->	1317	029837-12-5	74
3 25.06 Cedrene<alpha->	939	000469-61-4	53
C:\Database\Wiley275.L			
1 CADINA-1,4-DIENE	89671	000000-00-0	87
2 .delta.-Cadinol \$\$ 1-Naphthaleno...	108315	036564-42-8	78
3 Naphthalene, 1,2,3,4,4a,7-hexahy...	89391	016728-99-7	72

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 38 at 38.76 min Area: 13556416 Area % 0.38

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	29.97 Zonarene	1051	041929-05-9	93
2	27.97 Amorpha-4,7(11)-diene	1899	486998-53-2	58
3	25.00 Gurjunene<alpha>	764	000489-40-7	55

C:\Database\Wiley275.L

1	EPIZONAREN \$\$ Naphthalene, 1,2,3...	89389	041702-63-0	92
2	.delta.-Cadinene \$\$ Naphthalene, ...	89349	000483-76-1	87
3	.alpha.-Elemene \$\$ Cyclohexene, ...	89176	005951-67-7	83

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 39 at 39.28 min Area: 487432590 Area % 13.55

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.77	Cadina-1(6),4-diene<trans->	1052	020085-11-4	81
2	29.35	Cadinene<gamma->	832	039029-41-9	72
3	27.60	Dauca-5,8-diene	1573	142928-08-3	64

C:\Database\Wiley275.L

1	.delta.-Cadinene	\$\$ Naphthalene,...	89350	000483-76-1	89
2	.delta.-Cadinene	\$\$ Naphthalene,...	89349	000483-76-1	76
3	Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-o...		89408	030021-74-0	76

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 40 at 39.48 min Area: 133443849 Area % 3.71

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	23.49	Copaene<alpha->	828	003856-25-5	93
2	26.64	Muurolo-3,5-diene<cis->	514	157374-44-2	74
3	34.61	Muurolo-3,5-diene<alpha-> (=Torreyol)	1321	019435-97-3	72

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-Copaene	\$\$ Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene...	89530	003856-25-5	96
2	.ALPHA.-COPAENE		89789	000000-00-0	93
3	.alpha.-Copaene	\$\$ Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene...	89527	003856-25-5	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 41 at 39.99 min Area: 608610459 Area % 16.91

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.18	Cadina-1(6),4-diene<cis->	1870	246522-85-0	60
2	28.91	Patchoulene<gamma->	1242	000508-55-4	42
3	30.66	Selina-3,7(11)-diene	133	006813-21-4	41

C:\Database\Wiley275.L

1	T-Muurolol	1-Naphthalenol, 1,...	108318	019912-62-0	93
2	T-Cadinol	1-Naphthalenol, 1,2...	108316	005937-11-1	89
3	.alpha.-cadinol		108443	000481-34-5	83

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 42 at 40.33 min Area: 27120824 Area % 0.75

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	18.87	Ethyl chrysanthemumate<cis->	665	041641-26-3	32
2	24.90	Cycloseychellene	1643	052617-34-2	10
3	30.40	Veltonal<Z->	2029	000000-00-0	9

C:\Database\Wiley275.L

1	6-METHYL-6-(5'METHYL-2'-FURYL)HE...	107629	070412-48-5	46
2	(Z,1'RS,2'SR,3'RS)-4-(2',3',-epo...	108005	097371-46-5	43
3	6-METHYL-6-(5'METHYL-2'-FURYL)HE...	107630	070412-48-5	38

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 43 at 40.53 min Area: 13174096 Area % 0.37

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.91 Muurolene<gamma->	1342	030021-74-0	90
2	31.11 Dauca-4(11),7-diene<trans->	1875	000000-00-0	83
3	29.97 Zonarene	1051	041929-05-9	80

C:\Database\Wiley275.L

1	(-)-ISOLEDENE	89790	000000-00-0	90
2	EPIZONAREN \$\$ Naphthalene, 1,2,3...	89389	041702-63-0	90
3	.alpha.-amorphene \$\$.ALPHA. AMO...	89416	023515-88-0	89

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 44 at 40.77 min Area: 10359067 Area % 0.29

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	34.06	Murola-4,10(14)-dien-1-be...	1716	257293-90-6	30
2	36.82	Calamenen-10-one<10-nor->	1424	057494-10-7	12
3	36.77	Amorpha-4,9-dien-2-ol	1895	394251-66-2	10

C:\Database\Wiley275.L

1	1(5),3-aromadenedradiene \$\$ (1aR...	87328	111778-06-4	43
2	5-ethyl-1,3-dimethylindan \$\$ 1H-...	59453	116384-72-6	35
3	DEHYDROAROMADENDRENE	87306	000000-00-0	27

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 45 at 53.76 min Area: 14603335 Area % 0.41

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L No hits were retrieved.

C:\Database\Wiley275.L

1	1,4-(butanomethano)-5,6,7,8-tetr...	137636	115695-93-7	83
2	1,7-Trimethylene-2,3-dimethylindole	70095	005825-43-4	42
3	2-Pyrimidinamine, 4-methyl-6-phe...	69948	015755-15-4	38

ANEXO III

Exemplo de cromatograma e espectros de massas de
Myrcia splendens (Sw.) DC.

Library Search Report

Data File : C:\MSDCHEM\1\DATA\DIUTURNALII\MFG_1203.D Vial: 6
Acq On : 3 Apr 2008 18:19 Operator:
Sample : MFG 12h 03/12/07 Inst : CG-MS
Misc : Multiplr: 1.00
Sample Amount: 0.00

MS Integration Params: autoint1.e

Method : C:\MSDCHEM\1\METHODS\DEFAULT.M (Chemstation Integrator)

Title :

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 1 at 26.91 min Area: 35098517 Area % 0.36

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	21.77 Elemene<delta->	308	020307-84-0	93
2	26.16 Isobazzanene	1868	088661-59-0	91
3	10.94 Mentha-2,4(8)-diene<para->	586	000586-63-0	76

C:\Database\Wiley275.L

1	2,6,6-TRIMETHYL-1-METHYLEN-CYCLO...	25110	000514-95-4	90
2	.delta.-Elemene \$\$ Cyclohexene, ...	89172	020307-84-0	89
3	.delta.-Elemene \$\$ Cyclohexene, ...	89174	020307-84-0	89

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 2 at 29.00 min Area: 126910330 Area % 1.32

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	24.15 Elemene<beta->	309	000515-13-9	74
2	27.80 Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	70
3	31.11 Dauca-4(11),7-diene<trans->	1875	000000-00-0	47

C:\Database\Wiley275.L

1	.BETA. ELEMENE	89661	000515-13-9	74
2	(-)-.beta.-Elemene \$\$ Cyclohexan...	89179	000515-13-9	62
3	(+)-Aromadendrene \$\$ 1H-Cyclopro...	89471	000489-39-4	58

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 3 at 29.53 min Area: 1190193998 Area % 12.38

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	24.15 Elemene<beta->	309	000515-13-9	92
2	21.37 Limonene aldehyde	1006	006784-13-0	22
3	7.79 Mentha-1(7),8-diene<meta->	1065	013837-95-1	16

C:\Database\Wiley275.L

1	.BETA. ELEMENE	89661	000515-13-9	91
2	.beta.-elemene	89587	000515-13-9	80
3	(-)-.beta.-Elemene \$\$ Cyclohexan...	89182	000515-13-9	55

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 4 at 30.39 min Area: 199295853 Area % 2.07

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	25.95	Gurjunene<beta->	763	017334-55-3	86
2	24.04	Cubebene<beta->	468	013744-15-5	86
3	27.18	Cadina-1(6),4-diene<cis->	1870	246522-85-0	81

C:\Database\Wiley275.L

1		.beta.-cubebene	89691	013744-15-5	96
2		germacrene d	89580	023986-74-5	93
3		GERMACRENE-D	89649	023986-74-5	89

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 5 at 30.78 min Area: 118650222 Area % 1.23

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	25.90 Copaene<beta>	1319	018252-44-3	97
2	28.53 Muurola-4(14),5-diene<trans>	510	054324-03-7	62
3	28.15 Germacrene D	500	023986-74-5	60

C:\Database\Wiley275.L

1	.beta.-cubebene	89691	013744-15-5	95
2	germacrene d	89580	023986-74-5	93
3	BICYCLO[4.4.0]DEC-1-EN, 2-ISOPRO...	89341	000000-00-0	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 6 at 31.01 min Area: 83398542 Area % 0.87

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	26.08 Elemene<gamma->	742	029873-99-2	99
2	31.24 Germacrene B	743	015423-57-1	95
3	10.94 Mentha-2,4(8)-diene<para->	586	000586-63-0	43

C:\Database\Wiley275.L

1	.gamma.-elemene	89583	030824-67-0	99
2	.GAMMA.-ELEMENE \$\$ Cyclohexane, ...	89184	003242-08-8	97
3	Germacrene B (CAS) \$\$ 1,5-Cyclod...	89208	015423-57-1	94

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 7 at 31.40 min Area: 58297042 Area % 0.61

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	28.15	Germacrene D	500	023986-74-5	95
2	27.97	Amorpha-4,7(11)-diene	1899	486998-53-2	89
3	27.18	Cadina-1(6),4-diene<cis->	1870	246522-85-0	81

C:\Database\Wiley275.L

1		GERMACRENE-D	89658	023986-74-5	97
2		germacrene d	89580	023986-74-5	97
3		GERMACRENE-D	89684	023986-74-5	92

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 8 at 31.77 min Area: 113951905 Area % 1.18

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.91 Muurolene<gamma->	1342	030021-74-0	91
2	28.63 Amorphene<gamma->	1320	006980-46-7	52
3	29.35 Cadinene<gamma->	832	039029-41-9	49

C:\Database\Wiley275.L

1	.gamma.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89345	039029-41-9	83
2	Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-o...	89408	030021-74-0	55
3	.alpha.-Humulene \$\$ 1,4,8-Cyclou...	89203	006753-98-6	55

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 9 at 32.16 min Area: 54749284 Area % 0.57

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	28.15	Germacrene D	500	023986-74-5	86
2	26.78	Muurola-3,5-diene<trans->	511	189165-77-3	83
3	29.35	Cadinene<gamma->	832	039029-41-9	76

C:\Database\Wiley275.L

1	germacrene d	89579	023986-74-5	93
2	GERMACRENE-D	89649	023986-74-5	89
3	GERMACRENE-D	89658	023986-74-5	86

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 10 at 32.85 min Area: 644043154 Area % 6.70

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	23.70	Patchoulene<beta->	1240	000514-51-2	64
2	28.74	Selinene<alpha->	421	000473-13-2	64
3	28.75	Pseudowiddrene	1828	032540-28-6	59

C:\Database\Wiley275.L

1	.gamma.-Selinene	\$\$ Naphthalene,...	89382	000515-17-3	93
2	.beta.-Selinene	\$\$ Naphthalene, ...	89379	017066-67-0	91
3	Benzene, tris(1-methylethyl)-	(CAS) ...	89145	027322-34-5	89

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 11 at 33.07 min Area: 758375042 Area % 7.89

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.60 Dauca-5,8-diene	1573	142928-08-3	95
2	27.91 Muurolene<gamma>	1342	030021-74-0	94
3	29.35 Cadinene<gamma>	832	039029-41-9	91

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-amorphene \$\$.ALPHA. AMO...	89415	023515-88-0	94
2	GERMACRENE-D	89684	023986-74-5	93
3	BICYCLO[4.4.0]DEC-1-EN, 2-ISOPRO...	89341	000000-00-0	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 12 at 33.24 min Area: 304800330 Area % 3.17

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	28.37 Selinene<beta->	420	017066-67-0	99
2	26.20 Guaiene<alpha->	831	003691-12-1	98
3	27.80 Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	95

C:\Database\Wiley275.L

1	.BETA.-SELINENE	89676	017066-67-0	99
2	.alpha.-Guaiene \$\$ Azulene, 1,2,...	89280	003691-12-1	98
3	Eremophilene \$\$ Naphthalene, 1,2...	89361	010219-75-7	98

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 13 at 33.59 min Area: 526520872 Area % 5.47

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	28.74 Selinene<alpha->	421	000473-13-2	98
2	23.70 Patchoulene<beta->	1240	000514-51-2	52
3	28.75 Pseudowiddrene	1828	032540-28-6	47

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-selinene	89597	000473-13-2	95
2	.alpha.-selinene	89598	000473-13-2	95
3	4,5-dimethyl-11-methylenetricycl...	89709	086495-16-1	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 14 at 33.75 min Area: 105649716 Area % 1.10

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	28.83 Muurolene<alpha>	907	031983-22-9	98
2	29.97 Zonarene	1051	041929-05-9	94
3	27.97 Amorpha-4,7(11)-diene	1899	486998-53-2	93

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-Muurolene \$\$ Naphthalene...	89427	031983-22-9	93
2	.alpha.-Muurolene \$\$ Naphthalene...	89424	031983-22-9	93
3	.alpha.-cadinene	89612	000000-00-0	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 15 at 34.01 min Area: 142747712 Area % 1.48

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	29.29 Amorphene<delta->	1298	189165-79-5	99
2	29.72 Cadinene<delta->	833	000483-76-1	93
3	27.77 Cadina-1(6),4-diene<trans->	1052	020085-11-4	64

C:\Database\Wiley275.L

1	.delta.-cadinene (armoise-Maroc)...	89582	000483-76-1	98
2	.DELTA.-CADINENE	89652	039029-41-9	98
3	.delta.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89351	000483-76-1	95

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 16 at 34.27 min Area: 75208372 Area % 0.78

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	29.35 Cadinene<gamma->	832	039029-41-9	98
2	28.15 Germacrene D	500	023986-74-5	93
3	27.60 Dauca-5,8-diene	1573	142928-08-3	91

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-amorphene \$\$.ALPHA. AMO...	89416	023515-88-0	96
2	.gamma.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89347	039029-41-9	95
3	.gamma.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89345	039029-41-9	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 17 at 34.72 min Area: 374059023 Area % 3.89

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	29.29 Amorphene<delta->	1298	189165-79-5	99
2	29.72 Cadinene<delta->	833	000483-76-1	87
3	27.77 Cadina-1(6),4-diene<trans->	1052	020085-11-4	70

C:\Database\Wiley275.L

1	.DELTA.-CADINENE	89652	039029-41-9	98
2	.delta.-cadinene (armoise-Maroc)...	89582	000483-76-1	98
3	.delta.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89349	000483-76-1	95

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 18 at 35.18 min Area: 46820912 Area % 0.49

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	28.51 Guaiene<cis-beta->	758	000088-84-6	98
2	25.95 Gurjunene<beta->	763	017334-55-3	90
3	27.97 Amorpha-4,7(11)-diene	1899	486998-53-2	89

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-Gurjunene \$\$ 1H-Cyclopro...	89463	000489-40-7	95
2	Cadinene \$\$ Naphthalene, 1,2,4a,...	89343	000523-47-7	95
3	Naphthalene, 1,2,4a,5,8,8a-hexah...	89572	005951-61-1	95

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 19 at 35.26 min Area: 32080055 Area % 0.33

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	28.49	Selinene<delta->	594	028624-28-4	62
2	23.70	Patchoulene<beta->	1240	000514-51-2	50
3	30.45	Dracunculifolliol<10-epi-cis->	630	162657-65-0	49

C:\Database\Wiley275.L

1	.gamma.-Selinene	89384	000515-17-3	87
2	.beta.-Maaliene	89490	000489-29-2	58
3	.beta.-patchoulene	89589	000514-51-2	50

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 20 at 35.64 min Area: 40592997 Area % 0.42

The 3 best hits from each library.

