



Instituto Federal de Brasília
Campus Gama
Curso Licenciatura em Química

Tiago Campelo Vieira Corrêa

**ESTUDO QUÍMICO E INVESTIGAÇÃO DA ATIVIDADE
ANTIMICROBIANA DO ÓLEO ESSENCIAL OBTIDO DE FRUTOS DE
*Schinus terebinthifolia***

Brasília
2019

Tiago Campelo Vieira Corrêa

**ESTUDO QUÍMICO E INVESTIGAÇÃO DA ATIVIDADE
ANTIMICROBIANA DO ÓLEO ESSENCIAL OBTIDO DE FRUTOS DE
*Schinus terebinthifolia***

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Curso de Licenciatura em Química do *Campus* Gama do Instituto Federal de Brasília como requisito parcial para obtenção de título de Licenciado em Química.

Orientador: MARLEY GARCIA SILVA

Brasília
2019

CIP — Catalogação na Publicação

543:579.6

C193e

Corrêa, Tiago Campelo Vieira

Estudo químico e investigação da atividade antimicrobiana do óleo essencial obtido de frutos de schinus terebinthifolia / Tiago Campelo Vieira Corrêa ; orientação Prof. Dr. Marley Garcia Silva — Brasília, 2019.

91 f.

Orientador: Prof. Dr. Marley Garcia Silva.

Trabalho de Conclusão do Curso (Graduação — Licenciatura em Química) — Instituto Federal de Brasília, Campus Gama, 2019.

1. Aroeira-vermelha. 2. Química de produtos naturais. 3. Atividade antibacteriana.
I. Garcia Silva, Marley, orient.

Elaborado com os dados fornecidos pelo(a) autor(a), sob a responsabilidade do bibliotecário Daniel R. Guimarães — CRB/1ª 2961.

Tiago Campelo Vieira Corrêa

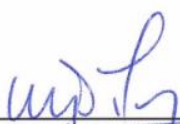
**ESTUDO QUÍMICO E INVESTIGAÇÃO DA ATIVIDADE
ANTIMICROBIANA DO ÓLEO ESSENCIAL OBTIDO DE FRUTOS DE
*Schinus terebinthifolia***

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Curso de Licenciatura em Química do *Campus* Gama do Instituto Federal de Brasília como requisito parcial para obtenção de título de Licenciado em Química.

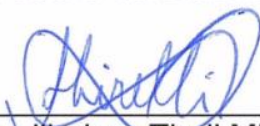
Orientador: MARLEY GARCIA SILVA

Aprovado em: 04 de dezembro de 2019.


BANCA EXAMINADORA



Marley Garcia Silva – Orientador
Instituto Federal de Brasília – *Campus* Gama



Aline Auxiliadora Tireli Miranda – Membro
Instituto Federal de Brasília – *Campus* Estrutural



Adriana de Oliveira Santos Alfani – Membro
Instituto Federal de Brasília – *Campus* Gama

Aos meus pais, Jorge e Leila, pelo amor e incentivo aos estudos.
Às minhas irmãs Laís, Tais e ao irmão Daniel, pela amizade e cumplicidade.

À Ciência!

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, sou grato a Deus por conduzir minha vida e nunca me abandonar nos momentos difíceis, abençoando-me com coragem e fé.

A minha família, em particular aos meus pais Leila e Jorge, que sempre me incentivaram através do amor e palavras de conforto nas fases difíceis dos meus estudos.

Com muito amor, agradeço à minha companheira Isadora, pelos incentivos e conselhos durante meu processo de formação e por estarmos juntos em um momento tão especial.

Ao meu orientador Dr. Marley Garcia Silva, pela confiança depositada em mim e por compartilhar conhecimentos importantes para a minha vida não só como profissional, mas como pessoa, me apoiando de forma paternal durante a minha formação.

Ao Instituto Federal de Brasília, pelos conhecimentos adquiridos e especialmente, pela oportunidade de participar da visita ao Instituto Politécnico de Castelo Branco em que aprendi técnicas utilizadas no presente estudo.

Aos professores do curso de Licenciatura em Química, que compartilharam conhecimentos importantes em minha carreira profissional e incentivaram minha formação.

Aos técnicos de laboratório, em especial a Dra. Elaine Nascimento Aquino, pela ajuda no desenvolvimento deste e de outros trabalhos realizados em parceria.

Ao Herbário do Jardim Botânico de Brasília pela identificação da amostra vegetal em estudo.

A todos os meus amigos e colegas da graduação, especialmente Myerson Barros, Alex Guedes, Fernando Luiz, Michael Mueller e Thiago Henrique, pelo convívio e trocas de conhecimento.

Muito obrigado.

“Quem estuda e não pratica o que aprende,
é como o homem que lava e não semeia”.

Proverbio Árabe

RESUMO

Aroeira-vermelha - *Schinus terebinthifolia* (Raddi), Anacardiaceae, é uma planta nativa do Brasil, sendo amplamente distribuída em toda Mata Atlântica brasileira. A espécie é conhecida principalmente como aroeira vermelha ou pimenta rosa. O interesse por esta espécie está relacionado às suas propriedades medicinais e culinárias. Neste sentido, o objetivo deste trabalho foi avaliar o perfil químico do óleo essencial obtido de frutos da aroeira vermelha, bem como avaliar o potencial antimicrobiano deste. Além disto, este trabalho também teve como objetivo contribuir para a conscientização acerca da importância da flora nacional no contexto da química medicinal. A obtenção do óleo essencial foi realizada por meio de hidrodestilação, do tipo Clevenger. Realizadas as extrações, procedeu-se a análise química desta mistura por meio de cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas (CG/EM). Para os testes de atividade antimicrobiana, *S. aureus*, *P. aeruginosa* e *E.coli* foram utilizados como microrganismos indicadores. A técnica escolhida para esta análise foi o de difusão em ágar (antibiograma). De acordo com dados obtidos da CG/EM, foi possível a identificação de 36 substâncias presentes no óleo essencial. Tratam-se, na sua maioria, de terpenos, típicos em amostras de óleo essencial. Das substâncias identificadas, destacam-se δ -3-careno, germacreno-D e α -pineno como os componentes majoritários do óleo essencial, representando, respectivamente 50,4; 9,05 e 8,12% do total de substâncias detectadas no cromatograma. Os resultados da atividade antimicrobiana, nas condições experimentais estabelecidas, mostraram que o óleo essencial foi capaz de inibir o crescimento de cepas de *S. aureus* e *P. aeruginosa*, mas não foi ativo contra *E. coli*. Pode-se concluir que o óleo essencial da aroeira-vermelha possui substâncias que podem servir para o *design* de novos agentes com atividade antimicrobiana e que novos ensaios poderão ser realizados de modo a potencializar tal atividade. Estudos com espécies de plantas nativas de nosso país são importantes ferramentas para o conhecimento de nossa flora e de suas ricas propriedades.