	Ref#	CAS#	Qual

C:\Database\HPCH2205.L			
1 30.72 Hedycaryol	1803	021657-90-9	91
2 30.78 Elemol	918	000639-99-6	91
3 34.04 Eremoligenol	1292	010219-71-3	86
C:\Database\Wiley275.L			
1 elemol	108450	000639-99-6	91
2 Elemol \$\$ Cyclohexanemethanol, 4...	108218	000639-99-6	90
3 .alpha.-amorphene \$\$.ALPHA. AMO...	89416	023515-88-0	64

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 21 at 36.55 min Area: 43823116 Area % 0.46

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	36.63	Zizanal	1558	082509-29-3	37
2	43.54	Cedranediol<8S,14->	944	062600-05-9	25
3	28.75	Pseudowiddrene	1828	032540-28-6	23

C:\Database\Wiley275.L

1	6-Aza-1,2,3,3a-tetrahydropyrrolo...	73349	000000-00-0	43
2	thiotepa \$\$ 1,1',1''-phosphinothi...	73158	000000-00-0	38
3	Pyrido[3,4-d]pyrimidin-4(3H)-one...	73343	022378-52-5	27

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 22 at 36.77 min Area: 77658371 Area % 0.81

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	25.23	Davanafuran<cis-threo->	197	056586-07-3	42
2	33.61	Junenol	1641	000472-07-1	18
3	29.62	Bazzanene<beta->	1872	076231-80-6	16

C:\Database\Wiley275.L

1		Butanamide, N-(4-hydroxyphenyl)-...	63341	000101-91-7	59
2		BUTYRL-P-AMINO PHENOL (SOLID PROBE)	63405	000000-00-0	59
3		(exo)-1-(hydroxymethyl)-2-vinyl-...	28225	000000-00-0	59

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 23 at 36.91 min Area: 53669650 Area % 0.56

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.80	Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	93
2	28.66	Valencene	1528	004630-07-3	83
3	24.92	Longifolene	1027	000475-20-7	76

C:\Database\Wiley275.L

1	Ledene \$\$ 1H-Cycloprop[e]azulene...	89487	021747-46-6	97
2	.gamma.-Selinene \$\$ Naphthalene,...	89383	000515-17-3	95
3	.delta.-gurjunene	89592	000000-00-0	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 24 at 37.06 min Area: 65385705 Area % 0.68

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	20.14	Carvacrol	1507	000499-75-2	43
2	29.12	Silphiperfolan-6-alpha-ol	641	203714-22-1	43
3	19.71	Thymol	1504	000089-83-8	37

C:\Database\Wiley275.L

1	1-VINYL-2,6,6-TRIMETHYLCYCLOHEX-...	36235	005293-90-3	70
2	Phenol, 2-methyl-5-(1-methylethy...	35738	000499-75-2	53
3	Phenol, 2-methyl-5-(1-methylethy...	35744	000499-75-2	53

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 25 at 37.26 min Area: 93002132 Area % 0.97

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.75	Neocallitropsene<alpha->	1871	090025-12-0	78
2	27.91	Muurolene<gamma->	1342	030021-74-0	70
3	25.00	Gurjunene<alpha->	764	000489-40-7	64

C:\Database\Wiley275.L

1	.delta.-cadinene (armoise-Maroc)...	89582	000483-76-1	91
2	.delta.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89352	000483-76-1	83
3	.alpha.-Gurjunene \$\$ 1H-Cyclopro...	89462	000489-40-7	70

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 26 at 37.63 min Area: 52190613 Area % 0.54

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCHE2205.L

1	32.89	Rosifoliol	1595	063891-61-2	32
2	40.86	Cryptomeridiol	499	004666-84-6	25
3	17.19	Thymol, methyl ether	1506	001076-56-8	25

C:\Database\Wiley275.L

1	1H-Indene, 1-ethylideneoctahydro...	49570	056324-68-6	60
2	1,2,3,4,5,6-HEXAMETHYL-1,3-CYCLO...	49533	000000-00-0	45
3	2-Isopropyl-1-methoxy-4-methylben...	49497	000000-00-0	35

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 27 at 38.16 min Area: 408238849 Area % 4.24

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.80 Gurjunene<gamma>	762	022567-17-5	87
2	31.11 Dauca-4(11),7-diene<trans>	1875	000000-00-0	72
3	25.00 Gurjunene<alpha>	764	000489-40-7	64

C:\Database\Wiley275.L

1	(+,-)-.beta.-Himachalene \$\$ 1H-B...	89433	017928-54-0	64
2	.alpha.-Gurjunene \$\$ 1H-Cyclopro...	89462	000489-40-7	64
3	.alpha.-Gurjunene \$\$ 1H-Cyclopro...	89465	000489-40-7	50

Unknown Spectrum based on Apex

Scan 2544 (38.272 min): MFG_1203.D

m/z 109.10 100.00%

m/z 161.10 65.98%

m/z 204.20 63.67%

m/z 179.20 46.75%

m/z 189.20 32.83%

Peak Number: 28 at 38.27 min Area: 254876150 Area % 2.65

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	33.61 Junenol	1641	000472-07-1	99
2	28.88 Epizonarene	515	041702-63-0	62
3	27.91 Muurolene<gamma->	1342	030021-74-0	43

C:\Database\Wiley275.L

1	FONENOL	108376	000000-00-0	95
2	1-Naphthalenol, decahydro-4a-met...	108328	030951-17-8	95
3	FONENOL	108377	000000-00-0	90

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 29 at 38.62 min Area: 88169922 Area % 0.92

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	33.95 Cubenol<1-epi->	255	019912-67-5	98
2	33.60 Cubenol<1,10-di-epi->	1440	073365-77-2	55
3	25.06 Cedrene<alpha->	939	000469-61-4	55

C:\Database\Wiley275.L

1	Naphthalene, 1,2,3,4,4a,7-hexahy...	89391	016728-99-7	90
2	.alpha.-Ylangene \$\$ Tricyclo[4.4...	89523	014912-44-8	80
3	CADINA-1,4-DIENE	89671	000000-00-0	74

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 30 at 38.80 min Area: 262091376 Area % 2.73

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	34.08 Eudesmol<gamma->	921	001209-71-8	99
2	33.77 Eudesmol<10-epi-gamma->	134	015051-81-7	93
3	28.51 Guaiene<cis-beta->	758	000088-84-6	89

C:\Database\Wiley275.L

1	.gamma.-Eudesmol \$\$ 2-Naphthalen...	108344	001209-71-8	98
2	(+)-.delta.-Selinene \$\$ Naphthal...	89385	028624-28-4	95
3	.delta.-selinene	89386	028624-28-4	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 31 at 38.94 min Area: 39957991 Area % 0.42

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.80	Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	70
2	28.91	Patchoulene<gamma->	1242	000508-55-4	64
3	24.92	Longifolene	1027	000475-20-7	60

C:\Database\Wiley275.L

1	.	γ -Gurjunene \$\$ Azulene, 1,...	89271	022567-17-5	96
2		Juniper camphor \$\$ 1-Naphthaleno...	108321	000473-04-1	91
3		Isolongifolene \$\$ 2H-2,4a-Methan...	89403	001135-66-6	83

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 32 at 39.19 min Area: 663545937 Area % 6.90

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	29.35	Cadinene<gamma->	832	039029-41-9	81
2	27.77	Cadina-1(6),4-diene<trans->	1052	020085-11-4	74
3	23.49	Copaene<alpha->	828	003856-25-5	70

C:\Database\Wiley275.L

1	.delta.-Cadinene	\$\$ Naphthalene,...	89350	000483-76-1	90
2	.delta.-Cadinene	\$\$ Naphthalene,...	89359	000483-76-1	90
3	.alpha.-cadinol		108443	000481-34-5	89

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 33 at 39.99 min Area: 1893187022 Area % 19.69

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	27.91	Murolene<gamma->	1342	030021-74-0	46
2	27.97	Amorpha-4,7(11)-diene	1899	486998-53-2	45
3	24.62	Sibirene	1853	014029-18-6	45

C:\Database\Wiley275.L

1	.	alpha.-cadinol	108443	000481-34-5	83
2		LONGIBORN-9-ENE \$\$ 1,4-Methanoaz...	89278	061262-67-7	81
3		T-Cadinol \$\$ 1-Naphthalenol, 1,2...	108316	005937-11-1	78

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 34 at 40.14 min Area: 69275328 Area % 0.72

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	29.05	Premnaspirodien	1661	082189-85-3	70
2	39.48	Cyclocolorenone<epi->	1804	001911-75-7	58
3	36.56	Cyperotundone	1854	003466-15-7	50

C:\Database\Wiley275.L

1		HYMENOQUINONE-DIACETATE \$\$ 2,5-C...	207862	062750-99-6	93
2		Valerenal	103808	004176-16-3	89
3		Valerenal	103806	004176-16-3	89

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 35 at 40.36 min Area: 163283611 Area % 1.70

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	24.90 Cycloseychellene	1643	052617-34-2	38
2	18.87 Ethyl chrysanthemumate<cis->	665	041641-26-3	16
3	19.18 Ethyl chrysanthemumate<tra...	666	041641-25-2	10

C:\Database\Wiley275.L

1	(E)-2-METHYL-4-(2',6',6'-TRIMETH...	91671	059744-11-5	30
2	Ethyl chrysanthemumate \$\$ Cyclop...	80712	000097-41-6	27
3	Allethrine \$\$ Cyclopropanecarbox...	179980	000584-79-2	27

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 36 at 40.56 min Area: 70753356 Area % 0.74

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	29.97 Zonarene	1051	041929-05-9	86
2	24.62 Sibirene	1853	014029-18-6	83
3	24.04 Cubebene<beta->	468	013744-15-5	46

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-amorphene \$\$.ALPHA. AMO...	89416	023515-88-0	84
2	.gamma.-Selinene \$\$ Naphthalene,...	89383	000515-17-3	64
3	BICYCLO[4.4.0]DEC-1-EN, 2-ISOPRO...	89341	000000-00-0	60

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 37 at 40.80 min Area: 74972516 Area % 0.78

The 3 best hits from each library.

C:\Database\HPC2205.L

	Ref#	CAS#	Qual
1 29.05 Premnaspirodiene	1661	082189-85-3	55
2 36.27 Eudesma-4(15),7-dien-1-bet...	1428	119120-23-9	38
3 34.06 Muurola-4,10(14)-dien-1-be...	1716	257293-90-6	25

C:\Database\Wiley275.L

	Ref#	CAS#	Qual
1 DEHYDROAROMADENDRENE	87306	000000-00-0	45
2 Valerenal	103808	004176-16-3	43
3 (+)-.gamma.-Costal \$\$ 2-Naphthal...	103737	065018-13-5	35

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 38 at 41.12 min Area: 46800454 Area % 0.49

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	28.74	Selinene<alpha->	421	000473-13-2	78
2	25.00	Gurjunene<alpha->	764	000489-40-7	64
3	31.11	Dauca-4(11),7-diene<trans->	1875	000000-00-0	64

C:\Database\Wiley275.L

1		4,5-dimethyl-11-methylenetricycl...	89709	086495-16-1	93
2		CADINENE	89785	000000-00-0	91
3		Naphthalene, 1,2,4a,5,8,8a-hexah...	89571	005951-61-1	91

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 39 at 41.57 min Area: 46385135 Area % 0.48

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	30.88	Occidentalol	1197	000473-17-6	42
2	39.79	Hinesol acetate	819	088494-77-3	38
3	29.29	Amorphene<delta->	1298	189165-79-5	25

C:\Database\Wiley275.L

1	(3E,5E,8Z)-3,7,11-Trimethyl-1,3,...	87262	073368-16-8	70
2	.BETA.-CARYOPHYLLENE	89657	000087-44-5	45
3	4,4-Dimethyl-3-(3-methyl-2-buten...	87274	079718-86-8	38

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 40 at 42.00 min Area: 41929209 Area % 0.44

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	39.49	Amorpha-4,7(11)-diene<2-al...	2195	000000-00-0	83
2	31.18	Silphiperfol-5-en-3-ol A	211	138752-19-9	49
3	38.40	Costol<gamma->	1729	065018-14-6	43

C:\Database\Wiley275.L

1		3-hydroxy-2-(cyclohex-1'-enyl)-5...	105537	093719-18-7	90
2		2-hexyl-1-decen-3-yne \$\$ 7-Penta...	106195	069520-29-2	90
3		1.BETA.,3.ALPHA.,8.BETA.-TRIMETH...	105961	065388-25-2	46

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 41 at 42.22 min Area: 33722398 Area % 0.35

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	26.78	Muurola-3,5-diene<trans>	511	189165-77-3	84
2	29.97	Zonarene	1051	041929-05-9	83
3	35.07	Valerianol	136	020489-45-6	58

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-Elemene	\$\$ Cyclohexene, ...	89176	005951-67-7	90
2	Isolongifolene	\$\$ 2H-2,4a-Methan...	89404	001135-66-6	70
3	valencene	1	89600	046030-07-3	64

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 42 at 53.77 min Area: 42921068 Area % 0.45

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L No hits were retrieved.