Palavras-chave: Aroeira-vermelha, química de produtos naturais, atividade antibacteriana.

ABSTRACT

“Aroeira vermelha” - *Schinus terebinthifolia* (Raddi), Anacardiaceae, is a plant widely distributed in Brazilian Atlantic rainforest. It is a tree of medium height, ranging from 5 to 10 meters, with wide crowns, trunk up to 60 cm and covered with a thick bark. The species is known as “aroeira vermelha”, although other denominations are common. Interest in this species is related to the medicinal properties of its secondary metabolites and its applications in cuisine. The aim of this work was to evaluate the chemical profile of the essential oil obtained from “Aroeira vermelha” fruits and to evaluate its antimicrobial potential. In addition, this work also aimed to raise awareness about the importance of national flora in the context of medicinal chemistry. Essential oil was obtained through Clevenger hydrodistillation. After the extractions, the chemical analysis of this mixture was carried out by mass spectrum coupled gas chromatography (GC/MS). For antimicrobial activity tests, *S. aureus*, *P. aeruginosa* and *E.coli* were used as indicator microorganisms. The technique chosen for this analysis was agar diffusion (antibiogram). According to data obtained from GC/MS, it was possible to identify at least 36 substances in the essential oil. These are mostly terpenes, typical of samples of this nature. δ -carene, α -pinene and myrcene was identified as the major components of the essential oil, representing respectively 50.4; 8.12 and 5.96% of the total substances detected in the chromatogram. Results of antimicrobial activity showed that the essential oil was able to inhibit growth of *S. aureus* and *P. aeruginosa* strains, but was not active against *E. coli*. However, it can be concluded that the essential oil of “aroeira vermelha” has substances that can be used to design new agents with antimicrobial activity and that new assays can be performed in order to potentiate such activity and against other types of microorganisms. In addition, studies with native plant species from our country and from the South American continent are important tools for the knowledge of our flora and its rich properties.

Keywords: *Aroeira-vermelha, natural produtos, antibacterial activity*

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Exemplo de sistema comumente utilizado para extração de óleos essenciais (Clevenger). (A) Extração de óleos com baixa densidade e (B) Extração de óleos com alta densidade.....	16
Figura 2 – Mapa de distribuição da espécie <i>S. terebinthifolia</i> , com ocorrência confirmada.....	20
Figura 3 – Etapas do processo de obtenção do óleo essencial de aroeira vermelha. (A) Processo de trituração dos frutos; (B) Balão de fundo redondo utilizado no processo de extração; (C) Equipamento Clevenger montado; (D) Óleo essencial obtido armazenado em frasco âmbar.....	24
Figura 4 – Representação do processo de preparação do inóculo a ser utilizado no antibiograma.....	26
Figura 5 – Representação da placa de Petri para os ensaios antimicrobianos..	27
Figura 6 – Padrão de hidrocarbonetos para a determinação do índice de retenção relativo dos componentes do óleo essencial de aroeira vermelha, obtido por CG/EM, coluna EN5MS (30m x 0,25mm x 0,25µm) SGE <i>Analytical Science</i>	29
Figura 7 – Cromatograma do óleo essencial de <i>S. terebinthifolia</i> obtido em CG/EM.....	30
Figura 8 – (A) Espectro correspondente ao pico de tempo de retenção de 5,075min, área no cromatograma de 8,12%; (B, C e D) Espectros padrões similares ao obtido para amostra – pico 2, TR 5,075min.....	30
Figura 9 – Placas de Petri contendo os inóculos de <i>E. coli</i> (A), <i>S. aureus</i> (B) e <i>P. aeruginosa</i> (C)	34
Figura 10 – Aspecto das placas de antibiograma do óleo essencial de aroeira vermelha. Microrganismos indicadores: (A) <i>E. coli</i> , (B) <i>P. aeruginosa</i> e (C) <i>S. aureus</i>	35

LISTA DE TABELAS E FLUXOGRAMA

Tabela 1 –	Exemplos de substâncias químicas encontradas em óleos essenciais e suas atividades biológicas relacionadas.....	15
Tabela 2 –	Alguns componentes químicos identificados em membros da família Anacardiaceae.....	19
Fluxograma 1 –	Representação esquemática dos procedimentos para obtenção dos resultados.....	22
Tabela 3 –	Rendimentos das extrações do óleo essencial de <i>S. terebinthifolia</i> (Raddi).....	28
Tabela 4 –	Identificação dos componentes do óleo essencial de <i>S. terebinthifolia</i> (Raddi), com índice de Kovats calculados.....	32
Tabela 5 –	Diâmetros dos halos de inibição apurados no teste de atividade antimicrobiana do óleo essencial de aroeira vermelha.....	35

LISTA DE ABREVIATURAS

OE	Óleo essencial
ISO	Organização Internacional de Normalização
CG/EM	Cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas
IK	Índice de retenção de Kovats
FFNSC1.3	Flavors and Fragrances of Natural and Synthetic Compounds
NIST	National Institute of Standards and Technology
ATCC	American Type Culture Collection
UFC	Unidades formadoras de colônia