C:\Database\Wiley275.L

1	9,10-Anthracenedione, 1-ethoxy- ...	137286	022924-20-5	90
2	2-Pyrimidinamine, 4-methyl-6-phe...	69948	015755-15-4	38
3	1,7-Trimethylene-2,3-dimethylindole	70095	005825-43-4	38

ANEXO IV

Exemplo de cromatograma e espectros de massas de
Myrcia macrocarpa DC.

Library Search Report

Data File : C:\MSDCHEM\1\DATA\AMANDA\SAZONAL2008\SOUZA224.D Vial: 1
Acq On : 12 Mar 2008 13:25 Operator:
Sample : MACRO Inst : CG-MS
Misc : Multiplr: 1.00
Sample Amount: 0.00

MS Integration Params: autoint1.e

Method : C:\MSDCHEM\1\METHODS\DEFAULT.M (Chemstation Integrator)

Title :

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 1 at 8.90 min Area: 90155144 Area % 28.86

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	5.85	Pinene<alpha->	912	000080-56-8	94
2	5.53	Tricyclene	913	000508-32-7	87
3	8.10	Carene<delta-3->	1655	013466-78-9	87

C:\Database\Wiley275.L

1	.ALPHA.-PINENE, (-)-	\$\$ Bicyclo[...	25199	000080-56-8	97
2	.ALPHA.-PINENE	\$\$ DIHYDRO-para-C...	25368	000080-56-8	97
3	.alpha.-pinene	\$\$.alpha.-pinene	25312	000080-56-8	95

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 2 at 10.58 min Area: 32799200 Area % 10.50

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	7.04 Pinene<beta->	305	000127-91-3	95
2	8.70 Phellandrene<beta->	161	000555-10-2	90
3	6.91 Sabinene	304	003387-41-5	87

C:\Database\Wiley275.L

1	.BETA.-PINENE	25357	000127-91-3	95
2	.beta.-PINENE \$\$ 2(10)-PINENE	25369	000127-91-3	95
3	sabinene	25339	003387-41-5	94

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 3 at 11.36 min Area: 4529138 Area % 1.45

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	8.70	Phellandrene<beta->	161	000555-10-2	78
2	7.04	Pinene<beta->	305	000127-91-3	58
3	5.62	Thujene<alpha->	911	002867-05-2	53

C:\Database\Wiley275.L

1	MYRCENE	25355	000123-35-3	95
2	.beta.-Myrcene \$\$ 1,6-Octadiene,...	24949	000123-35-3	91
3	.beta.-Myrcene \$\$ 1,6-Octadiene,...	24942	000123-35-3	91

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 4 at 12.38 min Area: 7041677 Area % 2.25

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	8.30	Terpinene<alpha->	900	000099-86-5	86
2	8.03	Sylvestrene<iso->	1066	000499-03-6	80
3	10.94	Mentha-2,4(8)-diene<para->	586	000586-63-0	64

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-terpinolene	25090	000586-62-9	96
2	.alpha.-Terpinene	24989	000099-86-5	94
3	.alpha.-Terpinene	24982	000099-86-5	94

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 5 at 12.89 min Area: 12133772 Area % 3.88

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	8.70 Phellandrene<beta->	161	000555-10-2	76
2	6.91 Sabinene	304	003387-41-5	68
3	7.04 Pinene<beta->	305	000127-91-3	59

C:\Database\Wiley275.L

1	BETA-PHELLANDRENE	25395	000000-00-0	90
2	.BETA.-PINENE	25411	000000-00-0	81
3	sabinene	25339	003387-41-5	81

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 6 at 14.29 min Area: 10241514 Area % 3.28

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	9.78 Terpinene<gamma->	994	000099-85-4	97
2	5.53 Tricyclene	913	000508-32-7	90
3	7.85 Phellandrene<alpha->	159	000099-83-2	87

C:\Database\Wiley275.L

1	.GAMMA.-TERPINENE	25353	000099-85-4	96
2	.gamma.-terpinene	25327	000099-85-4	95
3	.gamma.-terpinene	25328	000099-85-4	95

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 7 at 15.63 min Area: 3206492 Area % 1.03

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	10.98	Terpinolene	916	000586-62-9	94
2	21.77	Elemene<delta->	308	020307-84-0	64
3	7.84	Carene<delta-2->	355	000554-61-0	64

C:\Database\Wiley275.L

1	TERPINOLENE	\$\$	PARA-MENTHA-1,4(8...	25375	000586-62-9	97
2	terpinolene			25330	000586-62-9	96
3	TERPINOLENE			25393	000586-62-9	95

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 8 at 17.13 min Area: 1063156 Area % 0.34

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	8.70 Phellandrene<beta->	161	000555-10-2	43
2	10.98 Terpinolene	916	000586-62-9	43
3	9.78 Terpinene<gamma->	994	000099-85-4	43

C:\Database\Wiley275.L

1	sabinene	25338	003387-41-5	64
2	Tricyclene \$\$ Tricyclo[2.2.1.0(2...	25280	000508-32-7	49
3	.DELTA.-4-CARENE \$\$ Bicyclo[4.1....	25240	000554-61-0	46

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 9 at 19.69 min Area: 20025455 Area % 6.41

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	14.66	Terpinen-4-ol	910	000562-74-3	94
2	33.47	Davanol D1(isomer 1)	559	000000-00-0	32
3	11.32	Linalool	307	000078-70-6	32

C:\Database\Wiley275.L

1	TERPINEOL-4	40615	000562-74-3	96
2	3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1...	40158	000562-74-3	94
3	TERPINEN-4-OL	40552	000562-74-3	94

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 10 at 20.32 min Area: 3684068 Area % 1.18

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	5.85	Pinene<alpha>	912	000080-56-8	59
2	10.98	Terpinolene	916	000586-62-9	58
3	6.22	Fenchene<alpha>	895	000471-84-1	50

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-Terpinene	24978	000099-86-5	76
2	.ALPHA.-PINENE, (-)-	25205	000080-56-8	76
3	.DELTA.-4-CARENE	25240	000554-61-0	68

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 11 at 26.89 min Area: 4734170 Area % 1.52

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	29.31	Alaskene<alpha->	616	028400-12-6	42
2	15.73	Terpineol<gamma->	1527	000586-81-2	38
3	13.20	Ocimene<neo-allo->	1198	003016-19-1	37

C:\Database\Wiley275.L

1	bicyclogermacrene	89616	100762-46-7	90
2	artemisia triene	25342	018383-70-5	76
3	Camphene	25309	000079-92-5	62

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 12 at 29.25 min Area: 1752081 Area % 0.56

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	24.15 Elemene<beta>	309	000515-13-9	91
2	43.54 Cedranediol<8S,14>	944	062600-05-9	32
3	27.04 Prenyl limonene<trans>	1348	135267-19-5	27

C:\Database\Wiley275.L

1	1,5-Cycloundecadiene, 8,8-dimeth...	74784	062338-54-9	60
2	.BETA. ELEMENE	89661	000515-13-9	58
3	Camphene \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptan...	25156	000079-92-5	53

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 13 at 30.30 min Area: 2890289 Area % 0.93

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	25.00 Gurjunene<alpha>	764	000489-40-7	95
2	28.49 Selinene<delta>	594	028624-28-4	91
3	27.97 Amorpha-4,7(11)-diene	1899	486998-53-2	50

C:\Database\Wiley275.L

1	(-)-ARISTOLENE	89773	000000-00-0	93
2	.alpha.-Gurjunene \$\$ 1H-Cyclopro...	89467	000489-40-7	90
3	.alpha.-Gurjunene \$\$ 1H-Cyclopro...	89464	000489-40-7	90

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 14 at 30.97 min Area: 1003402 Area % 0.32

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	26.08 Elemene<gamma->	742	029873-99-2	94
2	28.83 Bicyclogermacrene	1359	024703-35-3	91
3	27.59 Macrocarpene<alpha->	1918	847374-79-2	37

C:\Database\Wiley275.L

1	.GAMMA.-ELEMENE \$\$ Cyclohexane, ...	89185	003242-08-8	86
2	Germacrene B (CAS) \$\$ 1,5-Cyclod...	89208	015423-57-1	83
3	Germacrene B (CAS) \$\$ 1,5-Cyclod...	89207	015423-57-1	83

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 15 at 31.12 min Area: 1108563 Area % 0.35

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	28.37 Selinene<beta->	420	017066-67-0	96
2	28.51 Guaiene<cis-beta->	758	000088-84-6	68
3	28.83 Muurolene<alpha->	907	031983-22-9	64

C:\Database\Wiley275.L

1	Aromadendrene	89476	000489-39-4	90
2	.beta.-Guaiene \$\$ Azulene, 1,2,3...	89286	000088-84-6	89
3	.GAMMA.-GURJUNENE	89782	000000-00-0	89

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 16 at 32.01 min Area: 1347978 Area % 0.43

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	24.92	Longifolene	1027	000475-20-7	81
2	28.66	Valencene	1528	004630-07-3	76
3	28.37	Selinene<beta->	420	017066-67-0	74

C:\Database\Wiley275.L

1	Alloaromadendrene \$\$ 1H-Cyclopro...	89480	025246-27-9	97
2	ALLOAROMADENDRENE	89772	000000-00-0	97
3	ARISTOLEN \$\$ aristolene	89492	027862-07-3	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 17 at 32.59 min Area: 1320220 Area % 0.42

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.77 Cadina-1(6),4-diene<trans->	1052	020085-11-4	93
2	29.72 Cadinene<delta->	833	000483-76-1	81
3	27.18 Cadina-1(6),4-diene<cis->	1870	246522-85-0	64

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-Elemene \$\$ Cyclohexene, ...	89176	005951-67-7	87
2	.beta.-cadinene	89610	000523-47-7	83
3	EPIZONAREN \$\$ Naphthalene, 1,2,3...	89389	041702-63-0	83

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 18 at 32.71 min Area: 873595 Area % 0.28

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	27.91	Muurolene<gamma->	1342	030021-74-0	91
2	28.63	Amorphene<gamma->	1320	006980-46-7	89
3	29.35	Cadinene<gamma->	832	039029-41-9	89

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-amorphene \$\$.ALPHA. AMO...	89412	023515-88-0	94
2	Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-o...	89408	030021-74-0	93
3	.alpha.-amorphene \$\$.ALPHA. AMO...	89415	023515-88-0	90

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 19 at 32.85 min Area: 4413418 Area % 1.41

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	28.15	Germacrene D	500	023986-74-5	93
2	24.04	Cubebene<beta->	468	013744-15-5	93
3	27.60	Dauca-5,8-diene	1573	142928-08-3	91

C:\Database\Wiley275.L

1	germacrene d	89579	023986-74-5	97
2	GERMACRENE-D	89649	023986-74-5	97
3	GERMACRENE-D	89684	023986-74-5	97

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 20 at 33.04 min Area: 2074256 Area % 0.66

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	29.97 Zonarene	1051	041929-05-9	95
2	27.97 Amorpha-4,7(11)-diene	1899	486998-53-2	91
3	30.33 Cadinene<alpha->	947	082468-90-4	87

C:\Database\Wiley275.L

1	.beta.-cadinene	89610	000523-47-7	93
2	.alpha.-amorphene \$\$.ALPHA. AMO...	89413	023515-88-0	91
3	.alpha.-amorphene \$\$.ALPHA. AMO...	89414	023515-88-0	91

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 21 at 33.31 min Area: 3976097 Area % 1.27

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	24.54 Cyperene	829	002387-78-2	93
2	27.97 Amorpha-4,7(11)-diene	1899	486998-53-2	90
3	27.18 Cadina-1(6),4-diene<cis->	1870	246522-85-0	89

C:\Database\Wiley275.L

1	Isolongifolene \$\$ 2H-2,4a-Methan...	89400	001135-66-6	93
2	ISOLONGIFOLENE	89771	000000-00-0	91
3	Naphthalene, 1,2,4a,5,8,8a-hexah...	89572	005951-61-1	90

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 22 at 33.49 min Area: 10280391 Area % 3.29

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	28.83 Bicyclogermacrene	1359	024703-35-3	97
2	31.11 Dauca-4(11),7-diene<trans->	1875	000000-00-0	93
3	29.97 Zonarene	1051	041929-05-9	80

C:\Database\Wiley275.L

1	GERMACRENE B	89664	015423-57-1	94
2	bicyclogermacrene \$\$ Bicyclo[8.1...	89615	100762-46-7	93
3	BICYCLOGERMACRENE	89653	024703-35-3	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 23 at 33.65 min Area: 1602544 Area % 0.51

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	28.91	Patchoulene<gamma>	1242	000508-55-4	90
2	30.66	Selina-3,7(11)-diene	133	006813-21-4	76
3	29.97	Zonarene	1051	041929-05-9	76

C:\Database\Wiley275.L

1	6,10,11,11-TETRAMETHYL-TRICYCLO[...	89475	000489-39-4	93
2	.alpha.-Gurjunene \$\$ 1H-Cyclopro...	89461	000489-40-7	92
3	.alpha.-Muurolene \$\$ Naphthalene...	89424	031983-22-9	90

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 24 at 33.96 min Area: 1330556 Area % 0.43

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	29.29 Amorphene<delta>	1298	189165-79-5	93
2	29.97 Zonarene	1051	041929-05-9	81
3	28.88 Epizonarene	515	041702-63-0	72

C:\Database\Wiley275.L

1	.beta.-cadinene	89610	000523-47-7	93
2	EPIZONAREN \$\$ Naphthalene, 1,2,3...	89389	041702-63-0	93
3	.alpha.-Elemene \$\$ Cyclohexene, ...	89176	005951-67-7	91

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 25 at 34.60 min Area: 7690986 Area % 2.46

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	29.72	Cadinene<delta->	833	000483-76-1	80
2	27.91	Murolene<gamma->	1342	030021-74-0	70
3	27.97	Amorpha-4,7(11)-diene	1899	486998-53-2	62

C:\Database\Wiley275.L

1		.beta.-cadinene	89610	000523-47-7	96
2		.delta.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89349	000483-76-1	95
3		.delta.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89358	000483-76-1	94