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
1.1	Óleos essenciais.....	14
1.2	A família Anacardiaceae.....	17
1.3	Aroeira vermelha - <i>Schinus terebinthifolia</i> (Raddi) - Anacardiaceae	19
2	OBJETIVOS	22
2.1	Objetivo geral.....	22
2.2	Objetivos específicos	22
3	MATERIAL E MÉTODOS.....	23
3.1	Fluxograma de execução dos experimentos	23
3.2	Coleta e identificação do material vegetal.....	23
3.3	Obtenção do óleo essencial	24
3.4	Análise cromatográfica	25
3.5	Determinação da atividade antimicrobiana	25
3.5.1	Microrganismos indicadores	25
3.5.2	Antibiograma.....	26
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	28
4.1	Rendimento do óleo essencial de <i>S. terebinthifolia</i> (raddi).....	28
4.2	Caracterização química.....	29
4.3	Atividade antimicrobiana	34
5	CONCLUSÃO.....	37
	REFERÊNCIAS	38
	ANEXO A – EXCICATA DE IDENTIFICAÇÃO DA AMOSTRA DE <i>S. terebinthifolia</i>	43
	ANEXO – B CROMATOGRAMA DO ÓLEO ESSENCIAL DE <i>S. terebinthifolia</i>	44

1 INTRODUÇÃO

1.1 Óleos essenciais

Os óleos essenciais (OE's) são líquidos geralmente incolores extraídos de plantas aromáticas e são constituídos por uma mistura complexa de substâncias, principalmente terpenos, terpenóides voláteis, como os monoterpenos e sesquiterpenos, além de outros compostos aromáticos (KHORSHIDIAN et al., 2018; REY-VALEIRÓN et al., 2018). A composição química dos OE ainda varia de acordo com a espécie da planta e condições ambientais a que foi submetida (CAMPOLO et al 2018).

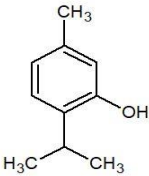
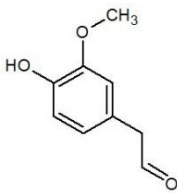
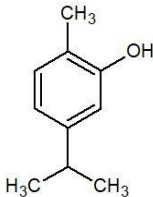
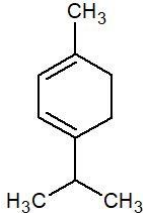
Na planta, os OE's são produzidos em estruturas secretoras especializadas, denominadas tricomas. São resultado do metabolismo secundário e sua função, na planta, está relacionada a mecanismo de defesa ou na atração de insetos polinizadores. Os OE's, por sua característica aromática, têm uma vasta aplicação na indústria farmacêutica e cosmética, sendo utilizados na formulação de perfumes, aromatizadores de ambientes, óleos corporais, além de usos em alimentos e em bebidas (BASER e BUCHBAUER 2015, BLOWMAN et al., 2018; CAMPOLO et al 2018).

A adaptação de plantas a diversos ambientes promove mudanças importantes nos mecanismos de defesa, com vistas à proteção contra ameaças externas (BLOWMAN et al., 2018). Tais mudanças promovem variações significativas na composição química destes óleos, favorecendo a síntese de substâncias biologicamente ativas de acordo com o ambiente exposto, mesmo tratando-se de espécies similares. Neste sentido, a composição dos OE's é influenciada por fatores ambientais como, clima, nutrientes disponíveis no solo, insetos e microrganismos (KHORSHIDIAN et al., 2018). Estudos mostraram que a composição dos OE's consiste em uma mistura complexa que pode conter de 20 a 60 substâncias, com dois ou três componentes majoritários, que geralmente estão associados à atividade biológica (PERRICONE et al 2015; CAMPOLO et al 2018, BLOWMAN et al., 2018).

Ainda concernente à composição química, há registros na literatura de que esta também é variável de acordo com as etapas de desenvolvimento da planta (desenvolvimento vegetativo, floração e frutificação), assim como da parte da planta que foi utilizada e o tipo de processo extrativo (VENTURA et al., 2019; BLOWMAN et

al., 2018). A tabela 1 apresenta cinco componentes majoritários de OE que possuem atividades biológicas.

Tabela 1 – Exemplos de substâncias químicas encontradas em óleos essenciais e suas atividades biológicas relacionadas.

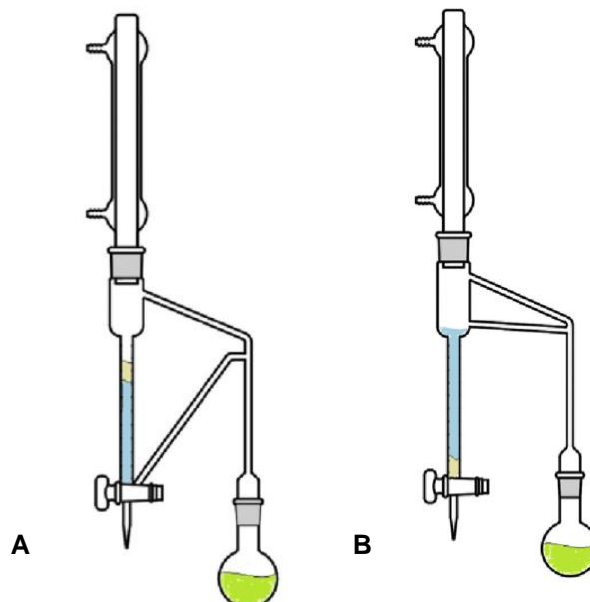
Componente majoritário	Óleo essencial	Atividades	Referência
 Timol	<i>T. vulgaris</i> (Alfavaca)	Tripanocida	LUNA et al 2019
	<i>L. sidoides</i> (Alecrim bravo)	Fungicida	BALDIM et al 2019
 Eugenol	<i>S. aromaticum</i> (cravo da índia)	Bactericida	HAMAD et al 2017
	<i>Ocimum sanctum</i> (tulsi)	Tripanocida	LUNA et al 2019
 Carvacrol	<i>O. vulgare</i> (orégano)	Bactericida	ARAUJO e LONGO 2016
	<i>H. leucocephala</i> (Leucaena)	Bactericida Antioxidante	SANTOS et al., 2015
 α-terpineno	<i>C. ambrosioides</i> (mastruz)	Bactericida	BISHT e KUMAR 2019

Quanto às atividades biológicas associadas aos OE's, diversos estudos apontaram para atividade antibacteriana, anti-inflamatória, antioxidante e antifúngica (SILVEIRA, COSTA, JUNIOR 2015, DE ALMEIDA et al 2018; ROMANI et al 2019).

Uma das explicações para a alta atividade pode ser a característica lipofílica dos óleos, que facilita a entrada ou o rompimento da membrana celular (célula alvo), favorecendo o colapso celular (PERRICONE et al 2015). Entretanto, é importante relatar que estas atividades vinculadas dependem das substâncias presentes na composição do óleo, de suas concentrações e/ou sinergismo.