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 26 at 35.60 min Area: 7633097 Area % 2.44

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	30.78 Elemol	918	000639-99-6	91
2	30.72 Hedycaryol	1803	021657-90-9	90
3	30.03 Bisabolene<(E)-gamma->	357	053585-13-0	52

C:\Database\Wiley275.L

1	elemol	108450	000639-99-6	91
2	VALENCENE	89599	046030-07-3	53
3	(-)-DEHYDROAROMADENDRANE	89777	000000-00-0	52

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 27 at 36.22 min Area: 1175344 Area % 0.38

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.80	Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	83
2	28.68	Viridiflorene	6	021747-46-6	58
3	24.92	Longifolene	1027	000475-20-7	49

C:\Database\Wiley275.L

1	Junipene	\$\$ 1,4-Methanoazulene, ...	89310	000475-20-7	86
2	Ledene	\$\$ 1H-Cycloprop[e]azulene...	89487	021747-46-6	83
3	Eremophilene	\$\$ Naphthalene, 1,2...	89361	010219-75-7	78

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 28 at 36.63 min Area: 11478818 Area % 3.67

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	36.27	Eudesma-4(15),7-dien-1-bet...	1428	119120-23-9	22
2	36.82	Calamenen-10-one<10-nor->	1424	057494-10-7	22
3	38.78	Amorpha-4,9-diene<7,14-anh...	1896	394251-67-3	16

C:\Database\Wiley275.L

1	1-Fluoromethyl-3-nitronaphthalen...	90022	055831-01-1	50
2	6-ethyl-1,3-dimethylindan-5-carb...	87218	000000-00-0	41
3	N-(1-Methyl-3-oxobutylidene)-4-m...	90178	000000-00-0	38

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 29 at 36.86 min Area: 6060034 Area % 1.94

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.80 Gurjunene<gamma>	762	022567-17-5	98
2	28.37 Selinene<beta>	420	017066-67-0	93
3	28.66 Valencene	1528	004630-07-3	91

C:\Database\Wiley275.L

1	VALENCENE	89662	004630-07-3	96
2	Ledene \$\$ 1H-Cycloprop[e]azulene...	89487	021747-46-6	95
3	.delta.-gurjunene	89592	000000-00-0	95

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 30 at 37.16 min Area: 6536194 Area % 2.09

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

- 1 27.91 Muurolene<gamma->
- 2 25.95 Gurjunene<beta->
- 3 28.51 Guaiene<cis-beta->

1342 030021-74-0 86
763 017334-55-3 83
758 000088-84-6 83

C:\Database\Wiley275.L

- 1 viridiflorol
- 2 VIRIDIFLOROL
- 3 .GAMMA.-GURJUNENE

108383 000552-02-3 95
108486 000552-02-3 95
89782 000000-00-0 94

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 31 at 37.45 min Area: 7276107 Area % 2.33

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	32.92 Guaiol	760	000489-86-1	99
2	27.60 Dauca-5,8-diene	1573	142928-08-3	83
3	35.29 Eudesmol<7-epi-alpha->	137	123123-38-6	59

C:\Database\Wiley275.L

1	Calarene \$\$ 1H-Cyclopropa[a]naph...	89500	017334-55-3	95
2	(+)-CALARENE OR (+)-.BETA.-GURJU...	89775	000000-00-0	95
3	Calarene \$\$ 1H-Cyclopropa[a]naph...	89496	017334-55-3	86

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 32 at 37.59 min Area: 4351150 Area % 1.39

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	30.66	Selina-3,7(11)-diene	133	006813-21-4	50
2	27.80	Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	49
3	26.20	Guaiene<alpha->	831	003691-12-1	38

C:\Database\Wiley275.L

1	Patchoulene (CAS) \$\$ PATCHOULENE...	89328	001405-16-9	95
2	ARISTOLEN \$\$ aristolene	89493	027862-07-3	94
3	.gamma.-Selinene \$\$ Naphthalene,...	89383	000515-17-3	89

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 33 at 38.19 min Area: 3063286 Area % 0.98

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	28.51 Guaiene<cis-beta>	758	000088-84-6	95
2	28.66 Valencene	1528	004630-07-3	94
3	24.54 Cyperene	829	002387-78-2	83

C:\Database\Wiley275.L

1	Cadinene \$\$ Naphthalene, 1,2,4a,...	89343	000523-47-7	93
2	Naphthalene, 1,2,4a,5,8,8a-hexah...	89572	005951-61-1	93
3	.delta.-selinene	89388	028624-28-4	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 34 at 38.69 min Area: 7994130 Area % 2.56

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	34.08 Eudesmol<gamma>	921	001209-71-8	95
2	33.77 Eudesmol<10-epi-gamma>	134	015051-81-7	90
3	23.70 Patchoulene<beta>	1240	000514-51-2	86

C:\Database\Wiley275.L

1	.beta.-patchoulene	89590	000514-51-2	93
2	.alpha.-selinene	89597	000473-13-2	91
3	.beta.-Patchoulene \$\$ 4,7-Methan...	89326	000514-51-2	91

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 35 at 39.09 min Area: 5470439 Area % 1.75

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	26.64 Muurola-3,5-diene<cis->	514	157374-44-2	92
2	29.35 Cadinene<gamma->	832	039029-41-9	89
3	27.60 Dauca-5,8-diene	1573	142928-08-3	70

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-cadinol	108443	000481-34-5	90
2	Torreyol \$\$ 1-Naphthalenol, 1,2,...	108312	019435-97-3	89
3	Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-o...	89407	030021-74-0	89

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 36 at 39.35 min Area: 5495163 Area % 1.76

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	40.86	Cryptomeridiol	499	004666-84-6	47
2	32.89	Rosifoliol	1595	063891-61-2	38
3	17.61	Carvacrol, methyl ether	1503	006379-73-3	30

C:\Database\Wiley275.L

1	1H-Indene, 1-ethylideneoctahydro...	49571	056324-69-7	64
2	.beta.-Eudesmol \$\$ 2-Naphthalene...	108343	000473-15-4	53
3	1-chloro-4-methyl-1-boraindane	48626	108593-95-9	53

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 37 at 39.47 min Area: 10028981 Area % 3.21

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	34.08	Eudesmol<gamma->	921	001209-71-8	83
2	24.92	Longifolene	1027	000475-20-7	83
3	28.51	Guaiene<cis-beta->	758	000088-84-6	55

C:\Database\Wiley275.L

1	.gamma.-Selinene \$\$ Naphthalene,...	89383	000515-17-3	95
2	.GAMMA.-GURJUNENE	89782	000000-00-0	91
3	CADINENE	89785	000000-00-0	90

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 38 at 40.02 min Area: 4593918 Area % 1.47

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	34.08	Eudesmol<gamma>	921	001209-71-8	86
2	33.77	Eudesmol<10-epi-gamma>	134	015051-81-7	86
3	26.92	Patchoulene<alpha>	1241	000560-32-7	86

C:\Database\Wiley275.L

1	Ledene \$\$ 1H-Cycloprop[e]azulene...	89483	021747-46-6	89
2	Ledene \$\$ 1H-Cycloprop[e]azulene...	89487	021747-46-6	87
3	Calarene \$\$ 1H-Cyclopropa[a]naph...	89497	017334-55-3	86

ANEXO V

Exemplo de cromatograma e espectros de massas de
Myrciaria floribunda O. Berg.

Library Search Report

Data File : C:\MSDCHEM\1\DATA\MYRCIARIA FLORIBUNDA ESTAT\BRU205.D Vial: 2

Acq On : 23 Sep 2008 16:24

Operator:

Sample : Myrciaria floribunda

Inst : CG-MS

Misc :

Multiplr: 1.00

Sample Amount: 0.00

MS Integration Params: autoint1.e

Method : C:\MSDCHEM\1\METHODS\DEFAULT.M (Chemstation Integrator)

Title :

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 1 at 30.29 min Area: 64173765 Area % 7.96

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	25.36 Caryophyllene(E-)	830	000087-44-5	99
2	24.95 Caryophyllene<Z->	386	000118-65-0	89
3	28.66 Valencene	1528	004630-07-3	70

C:\Database\Wiley275.L

1	.BETA.-CARYOPHYLLENE	89657	000087-44-5	99
2	.beta.-CARYOPHYLLENE	89707	000087-44-5	98
3	Aromadendrene	89577	000489-39-4	91

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 2 at 34.06 min Area: 20113931 Area % 2.50

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

Rank	Compound	Ref#	CAS#	Qual
1	29.03 Farnesene<(E,E)-alpha->	184	000502-61-4	91
2	29.40 Bisabolene<(Z)-gamma->	358	013062-00-5	74
3	27.04 Prenyl limonene<trans->	1348	135267-19-5	60

C:\Database\Wiley275.L

Rank	Compound	Ref#	CAS#	Qual
1	E,E-.ALPHA.-FARNESENE	89675	000502-61-4	96
2	Farnesene \$\$ 1,3,6,10-Dodecatetr...	89120	000502-61-4	95
3	Farnesene \$\$ 1,3,6,10-Dodecatetr...	89119	000502-61-4	93

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 3 at 36.63 min Area: 63508274 Area % 7.88

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	29.88	Macrocarpene<ar->	1923	847374-83-8	58
2	36.82	Calamenen-10-one<10-nor->	1424	057494-10-7	43
3	20.96	Cycloisolongifolene<didehy...	536	074842-33-4	38

C:\Database\Wiley275.L

1	9,10-DEHYDRO-ISOLONGIFOLENE	87289	000000-00-0	93
2	CYCLOISOLONGIFOLENE	87307	000000-00-0	76
3	[3S-(3.alpha.,3a.alpha.,6.alpha....	87287	091466-54-5	70

Unknown Spectrum based on Apex

Scan 2436 (36.820 min): BRU205.D

Peak Number: 4 at 36.82 min Area: 133164108 Area % 16.53

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

Rank	Retention Time (min)	Compound Name	Ref#	CAS#	Qual
1	40.15	Isovalencenol<(E)->	2173	022387-74-2	78
2	26.69	Spirolepechinene	1660	246243-00-5	62
3	27.07	Aromadendrene<allo->	467	025246-27-9	60

C:\Database\Wiley275.L

Rank	Retention Time (min)	Compound Name	Ref#	CAS#	Qual
1		(3E,5E,8E)-3,7,11-Trimethyl-1,3,...	87263	073368-17-9	90
2		valencene 1	89600	046030-07-3	90
3		AROMADENDRENE	89682	000489-39-4	86

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 5 at 37.12 min Area: 15247722 Area % 1.89

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	27.80 Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	95
2	29.05 Premnaspirodiene	1661	082189-85-3	93
3	28.92 Guaiene<trans-beta->	759	053863-54-0	93

C:\Database\Wiley275.L

1	valencene 1	89600	046030-07-3	93
2	ARISTOLEN \$\$ aristolene	89492	027862-07-3	93
3	Alloaromadendrene \$\$ 1H-Cyclopro...	89480	025246-27-9	91

Unknown Spectrum based on Apex

Scan 2490 (37.546 min): BRU205.D

Peak Number: 6 at 37.55 min Area: 12636705 Area % 1.57

The 3 best hits from each library.

Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	26.69 Spirolepechinene	1660	246243-00-5	46
2	26.20 Guaiene<alpha->	831	003691-12-1	38
3	22.18 Silphinene	2167	074284-57-4	38

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-Guaiene \$\$ Azulene, 1,2,...	89284	003691-12-1	80
2	.ALPHA.-GUAIONE	89767	000000-00-0	59
3	.alpha.-Guaiene \$\$ Azulene, 1,2,...	89282	003691-12-1	56

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 7 at 38.80 min Area: 13149156 Area % 1.63

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPC2205.L

1	20.96 Cycloisolongifolene<didehy...	536	074842-33-4	46
2	38.78 Amorpha-4,9-diene<7,14-anh...	1896	394251-67-3	38
3	29.35 Cycloisolongifol-5-ol<trans>	535	074841-81-9	37

C:\Database\Wiley275.L

1	4,4-Dimethyl-3-(3-methyl-3-buten...	87275	079718-83-5	91
2	8,9-DEHYDRO-NEOISOLONGIFOLENE	87290	000000-00-0	89
3	trans-2,7,7.beta.-trimethyl-6-me...	87324	122211-53-4	50

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 8 at 38.90 min Area: 11996655 Area % 1.49

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	30.11	Calamenene<cis->	346	072937-55-4	49
2	22.77	Silphiperfol-4,7(14)-diene	638	210637-49-3	46
3	29.69	Calamenene<trans->	345	073209-42-4	45

C:\Database\Wiley275.L

1	1H-Cyclopropa[a]naphthalene, 1a,...	87309	034143-96-9	89
2	1H-Cyclopropa[a]naphthalene, 1a,...	87308	034143-96-9	87
3	CIS-.ALPHA.-COPAENE-8-OL \$\$ Tric...	105957	058569-25-8	87

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 9 at 39.05 min Area: 16494561 Area % 2.05

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.91	Muurolene<gamma->	1342	030021-74-0	91
2	28.63	Amorphene<gamma->	1320	006980-46-7	78
3	27.18	Cadina-1(6),4-diene<cis->	1870	246522-85-0	70

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-amorphene \$\$.ALPHA. AMO...	89416	023515-88-0	92
2	Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-o...	89407	030021-74-0	92
3	.DELTA.-CADINENE	89787	000000-00-0	91

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 10 at 39.51 min Area: 21791538 Area % 2.70

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	27.91 Muurolene<gamma->	1342	030021-74-0	96
2	27.77 Cadina-1(6),4-diene<trans->	1052	020085-11-4	93
3	29.72 Cadinene<delta->	833	000483-76-1	93

C:\Database\Wiley275.L

1	.alpha.-amorphene \$\$.ALPHA. AMO...	89412	023515-88-0	93
2	.delta.-Cadinene \$\$ Naphthalene,...	89359	000483-76-1	93
3	6,10,11,11-TETRAMETHYL-TRICYCLO[...]	89475	000489-39-4	90

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 11 at 40.32 min Area: 408878645 Area % 50.75

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1 35.47 Phloroacetophenone<2,4-dim... 1841 000090-24-4 97