A extração dos OE's pode ser realizada por diversos métodos. Dentre as técnicas mais utilizadas está a hidrodestilação, o arraste a vapor e a extração por fluido supercrítico (SILVEIRA, COSTA, JUNIOR 2015; DE ALMEIDA et al 2018). No entanto, atualmente apenas quatro métodos de extração são descritos pelas normas internacionais (ISO 9235: 2013), sendo eles: hidrodestilação, destilação a vapor, destilação a seco e por processos mecânicos, sendo este último indicado para o epicarpo de frutas cítricas. Em termos de volume, os óleos extraídos por destilação a vapor são os mais comercializados atualmente (IERI et al, 2019). A figura 1 que se segue ilustra sistema de extração por arraste a vapor de OE bastante utilizado em laboratórios de pesquisa.

Figura 1 – Exemplo de sistema comumente utilizado para extração de óleos essenciais (Clevenger). (A) Extração de óleos com baixa densidade e (B) Extração de óleos com alta densidade.



Fonte: Vinatoru, Mason, Calinescu (2017).

A identificação dos componentes presentes em OE é feita majoritariamente pela técnica de cromatografia gasosa a espectroscopia de massa (CG/EM). Essa

técnica é amplamente aplicada em análises qualitativa e quantitativa de componentes não polares e apresenta alta sensibilidade, possibilitando a identificação de substâncias em baixas concentrações (AL-RUBAYE, HAMEED e KADHIM, 2017).

1.2 A família Anacardiaceae

A Família Anacardiaceae é uma das maiores pertencentes à ordem *Sapindales*, contemplando aproximadamente 860 espécies em 86 gêneros (MUÑOZ et al., 2019; MUNIRAJA et al., 2018). É composta por árvores, arbustos e cipós, distribuídos amplamente em regiões de clima tropical, subtropical e temperado, ocorrendo em ambientes úmidos e secos (TÖLKE et al., 2018; PHONGKRATHUNG et al 2016).

Com base nas diversidades morfológicas, esta grande família foi subdividida diversas vezes em tribos e grupos. Primeiramente em 1862 por Benth e Hooker, que propuseram a divisão em duas tribos denominadas de Anacardieae e Spondieae, baseando-se no sistema reprodutor feminino e classificando pelo número de lóculos gineceu (TÖLKE et al., 2018).

Posteriormente, levando em consideração outras características, novas subdivisões foram propostas por diversos autores, chegando a 11 tribos distintas, destacando-se Rhoeae, Spondiadeae, Anacardieae, Semecarpeae e Dobineae, abordadas tradicionalmente (FU et al., 2017; SCHULZE-KAYSERS et al 2018).

Contudo, estudos mais recentes conduzidos por Weeks e colaboradores (2014), ratificaram a classificação de Pell (2004), na qual as famílias Anacardieae e Burseraceae são oriundas de um único ancestral e a família Anacardiaceae encontra-se dividida em duas grandes subfamílias: Anacardieae e Spondioideae.

A família Anacardiaceae possui grande relevância econômica, contemplando diversas espécies de frutas e sementes comercializadas em todo o mundo (MUNIRAJA et al., 2018). Uma das espécies mais conhecidas pertencente a esta família é a *Mangifera indica* (L.), árvore produtora da manga. Esta fruta, denominada muitas vezes como “Rainha das frutas” é cultivada em mais de 103 países (MUNIRAJA et al., 2018) e correspondeu a aproximadamente 52% do volume mundial de frutas tropicais produzidas em 2018 (ALTENDORF, S. 2019).

Dentre outros frutos produzidos por esta família podemos citar a siriguela (*Spondias purpurea* L.), cajá (*Spondias mombin* L.), umbu (*Spondias tuberosa* L.), caju (*Anacardium occidentale* L.), pistache (*Pistacia vera* L.), marula (*Sclerocarya birrea* A. Rich.), cajarana (*Spondias dulcis* Sonn.) e cajazinho (*Spondias venulosa* Mart. Ex Engl) (SCHULZE-KAYSERS et al 2018; BALBINO et al., 2019).

Além do grande valor de seus frutos, espécies desta família são utilizadas para paisagismo, produção de madeiras, para fins medicinais, inseticidas e para a produção de resinas, utilizadas na confecção de plásticos, adesivos e lubrificantes (ABOLGHASEMI et al., 2018;TÖLKE et al., 2018).

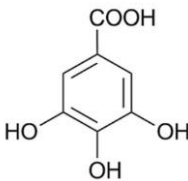
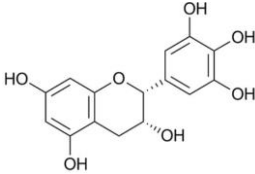
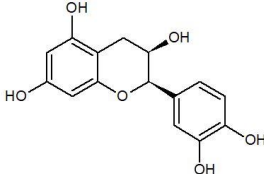
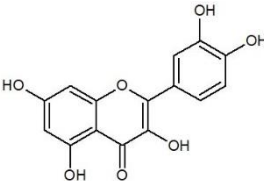
Na medicina popular, plantas desta família têm sido utilizadas há anos em diversas culturas para o tratamento e prevenção de doenças (SCHULZE-KAYSERS et al 2018). O gênero *Rhus*, que pertence a esta família, é bastante conhecido por suas atividades antimicrobiana, antifúngica, anti-inflamatória e antiviral (KINSLEY, NGUYEN, 2016; YOUSAF, ZUHARAH, 2015). Um exemplo é a *Rhus gabra*, espécie muito utilizada contra doenças bacterianas como sífilis, gonorreia, disenteria e gangrena, (ATANASSOV et al., 2016).

Diversos estudos demonstraram a eficácia de extratos brutos e óleos essenciais extraídos de espécies da Anacardiaceae contra *Escherichia coli*, *Bacillus subtilis*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Proteus mirabilis*, *Candida albicans*, *Paracoccidioides brasiliensis*, dentre outros microrganismos (AJILEYE, et al., 2015; ALIA, SHUKRI, RAZALI, 2016; DO PRADO et al., 2019;). No entanto, apesar das diversas atividades biológicas de interesse, a Anacardiaceae também abrange o maior numero de espécies causadoras de inflamações de pele em todo o mundo (SLAUGHTER, BEASLEY, SCHEP 2017; CHRISTENSEN, 2018).