C:\Database\Wiley275.L

1 1-(2,3-dihydroxy-4-methoxy-6-met... 80229 127940-12-9 83

2 curvulol \$\$ (+-)-1,3-dihydro-6-m... 80230 127996-97-8 78

3 2-Hydroxy-4,5-dimethoxyacetophen... 80188 020628-06-2 72

Unknown Spectrum based on Apex

Peak Number: 12 at 40.69 min Area: 24587593 Area % 3.05

The 3 best hits from each library. Ref# CAS# Qual

C:\Database\HPCH2205.L

1	30.11 Calamenene<cis->	346	072937-55-4	46
2	29.69 Calamenene<trans->	345	073209-42-4	46
3	36.82 Calamenen-10-one<10-nor->	1424	057494-10-7	30

C:\Database\Wiley275.L

1	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-...	87295	000483-77-2	46
2	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-...	87296	000483-77-2	30
3	.ALPHA.-CALACORENE	85545	021391-99-1	27

ANEXO VI

Exemplo de relatório de comparação de espectros de
massas de *Calypttranthes lucida* Mart. ex DC. com
espectros do banco de dados

Information from Data File:

File: C:\MSDCHEM\1\DATA\DEZ19\CA48_07.D
 Operator:
 Date Acquired: 19 Dec 2008 12:59
 Method File: AMANDA
 Sample Name: C LUCIDA
 Misc Info:
 Vial Number: 3

Search Libraries: C:\Database\HPCH2205.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\Wiley275.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	12.88	0.86	C:\Database\HPCH2205.L 8.76 Cineole<1,8->	160	000470-82-6	44
2	28.49	1.16	C:\Database\HPCH2205.L 23.49 Copaene<alpha-> 30.11 Calamenene<cis-> 22.33 Cubebene<alpha->	828 346 826	003856-25-5 072937-55-4 017699-14-8	91 90 46
3	30.27	1.77	C:\Database\HPCH2205.L 25.36 Caryophyllene(E-) 24.95 Caryophyllene<Z-> 24.64 Longipinene<beta->	830 386 1033	000087-44-5 000118-65-0 041432-70-6	99 90 86
4	33.02	5.71	C:\Database\HPCH2205.L 28.37 Selinene<beta-> 31.24 Germacrene B 26.20 Guaiene<alpha->	420 743 831	017066-67-0 015423-57-1 003691-12-1	97 93 91
5	33.38	2.16	C:\Database\HPCH2205.L 27.82 Chamigrene<beta->: 28.37 Selinene<beta-> 26.69 Spirolepechinene	943 420 1660	018431-82-8 017066-67-0 246243-00-5	90 83 76
6	34.53	0.81	C:\Database\HPCH2205.L 29.69 Calamenene<trans-> 36.82 Calamenen-10-one<10-nor-> 36.27 Eudesma-4(15),7-dien-1-be...	345 1424 1428	073209-42-4 057494-10-7 119120-23-9	91 11 9
7	36.69	10.21	C:\Database\HPCH2205.L 27.38 Thujopsadiene 29.88 Macrocarpene<ar-> 22.77 Silphiperfol-4,7(14)-diene	850 1923 638	051446-91-4 847374-83-8 210637-49-3	53 50 49
8	36.85	19.30	C:\Database\HPCH2205.L 40.15 Isovalencenol<(E)-> 28.15 Germacrene D 34.42 Aromadendrene epoxide-<al...	2173 500 107	022387-74-2 023986-74-5 085760-81-2	90 86 50
9	36.97	1.52	C:\Database\HPCH2205.L 30.11 Calamenene<cis-> 29.69 Calamenene<trans-> 39.64 Muurolene<14-hydroxy-alpha->	346 345 928	072937-55-4 073209-42-4 135118-51-3	64 58 38
10	37.13	0.71	C:\Database\HPCH2205.L 26.20 Guaiene<alpha-> 27.07 Aromadendrene<allo-> 27.91 Muurolene<gamma->	831 467 1342	003691-12-1 025246-27-9 030021-74-0	94 91 50
11	37.21	0.91	C:\Database\HPCH2205.L 24.90 Cycloseychellene 37.06 Thujopsenal 24.05 Bourbonene<beta->	1643 1887 653	052617-34-2 000470-41-7 005208-59-3	70 37 32
12	37.59	2.25	C:\Database\HPCH2205.L 27.75 Neocallitropsene<alpha-> 28.51 Guaiene<cis-beta-> 27.07 Aromadendrene<allo->	1871 758 467	090025-12-0 000088-84-6 025246-27-9	89 89 78
13	37.79	1.84	C:\Database\HPCH2205.L 26.20 Guaiene<alpha-> 19.94 Perilla alcohol 11.45 Pinene oxide<alpha->	831 1265 1302	003691-12-1 000536-59-4 001686-14-2	45 45 43

14	37.94	3.57	C:\Database\HPCH2205.L 29.05 Premnaspirodiene 26.69 Spirolepechinene 28.68 Viridiflorene	1661 082189-85-3 94 1660 246243-00-5 47 6 021747-46-6 46
15	38.58	9.28	C:\Database\HPCH2205.L 30.62 Calacorene<alpha-> 31.43 Calacorene<beta-> 29.48 Himachalene<alpha-dehydro...	1344 021391-99-1 45 1345 050277-34-4 35 241 078204-62-3 25
16	38.69	2.77	C:\Database\HPCH2205.L 33.20 Atlantol<beta-> 40.15 Isovalencenol<(E)-> 35.53 Caryophyllene<14-hydroxy-...	252 038142-56-2 47 2173 022387-74-2 45 383 079768-25-5 37
17	38.85	9.46	C:\Database\HPCH2205.L 29.35 Cycloisolongifol-5-ol<tra... 35.45 Caryophyllene<14-hydroxy-... 33.20 Atlantol<beta->	535 074841-81-9 55 1736 078683-81-5 52 252 038142-56-2 49
18	39.07	3.62	C:\Database\HPCH2205.L 27.77 Cadina-1(6),4-diene<trans-> 29.29 Amorphene<delta-> 29.03 Cuprenene<alpha->	1052 020085-11-4 95 1298 189165-79-5 92 835 029621-78-1 80
19	39.23	1.65	C:\Database\HPCH2205.L 27.91 Muurolene<gamma-> 23.48 Isoledene 28.63 Amorphene<gamma->	1342 030021-74-0 90 866 095910-36-4 89 1320 006980-46-7 70
20	39.51	5.31	C:\Database\HPCH2205.L 27.77 Cadina-1(6),4-diene<trans-> 25.00 Gurjunene<alpha-> 29.97 Zonarene	1052 020085-11-4 97 764 000489-40-7 96 1051 041929-05-9 95
21	39.64	4.68	C:\Database\HPCH2205.L 38.78 Amorpha-4,9-diene<7,14-an... 35.53 Caryophyllene<14-hydroxy-... 33.20 Atlantol<beta->	1896 394251-67-3 43 383 079768-25-5 42 252 038142-56-2 40
22	40.14	5.42	C:\Database\HPCH2205.L 22.77 Silphiperfol-4,7(14)-diene 20.96 Cycloisolongifolene<dideh... 38.78 Amorpha-4,9-diene<7,14-an...	638 210637-49-3 49 536 074842-33-4 37 1896 394251-67-3 25
23	40.25	1.18	C:\Database\HPCH2205.L 35.80 Cadalene 39.66 Guaiazulene	1343 000483-78-3 96 757 000489-84-9 90
24	40.42	1.59	C:\Database\HPCH2205.L 31.02 Vetivenene<beta-> 40.15 Isovalencenol<(E)-> 22.77 Silphiperfol-4,7(14)-diene	1952 027840-40-0 49 2173 022387-74-2 45 638 210637-49-3 41
25	40.64	1.29	C:\Database\HPCH2205.L 36.27 Eudesma-4(15),7-dien-1-be... 36.77 Amorpha-4,9-dien-2-ol 29.69 Calamenene<trans->	1428 119120-23-9 45 1895 394251-66-2 38 345 073209-42-4 38
26	40.77	0.99	C:\Database\HPCH2205.L 33.20 Atlantol<beta-> 22.77 Silphiperfol-4,7(14)-diene 28.53 Vetispirorene<beta->	252 038142-56-2 62 638 210637-49-3 60 1566 028908-27-2 49

ANEXO VII

Exemplo de relatório de comparação de espectros de massas de *Eugenia cuprea* (O. Berg) Nied. com espectros do banco de dados

Information from Data File:

File: C:\MSDCHEM\1\DATA\DEZ15\I338_04.D
Operator:
Date Acquired: 15 Dec 2008 11:23
Method File: AMANDA
Sample Name: E cuprea 2004 Ilha
Misc Info:
Vial Number: 2

Search Libraries: C:\Database\HPCH2205.L Minimum Quality: 0
C:\Database\Wiley275.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex

Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	28.54	12.10	C:\Database\HPCH2205.L			
		23.49	Copaene<alpha->	828	003856-25-5	97
		30.11	Calamenene<cis->	346	072937-55-4	95
		29.69	Calamenene<trans->	345	073209-42-4	94
2	28.85	0.32	C:\Database\HPCH2205.L			
		24.05	Bourbonene<beta->	653	005208-59-3	22
3	29.21	0.46	C:\Database\HPCH2205.L			
			No matches found			
4	29.90	0.45	C:\Database\HPCH2205.L			
			No matches found			
5	30.33	10.19	C:\Database\HPCH2205.L			
		25.36	Caryophyllene(E-)	830	000087-44-5	99
		24.95	Caryophyllene<Z->	386	000118-65-0	90
		27.33	Caryophyllene<9-epi-(E)->	1360	068832-35-9	64
6	31.08	1.25	C:\Database\HPCH2205.L			
		26.27	Aromadendrene	997	000489-39-4	99
		27.07	Aromadendrene<allo->	467	025246-27-9	94
		27.32	Acoradiene<alpha->	892	024048-44-0	84
7	31.68	2.12	C:\Database\HPCH2205.L			
		26.82	Humulene<alpha->	827	006753-98-6	98
		29.09	Bisabolene<(Z)-alpha->	1221	070332-15-9	55
		24.19	Sesquithujene<7-epi->	1291	159407-35-9	50
8	31.98	4.29	C:\Database\HPCH2205.L			
		27.33	Caryophyllene<9-epi-(E)->	1360	068832-35-9	99
		27.07	Aromadendrene<allo->	467	025246-27-9	99
		29.05	Premnaspirodien	1661	082189-85-3	93
9	32.68	0.83	C:\Database\HPCH2205.L			
		29.35	Cadinene<gamma->	832	039029-41-9	95
		28.63	Amorphene<gamma->	1320	006980-46-7	86
		27.60	Dauca-5,8-diene	1573	142928-08-3	83
10	32.81	1.21	C:\Database\HPCH2205.L			
		24.04	Cubebene<beta->	468	013744-15-5	70
		27.77	Cadina-1(6),4-diene<trans->	1052	020085-11-4	60
		27.60	Dauca-5,8-diene	1573	142928-08-3	55
11	33.10	0.79	C:\Database\HPCH2205.L			
		24.64	Longipinen<beta->	1033	041432-70-6	78
		27.16	Aromadendrane<dehydro->	198	085048-01-7	76
		27.80	Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	70
12	33.50	10.30	C:\Database\HPCH2205.L			
		28.92	Guaiene<trans-beta->	759	053863-54-0	95
		27.80	Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	86
		29.05	Premnaspirodien	1661	082189-85-3	78
13	33.63	0.62	C:\Database\HPCH2205.L			
		28.83	Murolene<alpha->	907	031983-22-9	98
		28.13	Amorphene<alpha->	1316	020085-19-2	91
		27.77	Cadina-1(6),4-diene<trans->	1052	020085-11-4	89
14	34.02	1.11	C:\Database\HPCH2205.L			
		29.04	Bisabolene<beta->	466	000495-61-4	99
		25.10	Bergamotene<alpha-cis->	995	018252-46-5	50
		26.44	Prenyl limonene<cis->	1347	135267-20-8	45

15	34.16	0.36	C:\Database\HPCH2205.L 22.33 Cubebene<alpha-> 27.91 Muurolene<gamma-> 29.35 Cadinene<gamma->	826 017699-14-8 91 1342 030021-74-0 83 832 039029-41-9 64
16	34.59	7.51	C:\Database\HPCH2205.L 29.29 Amorphene<delta-> 29.72 Cadinene<delta-> 27.77 Cadina-1(6),4-diene<trans->	1298 189165-79-5 98 833 000483-76-1 96 1052 020085-11-4 93
17	35.27	0.48	C:\Database\HPCH2205.L 30.62 Calacorene<alpha-> 31.43 Calacorene<beta-> 29.48 Himachalene<alpha-dehydro...	1344 021391-99-1 70 1345 050277-34-4 52 241 078204-62-3 37
18	36.17	0.65	C:\Database\HPCH2205.L 28.66 Valencene 28.91 Patchoulene<gamma-> 27.80 Gurjunene<gamma->	1528 004630-07-3 91 1242 000508-55-4 91 762 022567-17-5 91
19	36.27	0.69	C:\Database\HPCH2205.L 22.41 Longipinene<alpha-> 25.86 Thujopsene<cis-> 25.10 Bergamotene<alpha-cis->	1032 005989-08-2 90 941 000470-40-6 66 995 018252-46-5 55
20	36.74	24.46	C:\Database\HPCH2205.L 29.88 Macrocarpene<ar-> 22.77 Silphiperfol-4,7(14)-diene 29.35 Cycloisolongifol-5-ol<tra...	1923 847374-83-8 70 638 210637-49-3 60 535 074841-81-9 60
21	36.89	6.47	C:\Database\HPCH2205.L 29.05 Premnaspirodien 27.80 Gurjunene<gamma-> 27.33 Caryophyllene<9-epi-(E)->	1661 082189-85-3 94 762 022567-17-5 87 1360 068832-35-9 58
22	37.16	1.48	C:\Database\HPCH2205.L 28.51 Guaiene<cis-beta-> 25.00 Gurjunene<alpha-> 28.91 Patchoulene<gamma->	758 000088-84-6 96 764 000489-40-7 93 1242 000508-55-4 93
23	37.24	0.53	C:\Database\HPCH2205.L 26.27 Aromadendrene 28.88 Epizonarene 21.70 Presilphiperfol-7-ene	997 000489-39-4 56 515 041702-63-0 56 636 080931-09-5 55
24	37.56	1.70	C:\Database\HPCH2205.L 27.80 Gurjunene<gamma-> 28.51 Guaiene<cis-beta-> 28.92 Guaiene<trans-beta->	762 022567-17-5 95 758 000088-84-6 93 759 053863-54-0 86
25	37.80	0.56	C:\Database\HPCH2205.L 8.73 Sylvestrene 38.78 Amorpha-4,9-diene<7,14-an... 40.01 Bisabolenol<beta->	1453 001461-27-4 27 1896 394251-67-3 18 1132 147126-90-7 18
26	37.92	0.68	C:\Database\HPCH2205.L 22.77 Silphiperfol-4,7(14)-diene 36.82 Calamenen-10-one<10-nor-> 29.35 Cycloisolongifol-5-ol<tra...	638 210637-49-3 64 1424 057494-10-7 38 535 074841-81-9 35
27	38.31	0.43	C:\Database\HPCH2205.L 31.11 Dauca-4(11),7-diene<trans-> 27.97 Amorpha-4,7(11)-diene 23.48 Isoledene	1875 000000-00-0 64 1899 486998-53-2 60 866 095910-36-4 60
28	38.55	1.21	C:\Database\HPCH2205.L 31.43 Calacorene<beta-> 30.62 Calacorene<alpha-> 29.48 Himachalene<alpha-dehydro...	1345 050277-34-4 43 1344 021391-99-1 43 241 078204-62-3 41
29	38.92	1.42	C:\Database\HPCH2205.L 29.88 Macrocarpene<ar-> 29.35 Cycloisolongifol-5-ol<tra... 20.96 Cycloisolongifolene<dideh...	1923 847374-83-8 38 535 074841-81-9 38 536 074842-33-4 35
30	39.07	1.45	C:\Database\HPCH2205.L 23.48 Isoledene 27.91 Muurolene<gamma-> 30.33 Cadinene<alpha->	866 095910-36-4 91 1342 030021-74-0 90 947 082468-90-4 78