Além das atividades relatadas anteriormente, estudos de Remila S. et al (2015) apresentaram resultados significativos nos ensaios antioxidantes (método ORAC), anti-inflamatórios e anticâncer, realizados com extratos brutos de folhas da espécie *Pistacia lentiscus*. Segundo o estudo, a eficácia destes ensaios está relacionada com o teor de fenólicos e flavonoides presentes no extrato. A caracterização química do extrato foliar realizada no estudo identificou 11 estruturas nestes grupos, dentre eles ácido gálico, glucogalina, miricetina e quercetina.

A tabela 2 apresenta algumas substâncias identificadas na família Anacardiaceae, de acordo com a revisão apresentada por Schulze-Kaysers e colaboradores (2015).

Tabela 2 – Alguns componentes químicos identificados em membros da família Anacardiaceae.

Substância	Estrutura	Espécies
Ácido gálico		<i>Anacardium occidentale</i> L. (Caju); <i>Sclerocarya birrea</i> L (Marula); <i>Schinus terebinthifolius</i> (Raddi); <i>Pistacia vera</i> L. (Pistache); <i>Rhus coriaria</i> L;
(-)-Epigallocatequina		<i>Anacardium occidentale</i> L. (Caju); <i>Sclerocarya birrea</i> L (Marula);
(-) – Epicatequina		<i>Anacardium occidentale</i> L. (Caju); <i>Pistacia vera</i> L. (Pistache);
Quercetina		<i>Mangifera indica</i> L. (Manga); <i>Anacardium occidentale</i> L. (Caju); <i>Pistacia vera</i> L. (Pistache); <i>Rhus coriaria</i> L;

Fonte: Schulze-Kaysers, Feuereisen e Schieber, (2015).

1.3 Aroeira vermelha - *Schinus terebinthifolia* (Raddi) – Anacardiaceae

Schinus terebinthifolia (Raddi), Anacardiaceae, é uma planta nativa do Brasil, Paraguai e Argentina. No Brasil ocorre ao longo da Mata Atlântica, desde o Rio Grande do Norte ao Rio Grande do Sul. Como características principais podemos destacar sua altura mediana, que varia de 5 a 10 metros, copas largas e tronco de até 60 cm de diâmetro e revestimento de uma casca espessa. A espécie é

conhecida como aroeira vermelha, embora existam outras denominações para *S. terebinthifolia*, tais como: aroeira do campo, aroeira mansa, pimenta rosa, corneíba, fruto de sabiá, dentre outros (LORENZI e MATOS, 2008; KWEKA et al., 2011). A figura 2 mostra a distribuição geográfica da espécie, com ocorrência confirmada, segundo dados do herbário virtual Reflora.

Figura 2 – Mapa de distribuição da espécie *Schinus terebinthifolia*, com ocorrência confirmada.



Fonte: Programa Reflora: iniciativa do Governo do Brasil e de agência de fomento com vistas à catalogação de espécies presentes no País - Herbário virtual. Consulta realizada em outubro de 2019.

Os frutos da aroeira vermelha são conhecidos como pimenta rosa, apresentam aspecto globóide e apenas uma semente por fruto. Os frutos são aromáticos e este fato tem despertado o interesse para diversas aplicações, como na culinária. Há relatos na literatura quanto ao uso dos frutos de aroeira vermelha para o preparo de molhos que acompanham diversos tipos de carne, preparo de chocolates, bebidas e doces exóticos (GERHARDT 2018; PAGANI et al. 2016). Além disto, a espécie é amplamente utilizada em projetos de reflorestamentos e ornamentação de cidades.

De acordo com o conhecimento popular, a espécie é muito utilizada como agente anti-inflamatório, adstringente, antidiarreica, depurativa, diurética e antipirética (LORENZI, MATOS, 2008). Distúrbios respiratórios também podem ser tratados com o óleo essencial extraído da planta. Além desta propriedade, há

estudos que mostram que o óleo essencial tem potencial antimicrobiano contra diferentes cepas, inclusive de interesse clínico, tais como: *Klebsiella pneumoniae*, *Alcaligenes faecalis*, *P. aeruginosa*, *Leuconostoc cremoris*, *Enterobacter aerogenes*, *Staphylococcus aureus*. Estudos de atividade biológica demonstraram ainda significativa atividade contra algumas espécies de fungos, como *Aspergillus fumigatus*, *Aspergillus niger* e *Trichoderma* spp. (MARTINEZ et al., 1996; SIDDIQUI et al., 2003).

Quanto à composição química dos metabólitos secundários identificados na aroeira vermelha destacam-se a terebinthona, ácido hidoximasticadienóico, ácido ursólico, α -pineno, α -felandreno, δ -3-careno, (MARTINEZ et al., 1996; BARBOSA et al., 2007). Destaca-se também que altas concentrações de monoterpenos e sesquiterpenos, fenóis, flavonas, flavonoides, xantonas e leucoantocianidinas foram evidenciadas em extratos de folhas e frutos de *Schinus* (LIMA et al., 2006).

Em estudo fitoquímico apresentado por Lima, e colaboradores (2017) foi demonstrada a presença de diferentes grupos químicos em extratos etanólicos de casca de aroeira, a saber: alcaloides, glicosídeos cardiotônicos, cumarinas, flavonoides, taninos e triterpenos. Este estudo foi baseado na produção de extratos e testes qualitativos utilizando reagentes de Dragendorff, de Mayer, de Salkowisk, de Baljet, dentre outros.

Desta forma, uma importante maneira de se estudar os componentes químicos da aroeira vermelha é a extração de seu óleo essencial. O óleo essencial é uma complexa mistura de compostos voláteis, com odores e cores característicos. Estas substâncias são sintetizadas em diversas partes das plantas, sendo armazenadas em células secretoras, cavidades, canais ou em tricomas glandulares. A pesquisa apresentada neste trabalho baseia-se neste estudo, com vistas à análise do óleo essencial da aroeira vermelha (coletada na região do Distrito Federal) e sua ação como agente antimicrobiano.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo geral

Este trabalho teve como objetivo traçar o perfil químico do óleo essencial extraído de *Schinus terebinthifolia* (Raddi), bem como avaliar seu potencial antimicrobiano.

2.2 Objetivos específicos

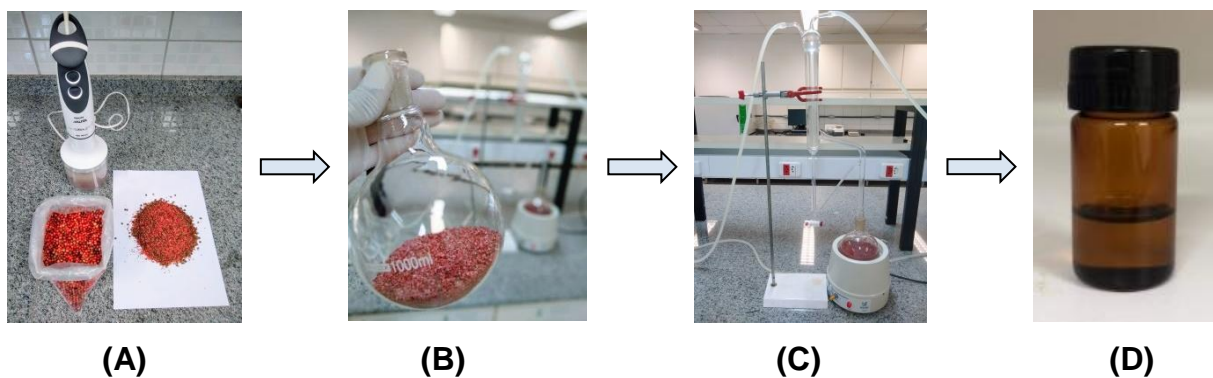
- a) Extrair o óleo essencial de frutos de *Schinus terebinthifolia* (Raddi) por meio da técnica de hidrodestilação do tipo Clevenger;
- b) Identificar os componentes químicos do óleo obtido por meio de cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas (CG/EM);
- c) Avaliar o potencial antimicrobiano do óleo essencial obtido contra diferentes cepas de microrganismos;
- d) No âmbito do ensino, possibilitar a discussão acerca da importância da preservação de espécies vegetais e sua importância ambiental e farmacológica.

herbário do Jardim Botânico de Brasília (JBB), para fins de identificação, catalogação e depósito. A representação da exsicata é apresentada no anexo A.

3.3 Obtenção do óleo essencial

Para obtenção do óleo essencial, empregou-se o método de hidrodestilação do tipo Clevenger modificado, com o tempo de extração de 120 minutos após o início da ebulição. Para cada obtenção do óleo essencial, 50g de frutos de *S. terebinthifolia* (Raddi), previamente triturados em mixer Walita™, foram adicionados a um balão de fundo redondo de capacidade 1L contendo 500 mL de água destilada. No término da extração, registrou-se a temperatura do solvente extrator (água) e o óleo obtido foi coletado e seco com sulfato de sódio anidro (Na_2SO_4). Após o processo de secagem, o óleo foi transferido para frascos de vidro âmbar e armazenado em freezer a $-8\text{ }^\circ\text{C}$ até o momento das análises microbiológica e química. A figura 3 representa, esquematicamente, os passos utilizados na obtenção do óleo essencial de aroeira vermelha.

Figura 3 – Etapas do processo de obtenção do óleo essencial de aroeira vermelha. (A) Processo de trituração dos frutos; (B) Balão de fundo redondo utilizado no processo de extração; (C) Equipamento Clevenger montado; (D) Óleo essencial obtido armazenado em frasco âmbar. Fonte: arquivo fotográfico dos autores.



Fonte: Arquivo pessoal

O rendimento percentual do óleo essencial obtido das extrações foi calculado baseando-se no volume de óleo obtido e a massa úmida de material vegetal de partida, conforme equação (1) representada a seguir.

$$R (\%) = \frac{V_{\text{Óleo}}}{m_{\text{material vegetal}}} \times 100 \quad (1)$$

O volume de óleo essencial obtido foi determinado pela leitura da escala do tubo separador do equipamento Clevenger modificado.

3.4 Análise cromatográfica

A análise qualitativa do óleo essencial obtido foi realizada na Central de Cromatografia e Espectrometria de Massas, da Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, por meio de cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massa (GC/MS). Para tanto, utilizou-se aparelho Shimadzu CG – 17A, com detector seletivo de massa, modelo QP 2010, sob as seguintes condições experimentais: coluna EN5MS (30 m x 0,25 mm x 0,25 µm); programação da coluna com temperatura variando de 60 a 240° C, sendo acrescidos 3 °C a cada minuto; arraste com gás hélio e fluxo de 1,5 mL.min⁻¹. Os componentes químicos presentes no óleo essencial de *S. terenbinthifolia* foram identificados pelo cálculo do índice de retenção de Kovats (IK) (equação 2), análise dos espectros padrão da base de dados Wiley7, FFNSC1.3 e NIST08 e comparação com dados de Adams 2017. O cálculo do IK foi realizado partindo dos tempos de retenção do padrão de hidrocarbonetos utilizado (C10-C30) e do tempo de retenção da substância em análise.

$$IK = 100.n + 100 \left(\frac{\log \log t_a - \log \log t_n}{\log \log t_{n+1} - \log \log t_n} \right) \quad (2)$$

Onde: n é o número de carbonos do padrão menos retido;

$\log \log t_a$ é o tempo de retenção da substância;

$\log \log t_n$ é o tempo de retenção do padrão menos retido;

$\log \log t_{n+1}$ é o tempo de retenção do padrão mais retido.