31	39.21	0.28	C:\Database\HPCH2205.L			
			28.63 Amorphenes<gamma->	1320	006980-46-7	91
			27.97 Amorpho-4,7(11)-diene	1899	486998-53-2	78
			27.77 Cadina-1(6),4-diene<trans->	1052	020085-11-4	58
32	39.51	1.09	C:\Database\HPCH2205.L			
			27.91 Muurolene<gamma->	1342	030021-74-0	96
			24.62 Sibirene	1853	014029-18-6	89
			27.77 Cadina-1(6),4-diene<trans->	1052	020085-11-4	83
33	40.05	0.57	C:\Database\HPCH2205.L			
			38.78 Amorpha-4,9-diene<7,14-an...	1896	394251-67-3	51
			30.11 Calamenene<cis->	346	072937-55-4	45
			22.77 Silphiperfol-4,7(14)-diene	638	210637-49-3	43
34	40.11	0.59	C:\Database\HPCH2205.L			
			38.78 Amorpha-4,9-diene<7,14-an...	1896	394251-67-3	64
			20.96 Cycloisolongifolene<dideh...	536	074842-33-4	46
			38.75 Curcumen-12-ol<beta-(Z)->	1880	698365-10-5	37
35	40.64	0.65	C:\Database\HPCH2205.L			
			36.82 Calamenen-10-one<10-nor->	1424	057494-10-7	12
			38.78 Amorpha-4,9-diene<7,14-an...	1896	394251-67-3	10
			34.06 Muurola-4,10(14)-dien-1-b...	1716	257293-90-6	10
36	46.32	0.70	C:\Database\HPCH2205.L			
			28.64 Tridecanone<2->	924	000593-08-8	35
			19.90 Undecanone<2->	1525	000112-12-9	12
			15.38 Decanone<2->	575	000693-54-9	12

ANEXO VIII

Exemplo de relatório de comparação de espectros de
massas de *Marlierea racemosa* (Vell.) Kiaersk. com
espectros do banco de dados

Information from Data File:

File: C:\MSDCHEM\1\DATA\CORD2828.D
 Operator:
 Date Acquired: 7 Nov 2005 10:47
 Method File: OL_ESSA
 Sample Name: Marlierea racemosa
 Misc Info:
 Vial Number: 1

Search Libraries: C:\Database\HPCH2205.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\Wiley275.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	4.82	0.64	C:\Database\HPCH2205.L			
		32.45	Allo-hedycaryol	1856	106972-93-4	14
		3.72	Pentanone<4-hydroxy-4-meth...	1750	000123-42-2	4
		22.83	Hydroxy citronellol	825	000107-74-4	4
2	8.43	10.55	C:\Database\HPCH2205.L			
		5.85	Pinene<alpha->	912	000080-56-8	94
		5.53	Tricyclene	913	000508-32-7	87
		8.10	Carene<delta-3->	1655	013466-78-9	87
3	8.84	1.58	C:\Database\HPCH2205.L			
		6.44	Thuja-2,4(10)-diene	361	036262-09-6	94
		19.73	Sabinyol acetate<trans-> (...)	1368	053833-85-5	42
		6.67	Verbenene	906	004080-46-0	22
4	9.65	1.05	C:\Database\HPCH2205.L			
		7.04	Pinene<beta->	305	000127-91-3	94
		5.53	Tricyclene	913	000508-32-7	91
		8.70	Phellandrene<beta->	161	000555-10-2	68
5	10.20	0.47	C:\Database\HPCH2205.L			
		8.59	Cymene<ortho->	1529	000527-84-4	64
		11.86	Menthatriene<1,3,8-para->	1236	018368-95-1	64
		6.67	Verbenene	906	004080-46-0	59
6	10.75	0.60	C:\Database\HPCH2205.L			
		11.86	Menthatriene<1,3,8-para->	1236	018368-95-1	95
		6.67	Verbenene	906	004080-46-0	78
		8.53	Cymene<para->	306	000099-87-6	58
7	11.48	1.83	C:\Database\HPCH2205.L			
		8.59	Cymene<ortho->	1529	000527-84-4	95
		8.53	Cymene<para->	306	000099-87-6	94
		32.17	Tumerol<ar->	524	038142-57-3	64
8	11.86	0.68	C:\Database\HPCH2205.L			
		8.69	Limonene	164	000138-86-3	97
		8.73	Sylvestrene	1453	001461-27-4	47
		27.57	Cumacrene	2194	847374-84-9	45
9	13.39	0.44	C:\Database\HPCH2205.L			
		3.03	Cyclohexene<3-methylene->	2201	001888-90-0	43
		2.81	Cyclohexadiene<2-methyl-1,3->	2199	001489-57-2	43
		2.90	Cyclohexadiene<1-methyl-1,3->	2200	001489-56-1	32
10	13.98	0.87	C:\Database\HPCH2205.L			
		12.46	Campholenal<alpha->	903	004501-58-0	38
		11.98	Camphenol<6->	618	003570-04-5	38
		24.92	Barbatene<alpha->	1808	053060-59-6	28
11	14.15	0.47	C:\Database\HPCH2205.L			
		11.09	Cymenene<para->	427	001195-32-0	95
		10.82	Cymenene<meta->	426	001124-20-5	91
		11.44	Dimethyl styrene<2,5->	612	027576-03-0	38
12	15.54	2.46	C:\Database\HPCH2205.L			
		12.46	Campholenal<alpha->	903	004501-58-0	91
		27.05	Rotundene	1843	065128-08-7	42
		11.32	Camphenone<6->	617	053803-33-1	38
13	16.40	3.44	C:\Database\HPCH2205.L			
		13.10	Sabinol<trans-> (trans fo...	1367	029606-76-6	47
		19.73	Sabinyol acetate<trans-> (...)	1368	053833-85-5	12
		14.57	Pinocamphone<cis->	1306	015358-88-0	9

14	16.59	2.12	C:\Database\HPCH2205.L 36.34 Botrydiol 13.22 Verbenol<trans-> 14.32 Mentha-1,5-dien-8-ol<para->	1578 067996-32-1 50 1539 001820-09-3 42 901 001686-20-0 38
15	16.90	4.49	C:\Database\HPCH2205.L 13.22 Verbenol<trans-> 14.32 Mentha-1,5-dien-8-ol<para-> 2.90 Cyclohexadiene<1-methyl-1,3->	1539 001820-09-3 43 901 001686-20-0 43 2200 001489-56-1 38
16	17.06	1.43	C:\Database\HPCH2205.L 14.07 Pinocarvone 14.38 Umbellulone 8.77 Benzyl alcohol	410 016812-40-1 96 1518 024545-81-1 25 288 000100-51-6 10
17	17.37	1.40	C:\Database\HPCH2205.L 14.32 Mentha-1,5-dien-8-ol<para-> 3.03 Cyclohexene<3-methylene-> 2.81 Cyclohexadiene<2-methyl-1,3->	901 001686-20-0 81 2201 001888-90-0 46 2199 001489-57-2 46
18	17.50	1.35	C:\Database\HPCH2205.L 14.32 Mentha-1,5-dien-8-ol<para-> 3.03 Cyclohexene<3-methylene-> 2.81 Cyclohexadiene<2-methyl-1,3->	901 001686-20-0 91 2201 001888-90-0 50 2199 001489-57-2 50
19	17.80	5.33	C:\Database\HPCH2205.L 14.32 Mentha-1,5-dien-8-ol<para-> 2.90 Cyclohexadiene<1-methyl-1,3-> 40.60 Santalol acetate<(Z)-epi-...	901 001686-20-0 72 2200 001489-56-1 70 1394 075992-90-4 50
20	18.28	1.16	C:\Database\HPCH2205.L 13.47 Eucarvone 19.76 Terpinen-7-al<gamma-> 9.92 Benzene methanol<alpha-met...	1793 000503-93-5 47 1340 022580-90-1 35 274 000098-85-1 32
21	18.47	2.99	C:\Database\HPCH2205.L 19.74 Cymen-7-ol<para-> 15.56 Myrtenal 31.49 Ionone<dimethyl->	546 000536-60-7 45 1125 000564-94-3 43 847 068555-94-2 38
22	18.94	3.60	C:\Database\HPCH2205.L 15.97 Verbenone 15.07 Cyclopent-2-enone<5-methy... 28.00 Ionone<methyl-gamma->	1550 000080-57-9 92 2092 000000-00-0 43 845 101325-32-0 35
23	19.17	4.74	C:\Database\HPCH2205.L 15.55 Myrtenol 8.77 Benzyl alcohol 10.30 Mentha-3,8-diene<para->	1124 000515-00-4 93 288 000100-51-6 50 587 000586-67-4 37
24	19.99	1.87	C:\Database\HPCH2205.L 16.44 Carveol<trans-> 7.45 Cineole<dehydro-1,8-> 27.08 Ionol<alpha-isomethyl-(E)->	370 001197-07-5 95 227 066113-06-2 43 2109 449207-78-7 38
25	20.53	0.56	C:\Database\HPCH2205.L 17.53 Carvone 9.50 Methyl-2-cyclohexen-1-one<3-> 12.27 Isophorone	371 000099-49-0 96 1693 001193-18-6 9 968 000078-59-1 4
26	31.38	1.73	C:\Database\HPCH2205.L 27.96 Curcumene<ar-> 35.89 Helifolenol B 29.53 Nootkatene	1379 000644-30-4 43 771 000000-00-0 38 1569 005090-61-9 32
27	31.91	0.84	C:\Database\HPCH2205.L 28.83 Bicyclogermacrene 29.40 Bisabolene<(Z)-gamma-> 31.24 Germacrene B	1359 024703-35-3 99 358 013062-00-5 70 743 015423-57-1 64
28	33.00	0.56	C:\Database\HPCH2205.L 29.29 Amorphene<delta-> 29.72 Cadinene<delta-> 29.97 Zonarene	1298 189165-79-5 99 833 000483-76-1 94 1051 041929-05-9 78
29	33.41	0.88	C:\Database\HPCH2205.L 30.62 Calacorene<alpha-> 31.43 Calacorene<beta-> 35.51 Calamenen-10-ol<trans->	1344 021391-99-1 97 1345 050277-34-4 94 1427 123931-36-2 30