3.5 Determinação da atividade antimicrobiana

3.5.1 Microrganismos indicadores

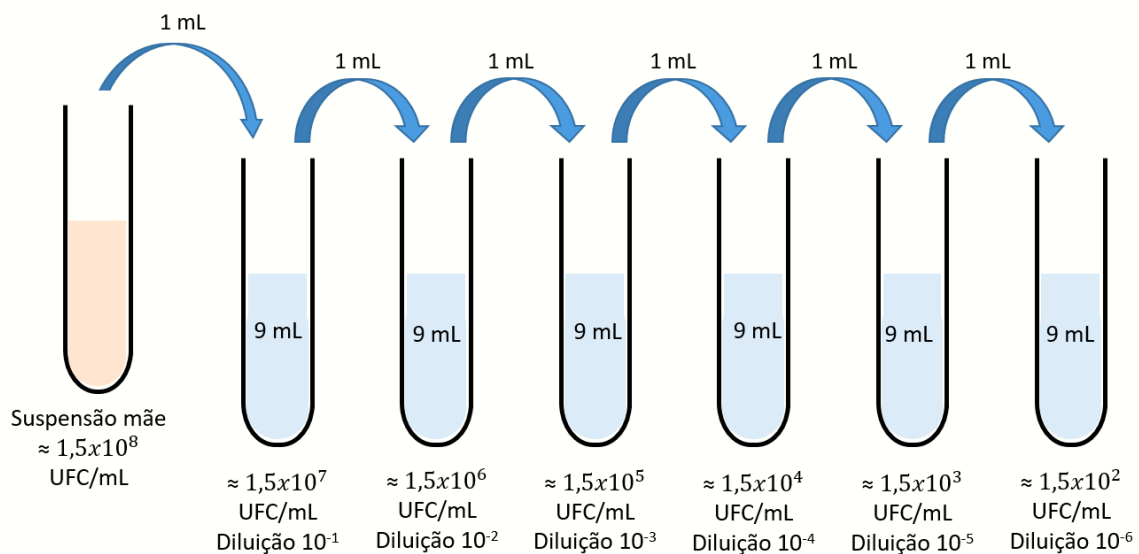
Para os testes de atividade antimicrobiana foram utilizadas cepas padrão ATCC (American Type Culture Collection). As cepas foram fornecidas pela CentralLab, em amostras liofilizadas. Após procedimentos de ativação da cepa liofilizada, os microrganismos indicadores *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli* e *Pseudomonas aeruginosa* foram mantidos em meio Mueller Hinton e armazenados em geladeira a 4 °C. Para a realização dos ensaios de atividade, os microrganismos passaram por repique e incubação de 18 horas a 37 °C.

3.5.2 Antibiograma

O antibiograma foi realizado em placas de Petri previamente esterilizadas com aproximadamente 25 mL de meio Mueller Hinton ágar. Sobre esta camada, foram adicionados 200 μ L do inóculo padronizado.

Para a padronização do inóculo, cepas jovens e recém repicadas foram transferidas para um tubo de ensaio contendo 10 mL de solução salina (suspensão mãe). As cepas foram adicionadas até a suspensão mãe atingir uma turbidez similar à escala 0,5 de MacFarland, o que corresponde a aproximadamente $1,5 \times 10^8$ UFC/mL. Posteriormente realizou-se 6 diluições sucessivas com a suspensão mãe em tubos de ensaio, adicionando 1 mL em 9 mL de solução salina, conforme figura 4, até a concentração aproximada $1,5 \times 10^2$ UFC/mL.

Figura 4 – Representação do processo de preparação do inóculo a ser utilizado no antibiograma.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Após as diluições, foram transferidos 100 μ L das duas últimas diluições (concentrações $\approx 1,5 \times 10^3$ UFC/mL e $\approx 1,5 \times 10^2$ UFC/mL) para placas de Petri esterilizadas contendo 25 mL de meio Mueller Hinton ágar. Os 100 μ L de inóculo foram espalhados com pérolas de vidro e incubados por 18 horas a 37 °C. Posteriormente ao período de incubação, registrou-se o número de colônias formadas de acordo com a diluição correspondente.

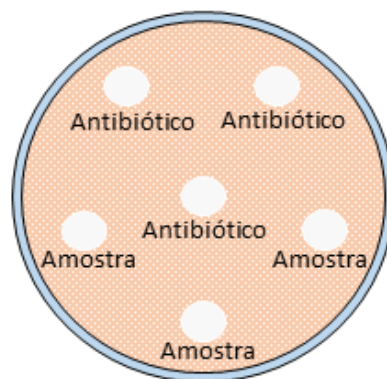
A concentração do inóculo inicial foi determinada pela equação 3 que se segue, de acordo com o que preconiza a ISO 7218.

$$N = \frac{\sum c}{vd(n_1 + 0,1 n_2)} \quad (3)$$

Na equação, $\sum c$ é a soma das colônias registradas nas duas últimas diluições, v é o volume do inóculo aplicado a cada placa em mililitros, d a taxa de diluição correspondente à primeira diluição contabilizada (10^{-5}), n_1 é o número de placas consideradas da primeira diluição contabilizada e n_2 é o número de placas consideradas na diluição seguinte.

Após todo o processo de preparação, o teste de susceptibilidade microbiana foi realizado nas placas de Petri. A partir do inóculo padronizado, 200 μL de suspensão mãe foram transferidos para a camada base de Mueller Hinton. Em cada placa (com diferentes cepas), foram adicionados 3 discos de papel com amostras do óleo essencial e 3 discos de antibiótico padrão (penicilina 10 mcg para *S. aureus* e Gentamicina para *E. coli* e *P. aeruginosa*). A figura 5 representa, esquematicamente, a placa de Petri para o ensaio de antibiograma. Diferentes placas de Petri foram preparadas para os diferentes microrganismos indicadores.

Figura 5 – Representação da placa de Petri para os ensaios antimicrobianos.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Após aplicação dos discos (e suas respectivas substâncias – padrão ou óleo), as placas foram incubadas por 18 horas a 37°C. Decorrido este período, as placas foram recolhidas e os halos de inibição foram registrados com auxílio de um paquímetro.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Rendimento do óleo essencial de *S. terebinthifolia* (raddi)

As 3 extrações do óleo essencial de *S. terebinthifolia* (Raddi) foram realizadas com massa próxima a 50 g e tempo de extração fixo em 120 minutos após a ebulição. A tabela 3 que se segue apresenta as massas utilizadas, os rendimentos calculados pela equação 1, a temperatura da extração e a média dos valores obtidos.

Tabela 3 – Rendimentos das extrações do óleo essencial de *S. terebinthifolia* (Raddi).