30	33.73	0.65	C:\Database\HPCH2205.L					
			34.42 Aromadendrene epoxide-<al...	107	085760-81-2	78		
			32.16 Caryophyllene oxide	834	001139-30-6	62		
			35.45 Caryophyllene<14-hydroxy-...	1736	078683-81-5	50		
31	34.68	5.46	C:\Database\HPCH2205.L					
			31.96 Spathulenol	998	006750-60-3	99		
			33.20 Atlantol<beta->	252	038142-56-2	30		
			40.14 Acetoxyelemol<8-alpha->	933	041370-57-4	25		
32	35.19	16.20	C:\Database\HPCH2205.L					
			31.96 Spathulenol	998	006750-60-3	99		
			40.14 Acetoxyelemol<8-alpha->	933	041370-57-4	32		
			24.05 Isocomene<alpha->	200	065372-78-3	22		
33	35.27	1.77	C:\Database\HPCH2205.L					
			31.96 Spathulenol	998	006750-60-3	70		
			22.77 Silphiperfol-4,7(14)-diene	638	210637-49-3	32		
			38.78 Amorpha-4,9-diene<7,14-an...	1896	394251-67-3	27		
34	35.34	1.22	C:\Database\HPCH2205.L					
			28.68 Viridiflorene	6	021747-46-6	96		
			27.80 Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	95		
			32.50 Globulol	1867	051371-47-2	89		
35	35.50	0.63	C:\Database\HPCH2205.L					
			32.58 Viridiflorol	5	000552-02-3	98		
			32.50 Globulol	1867	051371-47-2	98		
			27.80 Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	93		
36	35.57	0.49	C:\Database\HPCH2205.L					
			26.16 Humulene<beta->	469	000116-04-1	47		
			30.03 Bisabolene<(E)-gamma->	357	053585-13-0	27		
			39.03 Acoradienol<beta->	1130	149496-35-5	25		
37	35.66	0.47	C:\Database\HPCH2205.L					
			40.15 Isovalencenol<(E)->	2173	022387-74-2	86		
			31.96 Spathulenol	998	006750-60-3	51		
			29.00 Cuparene	937	016982-00-6	35		
38	35.72	0.57	C:\Database\HPCH2205.L					
			34.42 Aromadendrene epoxide-<al...	107	085760-81-2	42		
			29.65 Ionone<6-methyl-alpha->	846	000079-69-6	38		
			34.95 Thujopsanone<3->	562	025966-79-4	27		
39	35.91	1.39	C:\Database\HPCH2205.L					
			40.15 Isovalencenol<(E)->	2173	022387-74-2	47		
			31.96 Spathulenol	998	006750-60-3	47		
			17.00 Mentha-1(7),8-dien-2-ol<c...	1072	022626-43-3	42		
40	36.12	0.46	C:\Database\HPCH2205.L					
			36.77 Amorpha-4,9-dien-2-ol	1895	394251-66-2	38		
			39.64 Muurolene<14-hydroxy-alpha->	928	135118-51-3	30		
			27.32 Acoradiene<alpha->	892	024048-44-0	25		
41	36.75	1.63	C:\Database\HPCH2205.L					
			33.95 Cubenol<1-epi->	255	019912-67-5	97		
			28.51 Guaiene<cis-beta->	758	000088-84-6	95		
			33.60 Cubenol<1,10-di-epi->	1440	073365-77-2	78		
42	36.87	0.62	C:\Database\HPCH2205.L					
			30.05 Dauca-4(11),8-diene	1575	395070-76-5	16		
			24.93 Acora-3,7(14)-diene	1921	055732-78-0	9		
			15.57 Anisaldehyde<meta->	167	000591-31-1	4		
43	37.04	1.72	C:\Database\HPCH2205.L					
			27.96 Curcumene<ar->	1379	000644-30-4	44		
			27.52 Acoradiene<beta->	282	028477-64-7	41		
			30.14 Cuprenene<gamma->	1873	004895-23-2	35		
44	37.24	1.02	C:\Database\HPCH2205.L					
			27.75 Neocallitropsene<alpha->	1871	090025-12-0	76		
			21.70 Presilphiperfol-7-ene	636	080931-09-5	46		
			34.91 Himachalol	246	001891-45-8	41		
45	37.30	0.54	C:\Database\HPCH2205.L					
			23.48 Isoledene	866	095910-36-4	86		
			29.72 Cadinene<delta->	833	000483-76-1	62		
			26.39 Guaiadiene<6,9->	1795	037839-64-8	55		

46	37.43	0.65	C:\Database\HPCH2205.L			
			37.28 Nootkatol	1771	050763-67-2	52
			36.18 Germacra-4(15),5,10(14)-t...	1718	081968-62-9	52
			35.95 Khusinol	970	024268-34-6	47
47	37.71	1.36	C:\Database\HPCH2205.L			
			34.54 Selina-3,11-dien-6-alpha-ol	1404	038142-38-0	66
			30.45 Dracunculifoliol<10-epi-c...	630	162657-65-0	38
			30.50 Dracunculifoliol<cis->	629	164984-39-8	38
48	38.08	1.61	C:\Database\HPCH2205.L			
			35.83 Mustakone	1842	001209-91-2	99
			21.37 Silphiperfol-5-ene	635	138752-24-6	35
			16.64 Coahuilensol, methyl ether	2089	072473-09-7	10
49	38.20	1.42	C:\Database\HPCH2205.L			
			35.80 Cadalene	1343	000483-78-3	90
			34.42 Aromadendrene epoxide-<al...	107	085760-81-2	53
			36.18 Germacra-4(15),5,10(14)-t...	1718	081968-62-9	27

ANEXO IX

Exemplo de relatório de comparação de espectros de
massas de *Myrceugenia myrcioides* (Cambess.) com
espectros do banco de dados

Information from Data File:

File: C:\MSDCHEM\1\DATA\AMANDA\CORD2820.D
 Operator:
 Date Acquired: 26 Sep 2005 15:20
 Method File: OL_ESSA
 Sample Name: M_myrcioides
 Misc Info:
 Vial Number: 1

Search Libraries: C:\Database\HPCH2205.L Minimum Quality: 0
 C:\Database\Wiley275.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex

Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	4.80	1.31	C:\Database\HPCH2205.L			
	3.72		Pentanone<4-hydroxy-4-meth...	1750	000123-42-2	64
	4.74		Heptanone<2->	786	000110-43-0	2
	12.35		Octanol acetate<3->	1254	004864-61-3	2
2	8.00	0.47	C:\Database\HPCH2205.L			
	7.85		Phellandrene<alpha->	159	000099-83-2	91
	5.85		Pinene<alpha->	912	000080-56-8	72
	5.62		Thujene<alpha->	911	002867-05-2	62
3	8.32	22.57	C:\Database\HPCH2205.L			
	5.85		Pinene<alpha->	912	000080-56-8	95
	8.10		Carene<delta-3->	1655	013466-78-9	87
	9.78		Terpinene<gamma->	994	000099-85-4	81
4	8.62	0.27	C:\Database\HPCH2205.L			
	6.26		Camphene	914	000079-92-5	83
	10.98		Terpinolene	916	000586-62-9	83
	7.84		Carene<delta-2->	355	000554-61-0	83
5	9.64	4.02	C:\Database\HPCH2205.L			
	7.04		Pinene<beta->	305	000127-91-3	94
	5.53		Tricyclene	913	000508-32-7	91
	5.85		Pinene<alpha->	912	000080-56-8	58
6	10.35	0.47	C:\Database\HPCH2205.L			
	7.04		Pinene<beta->	305	000127-91-3	50
	8.70		Phellandrene<beta->	161	000555-10-2	49
	21.73		Linalool propanoate	1634	000144-39-8	38
7	10.79	6.41	C:\Database\HPCH2205.L			
	7.85		Phellandrene<alpha->	159	000099-83-2	95
	9.78		Terpinene<gamma->	994	000099-85-4	90
	5.62		Thujene<alpha->	911	002867-05-2	74
8	11.49	8.19	C:\Database\HPCH2205.L			
	8.59		Cymene<ortho->	1529	000527-84-4	95
	8.53		Cymene<para->	306	000099-87-6	94
	32.17		Tumerol<ar->	524	038142-57-3	72
9	11.96	18.44	C:\Database\HPCH2205.L			
	8.69		Limonene	164	000138-86-3	97
	8.73		Sylvestrene	1453	001461-27-4	49
	27.57		Cumacrene	2194	847374-84-9	42
10	13.05	0.38	C:\Database\HPCH2205.L			
	9.78		Terpinene<gamma->	994	000099-85-4	95
	7.85		Phellandrene<alpha->	159	000099-83-2	87
	8.70		Phellandrene<beta->	161	000555-10-2	83
11	14.36	0.32	C:\Database\HPCH2205.L			
	10.98		Terpinolene	916	000586-62-9	94
	8.03		Sylvestrene<iso->	1066	000499-03-6	90
	7.84		Carene<delta-2->	355	000554-61-0	72
12	17.96	0.55	C:\Database\HPCH2205.L			
	14.66		Terpinen-4-ol	910	000562-74-3	93
	11.32		Linalool	307	000078-70-6	28
	2.85		Buten-1-ol<3-methyl-2->	325	000556-82-1	27
13	18.48	0.54	C:\Database\HPCH2205.L			
	15.21		Terpineol<alpha->	1517	000098-55-5	90
	5.85		Pinene<alpha->	912	000080-56-8	52
	10.98		Terpinolene	916	000586-62-9	52

14	18.89	0.37	C:\Database\HPCH2205.L 13.10 Sabinol<trans-> (trans fo... 19.73 Sabinyl acetate<trans-> (... 21.29 Myrtenyl acetate	1367 029606-76-6 90 1368 053833-85-5 25 1121 001079-01-2 16
15	22.81	0.42	C:\Database\HPCH2205.L 19.62 Bornyl acetate 17.36 Isobornyl formate 13.87 Isoborneol	314 000076-49-3 70 1442 001200-67-5 52 1441 000124-76-5 37
16	23.28	0.30	C:\Database\HPCH2205.L 24.09 Methyl decyl ketone 11.03 Nonanone<2-> 19.90 Undecanone<2->	2192 006175-49-1 56 1167 000821-55-6 56 1525 000112-12-9 50
17	23.54	0.50	C:\Database\HPCH2205.L 20.14 Carvacrol 22.38 Thymol acetate 23.32 Carvacrol acetate	1507 000499-75-2 93 1227 000528-79-0 90 365 006380-28-5 53
18	23.83	0.33	C:\Database\HPCH2205.L 29.22 Tridecanal 20.45 Undecanal 24.95 Dodecanal	1513 010486-19-8 68 1523 000112-44-7 68 624 000112-54-9 68
19	27.15	5.61	C:\Database\HPCH2205.L 41.97 Isoamyl dodecanoate 26.42 Isoamyl octanoate 30.59 Isoamyl nonanoate	853 006309-51-9 2 1605 002035-99-6 1 1604 007779-70-6 1
20	28.85	1.39	C:\Database\HPCH2205.L 26.69 Spirolepechinene 28.05 Himachalene<gamma-> 28.37 Selinene<beta->	1660 246243-00-5 38 236 053111-25-4 38 420 017066-67-0 38
21	30.15	0.22	C:\Database\HPCH2205.L 26.82 Humulene<alpha-> 21.73 Linalool propanoate 7.89 Mentha-1(7),8-diene<para->	827 006753-98-6 98 1634 000144-39-8 53 796 000499-97-8 50
22	31.82	2.27	C:\Database\HPCH2205.L 28.64 Tridecanone<2-> 19.90 Undecanone<2-> 36.64 Pentadecanone<2->	924 000593-08-8 95 1525 000112-12-9 72 925 002345-28-0 72
23	34.47	0.66	C:\Database\HPCH2205.L 31.96 Spathulenol 39.64 Muurolene<14-hydroxy-alpha-> 29.88 Macrocarpene<ar->	998 006750-60-3 98 928 135118-51-3 22 1923 847374-83-8 20
24	34.68	5.31	C:\Database\HPCH2205.L 33.20 Atlantol<beta-> 39.64 Muurolene<14-hydroxy-alpha-> 27.96 Curcumene<ar->	252 038142-56-2 22 928 135118-51-3 22 1379 000644-30-4 15
25	34.80	2.18	C:\Database\HPCH2205.L 32.16 Caryophyllene oxide 15.47 Dihydro carveol<neo-> 27.16 Aromadendrane<dehydro->	834 001139-30-6 76 600 018675-33-7 49 198 085048-01-7 49
26	34.96	0.47	C:\Database\HPCH2205.L 32.58 Viridiflorol 28.68 Viridiflorene 27.80 Gurjunene<gamma->	5 000552-02-3 99 6 021747-46-6 98 762 022567-17-5 98
27	35.07	0.28	C:\Database\HPCH2205.L 31.47 Dodecanoic acid 19.77 Tridecene<1-> 7.39 Decene<1->	625 000143-07-7 80 899 002437-56-1 38 1219 000872-05-9 38
28	35.26	2.47	C:\Database\HPCH2205.L 41.97 Isoamyl dodecanoate 30.59 Isoamyl nonanoate 26.42 Isoamyl octanoate	853 006309-51-9 2 1604 007779-70-6 1 1605 002035-99-6 1
29	35.69	0.71	C:\Database\HPCH2205.L 17.00 Mentha-1(7),8-dien-2-ol<c... 37.23 Cedroxyde 33.20 Humulene epoxide II	1072 022626-43-3 53 411 013786-79-3 46 931 019888-34-7 38

30	36.73	0.30	C:\Database\HPCH2205.L				
			30.05 Dauca-4(11),8-diene	1575	395070-76-5	17	
			24.93 Acora-3,7(14)-diene	1921	055732-78-0	16	
			33.20 Atlantol<beta->	252	038142-56-2	14	
31	36.85	1.09	C:\Database\HPCH2205.L				
			27.96 Curcumene<ar->	1379	000644-30-4	44	
			29.53 Nootkatene	1569	005090-61-9	38	
			36.82 Calamenen-10-one<10-nor->	1424	057494-10-7	25	
32	37.04	0.29	C:\Database\HPCH2205.L				
			27.91 Muurolene<gamma->	1342	030021-74-0	70	
			26.78 Muurola-3,5-diene<trans->	511	189165-77-3	55	
			24.62 Sibirene	1853	014029-18-6	55	
33	37.53	0.30	C:\Database\HPCH2205.L				
			34.54 Selina-3,11-dien-6-alpha-ol	1404	038142-38-0	64	
			40.15 Isovalencenol<(E)->	2173	022387-74-2	35	
			36.18 Germacra-4(15),5,10(14)-t...	1718	081968-62-9	25	
34	37.92	0.24	C:\Database\HPCH2205.L				
			31.49 Ionone<dimethyl->	847	068555-94-2	25	
			34.06 Muurola-4,10(14)-dien-1-b...	1716	257293-90-6	11	
			38.78 Amorpha-4,9-diene<7,14-an...	1896	394251-67-3	10	
35	38.02	0.43	C:\Database\HPCH2205.L				
			34.54 Selina-3,11-dien-6-alpha-ol	1404	038142-38-0	47	
			35.74 Santalol<(Z)-alpha->	1380	000115-71-9	38	
			30.74 Italicene epoxide	889	104188-24-1	38	
36	41.05	0.83	C:\Database\HPCH2205.L				
			41.97 Isoamyl dodecanoate	853	006309-51-9	4	
			30.59 Isoamyl nonanoate	1604	007779-70-6	2	
			11.49 Isopentyl 2-methyl butanoate	871	027625-35-0	2	
37	41.30	6.56	C:\Database\HPCH2205.L				
			41.97 Isoamyl dodecanoate	853	006309-51-9	9	
			30.59 Isoamyl nonanoate	1604	007779-70-6	2	
			11.49 Isopentyl 2-methyl butanoate	871	027625-35-0	2	
38	42.71	0.39	C:\Database\HPCH2205.L				
			41.97 Isoamyl dodecanoate	853	006309-51-9	12	
			53.22 Docosene<1-> (C22)	1218	001599-67-3	10	
			30.59 Isoamyl nonanoate	1604	007779-70-6	8	
39	44.94	0.18	C:\Database\HPCH2205.L				
			13.18 Pinene hydrate<cis->	1301	004948-28-1	9	
40	47.94	1.96	C:\Database\HPCH2205.L				
			41.97 Isoamyl dodecanoate	853	006309-51-9	12	
			30.59 Isoamyl nonanoate	1604	007779-70-6	2	
			11.49 Isopentyl 2-methyl butanoate	871	027625-35-0	2	

ANEXO X

Exemplo de relatório de comparação de espectros de
massas de *Eugenia riedeliana* O. Berg com espectros do
banco de dados

Information from Data File:

File: C:\MSDCHEM\1\DATA\AMANDA\CA61_04.D
Operator:
Date Acquired: 26 Sep 2005 16:47
Method File: OL_ESSA
Sample Name: E_RIDELIANA
Misc Info:
Vial Number: 2

Search Libraries: C:\Database\HPCH2205.L Minimum Quality: 0
C:\Database\Wiley275.L Minimum Quality: 0

Unknown Spectrum: Apex

Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	4.82	0.34	C:\Database\HPCH2205.L			
	3.72		Pentanone<4-hydroxy-4-meth...	1750	000123-42-2	64
	4.74		Heptanone<2->	786	000110-43-0	2
	12.35		Octanol acetate<3->	1254	004864-61-3	2
2	8.28	3.06	C:\Database\HPCH2205.L			
	5.85		Pinene<alpha->	912	000080-56-8	95
	9.78		Terpinene<gamma->	994	000099-85-4	94
	5.53		Tricyclene	913	000508-32-7	91
3	9.62	0.08	C:\Database\HPCH2205.L			
	7.04		Pinene<beta->	305	000127-91-3	94
	8.70		Phellandrene<beta->	161	000555-10-2	91
	5.53		Tricyclene	913	000508-32-7	91
4	11.82	0.14	C:\Database\HPCH2205.L			
	8.69		Limonene	164	000138-86-3	96
	27.57		Cumacrene	2194	847374-84-9	45
	8.73		Sylvestrene	1453	001461-27-4	35
5	18.52	0.17	C:\Database\HPCH2205.L			
	10.98		Terpinolene	916	000586-62-9	70
	15.21		Terpineol<alpha->	1517	000098-55-5	64
	5.85		Pinene<alpha->	912	000080-56-8	53
6	26.95	0.12	C:\Database\HPCH2205.L			
	33.77		Eudesmol<10-epi-gamma->	134	015051-81-7	37
	43.54		Cedranediol<8S,14->	944	062600-05-9	32
	24.92		Longifolene	1027	000475-20-7	32
7	27.36	2.58	C:\Database\HPCH2205.L			
	23.49		Copaene<alpha->	828	003856-25-5	98
	22.33		Cubebene<alpha->	826	017699-14-8	96
	27.60		Dauca-5,8-diene	1573	142928-08-3	90
8	28.36	0.08	C:\Database\HPCH2205.L			
	24.84		Italicene	769	094535-52-1	98
	28.04		Curcumene<gamma->	768	028976-68-3	95
	24.69		Italicene<iso->	767	094482-89-0	92
9	28.86	2.57	C:\Database\HPCH2205.L			
	26.92		Farnesene<(E)-beta->	360	018794-84-8	47
	26.69		Spirolepechinene	1660	246243-00-5	43
	28.37		Selinene<beta->	420	017066-67-0	38
10	29.20	7.75	C:\Database\HPCH2205.L			
	26.92		Farnesene<(E)-beta->	360	018794-84-8	47
	28.83		Isodaucene	1574	142878-08-8	46
	26.69		Spirolepechinene	1660	246243-00-5	45
11	29.74	0.39	C:\Database\HPCH2205.L			
	28.66		Valencene	1528	004630-07-3	93
	27.80		Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	91
	31.24		Germacrene B	743	015423-57-1	90
12	29.84	0.12	C:\Database\HPCH2205.L			
	25.10		Bergamotene<alpha-cis->	995	018252-46-5	98
	25.99		Bergamotene<alpha-trans->	993	013474-59-4	98
	29.42		Curcumene<beta->	519	028976-67-2	90
13	30.30	2.01	C:\Database\HPCH2205.L			
	26.82		Humulene<alpha->	827	006753-98-6	97
	21.73		Linalool propanoate	1634	000144-39-8	53
	26.44		Prenyl limonene<cis->	1347	135267-20-8	47

14	30.53	0.71	C:\Database\HPCH2205.L 26.20 Guaiene<alpha-> 28.37 Selinene<beta-> 27.73 Acoradiene<10-epi-beta->	831 420 1924	003691-12-1 017066-67-0 729602-94-2	94 64 60
15	30.72	0.30	C:\Database\HPCH2205.L 26.92 Farnesene<(E)-beta-> 29.70 Sesquiphellandrene<beta-> 37.92 Sesquilavandulyl acetate<Z->	360 747 1410	018794-84-8 020307-83-9 141992-14-5	96 80 38
16	30.93	0.22	C:\Database\HPCH2205.L 27.63 Aristolochene<4,5-di-epi-> 26.39 Guaiadiene<6,9-> 28.13 Amorphene<alpha->	2168 1795 1316	054868-40-5 037839-64-8 020085-19-2	95 93 72
17	31.31	1.45	C:\Database\HPCH2205.L 25.00 Gurjunene<alpha-> 28.91 Patchoulene<gamma-> 30.14 Cuprenene<gamma->	764 1242 1873	000489-40-7 000508-55-4 004895-23-2	90 86 84
18	31.60	4.98	C:\Database\HPCH2205.L 28.37 Selinene<beta-> 28.91 Patchoulene<gamma-> 28.66 Valencene	420 1242 1528	017066-67-0 000508-55-4 004630-07-3	99 90 86
19	31.81	0.94	C:\Database\HPCH2205.L 28.74 Selinene<alpha-> 26.39 Guaiadiene<6,9-> 28.68 Viridiflorene	421 1795 6	000473-13-2 037839-64-8 021747-46-6	98 62 53
20	32.07	4.90	C:\Database\HPCH2205.L 28.74 Selinene<alpha-> 27.73 Acoradiene<10-epi-beta-> 26.68 Himachalene<alpha->	421 1924 890	000473-13-2 729602-94-2 003853-83-6	99 72 64
21	32.46	1.20	C:\Database\HPCH2205.L 29.72 Cadinene<delta-> 26.64 Muurola-3,5-diene<cis-> 27.77 Cadina-1(6),4-diene<trans->	833 514 1052	000483-76-1 157374-44-2 020085-11-4	91 70 68
22	32.72	1.84	C:\Database\HPCH2205.L 27.97 Amorpha-4,7(11)-diene 31.11 Dauca-4(11),7-diene<trans-> 29.35 Cadinene<gamma->	1899 1875 832	486998-53-2 000000-00-0 039029-41-9	80 70 60
23	32.98	1.43	C:\Database\HPCH2205.L 27.97 Amorpha-4,7(11)-diene 29.97 Zonarene 27.18 Cadina-1(6),4-diene<cis->	1899 1051 1870	486998-53-2 041929-05-9 246522-85-0	93 87 83
24	33.14	2.16	C:\Database\HPCH2205.L 29.72 Cadinene<delta-> 27.91 Muurolene<gamma-> 27.77 Cadina-1(6),4-diene<trans->	833 1342 1052	000483-76-1 030021-74-0 020085-11-4	94 86 74
25	33.28	1.65	C:\Database\HPCH2205.L 29.70 Sesquiphellandrene<beta-> 27.97 Amorpha-4,7(11)-diene 24.62 Sibirene	747 1899 1853	020307-83-9 486998-53-2 014029-18-6	98 55 42
26	33.55	3.61	C:\Database\HPCH2205.L 30.62 Calacorene<alpha-> 31.43 Calacorene<beta-> 35.51 Calamenen-10-ol<trans->	1344 1345 1427	021391-99-1 050277-34-4 123931-36-2	94 87 22
27	33.85	1.41	C:\Database\HPCH2205.L 30.66 Selina-3,7(11)-diene 24.62 Sibirene 27.91 Muurolene<gamma->	133 1853 1342	006813-21-4 014029-18-6 030021-74-0	98 83 78
28	34.20	0.33	C:\Database\HPCH2205.L 27.80 Gurjunene<gamma-> 32.50 Globulol 32.58 Viridiflorol	762 1867 5	022567-17-5 051371-47-2 000552-02-3	93 93 76
29	34.51	1.03	C:\Database\HPCH2205.L 31.70 Caryophyllenyl alcohol 31.73 Caryolan-8-ol 31.46 Davanone B	385 380 209	000000-00-0 178737-45-6 134107-13-4	91 91 27

30	34.67	0.86	C:\Database\HPCH2205.L				
			30.09 Nerolidol<Z->	1140	000142-50-7	74	
			48.16 Geranyl linalool<E,E->	1965	001113-21-9	72	
			31.32 Nerolidol<E->	1141	040716-66-3	72	
31	34.95	2.44	C:\Database\HPCH2205.L				
			32.16 Caryophyllene oxide	834	001139-30-6	90	
			34.42 Aromadendrene epoxide-<al...	107	085760-81-2	86	
			17.00 Mentha-1(7),8-dien-2-ol<c...	1072	022626-43-3	53	
32	35.10	0.95	C:\Database\HPCH2205.L				
			32.58 Viridiflorol	5	000552-02-3	98	
			27.80 Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	98	
			26.20 Guaiene<alpha->	831	003691-12-1	94	
33	35.44	0.23	C:\Database\HPCH2205.L				
			27.80 Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	96	
			28.68 Viridiflorene	6	021747-46-6	90	
			26.68 Himachalene<alpha->	890	003853-83-6	68	
34	35.80	0.82	C:\Database\HPCH2205.L				
			33.20 Humulene epoxide II	931	019888-34-7	62	
			30.74 Italicene epoxide	889	104188-24-1	49	
			11.72 Vertocitral C<trans->	1553	065405-79-0	45	
35	36.62	11.89	C:\Database\HPCH2205.L				
			33.77 Eudesmol<10-epi-gamma->	134	015051-81-7	99	
			34.08 Eudesmol<gamma->	921	001209-71-8	96	
			28.74 Selinene<alpha->	421	000473-13-2	89	
36	36.77	0.90	C:\Database\HPCH2205.L				
			27.91 Muurolene<gamma->	1342	030021-74-0	87	
			25.95 Gurjunene<beta->	763	017334-55-3	83	
			29.72 Cadinene<delta->	833	000483-76-1	83	
37	36.86	2.06	C:\Database\HPCH2205.L				
			35.07 Valerianol	136	020489-45-6	91	
			29.97 Zonarene	1051	041929-05-9	83	
			23.43 Ylangene<alpha->	404	014912-44-8	64	
38	37.60	12.38	C:\Database\HPCH2205.L				
			35.07 Valerianol	136	020489-45-6	94	
			25.95 Gurjunene<beta->	763	017334-55-3	86	
			27.91 Muurolene<gamma->	1342	030021-74-0	70	
39	38.12	14.29	C:\Database\HPCH2205.L				
			35.07 Valerianol	136	020489-45-6	97	
			32.92 Guaiol	760	000489-86-1	80	
			29.67 Selinene<7-epi-alpha->	132	123123-37-5	62	
40	38.27	0.57	C:\Database\HPCH2205.L				
			27.80 Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	78	
			23.70 Patchoulene<beta->	1240	000514-51-2	64	
			28.74 Selinene<alpha->	421	000473-13-2	58	
41	38.37	1.16	C:\Database\HPCH2205.L				
			35.80 Cadalene	1343	000483-78-3	95	
			39.66 Guaiazulene	757	000489-84-9	30	
42	38.72	0.29	C:\Database\HPCH2205.L				
			11.23 Pyrazine<methylthio->	1354	021948-70-9	4	
			28.58 Maltyl isobutyrate	1635	065416-14-0	4	
			8.24 Isopropyl-4-methyl thiazol...	1624	015679-13-7	2	
43	38.89	0.44	C:\Database\HPCH2205.L				
			25.00 Gurjunene<alpha->	764	000489-40-7	70	
			31.24 Germacrene B	743	015423-57-1	64	
			28.51 Guaiene<cis-beta->	758	000088-84-6	64	
44	39.11	2.14	C:\Database\HPCH2205.L				
			23.70 Patchoulene<beta->	1240	000514-51-2	70	
			33.77 Eudesmol<10-epi-gamma->	134	015051-81-7	49	
			34.08 Eudesmol<gamma->	921	001209-71-8	46	
45	39.35	0.21	C:\Database\HPCH2205.L				
			27.80 Gurjunene<gamma->	762	022567-17-5	94	
			28.91 Patchoulene<gamma->	1242	000508-55-4	93	
			28.74 Selinene<alpha->	421	000473-13-2	91	

46	39.62	0.06	C:\Database\HPCH2205.L				
			29.05 Premnaspirodiene	1661	082189-85-3	95	
			28.66 Valencene	1528	004630-07-3	89	
			27.33 Caryophyllene<9-epi-(E)->	1360	068832-35-9	72	
47	39.82	0.07	C:\Database\HPCH2205.L				
			39.22 Valencene<13-hydroxy->	1772	438536-20-0	90	
			26.27 Aromadendrene	997	000489-39-4	90	
			27.33 Caryophyllene<9-epi-(E)->	1360	068832-35-9	64	
48	40.40	0.07	C:\Database\HPCH2205.L				
			36.68 Farnesol<2Z,6Z->	705	016106-95-9	55	
			41.16 Farnesyl acetate <2Z,6E->	709	040266-29-3	43	
			34.10 Sesquilandulol<E->	1412	120707-27-9	30	
49	40.67	0.05	C:\Database\HPCH2205.L				
			12.82 Linalool <dihydro->	1015	018479-51-1	27	
			33.61 Junenol	1641	000472-07-1	25	
			25.23 Davanafuran<cis-threo->	197	056586-07-3	25	
50	44.39	0.08	C:\Database\HPCH2205.L				
			32.50 Diethyl phthalate (plasti...	273	000084-66-2	9	
			23.75 Thujic acid	1850	000499-89-8	2	
			17.19 Thymol, methyl ether	1506	001076-56-8	2	
51	44.71	0.46	C:\Database\HPCH2205.L				
			24.09 Methyl decyl ketone	2192	006175-49-1	17	
			36.64 Pentadecanone<2->	925	002345-28-0	17	
			35.08 Isobornyl isobutanoate<5-...	1450	107783-33-5	9	