Extração	Massa utilizada (g)	Rendimento % (v/m)	Temperatura (°C)
1	50,3823	3,57	98
2	50,2358	3,98	96
3	50,2885	3,58	96
Média	50,3022	3,71	97

Fonte: Resultados da pesquisa

Nas condições descritas para a obtenção do óleo essencial, as extrações apresentaram rendimento médio de 3,71 % (v/m), um valor significativo por se tratar de extrações de óleo essencial.

Em um estudo realizado com *Schinus terebinthifolius*, Maggieri, Silva, Fileti, 2015 obtiveram rendimento de 4,09% quando utilizado base úmida de frutos da aroeira vermelha. O valor de rendimento cai para 3,74% quando utilizados frutos que sofreram o processo prévio de secagem. A diminuição do rendimento em função da temperatura ocorreu em função da sensibilidade do óleo essencial ao calor, resultando a queda no rendimento.

Em outro estudo acerca do rendimento do óleo essencial de frutos da aroeira vermelha, Carvalho et al., 2017 encontraram valores próximos a 5%, utilizando a técnica de hidrodestilação e uma posterior extração por centrifugação do óleo no hidrolato obtido. Este segundo processo pode ter contribuído para um incremento no rendimento do óleo essencial.

É importante ressaltar que a forma que o material vegetal foi submetido ao processo de hidrodestilação foi determinante para o rendimento obtido. Em testes

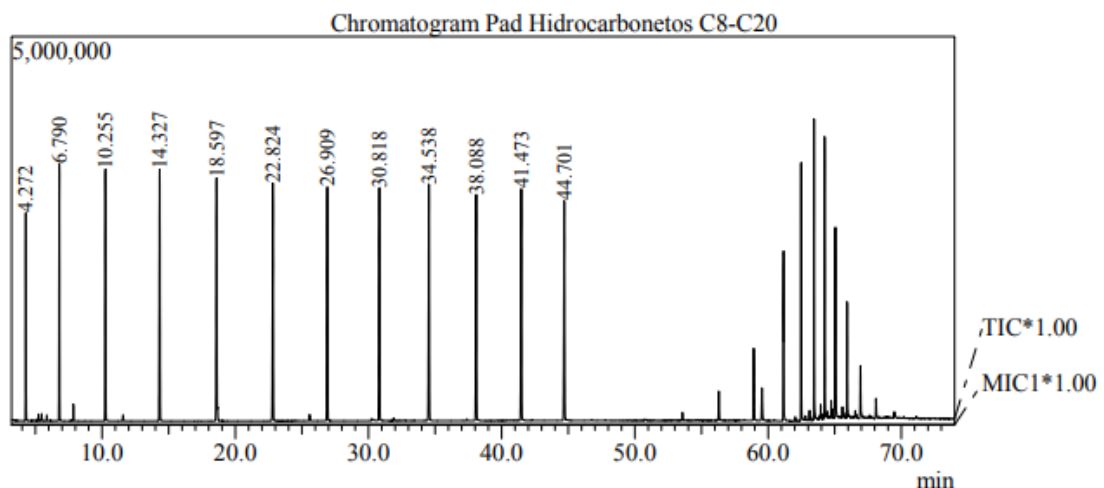
preliminares realizados com o fruto sem o processo de maceração não foi observado rendimento de óleo essencial significativo que viabilizasse a coleta. Este mesmo aspecto também foi observado por Nishimoto e Souza, 2016, em que o rendimento para o material não macerado e macerado variou de 0,14 a 10,22%.

De maneira geral, o rendimento do óleo essencial depende de vários fatores, como método empregado para extração, forma que o material vegetal é utilizado no sistema, condições de clima, solo e de variabilidade genética de cada espécie.

4.2 Caracterização química

A identificação dos componentes químicos foi baseada nos tempos de retenção observados e comparados aos espectros de massas obtidos da base de dados Wiley7, FFNSC1.3 e NIST08. Além disto, com base na curva padrão de hidrocarbonetos (figura 6), foi calculado o índice de retenção relativo (Índice de Kovats) para a determinação final da estrutura integrante da amostra de óleo essencial, cujo resultado serviu de parâmetro para comparação com dados de Adams (2017).

Figura 6 – Padrão de hidrocarbonetos para a determinação do índice de retenção relativo dos componentes do óleo essencial de aroeira vermelha, obtido por CG/EM, coluna EN5MS (30m x 0,25mm x 0,25µm) SGE Analytical Science

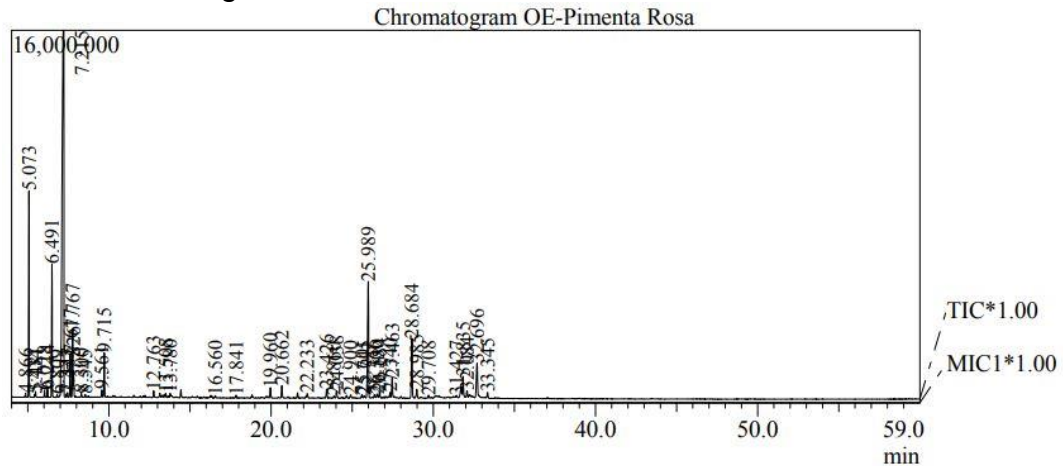


Fonte: Resultados da pesquisa

O cromatograma obtido para o óleo essencial de aroeira vermelha (figura 7) resultou em 46 picos, correspondentes a diferentes tempos de retenção e, conseqüentemente, a diferentes substâncias presentes na amostra. Para cada um

destes picos foi gerado um espectro de massas e uma possível estrutura correspondente àquele tempo de retenção, de acordo com dados de padrões estabelecidos.

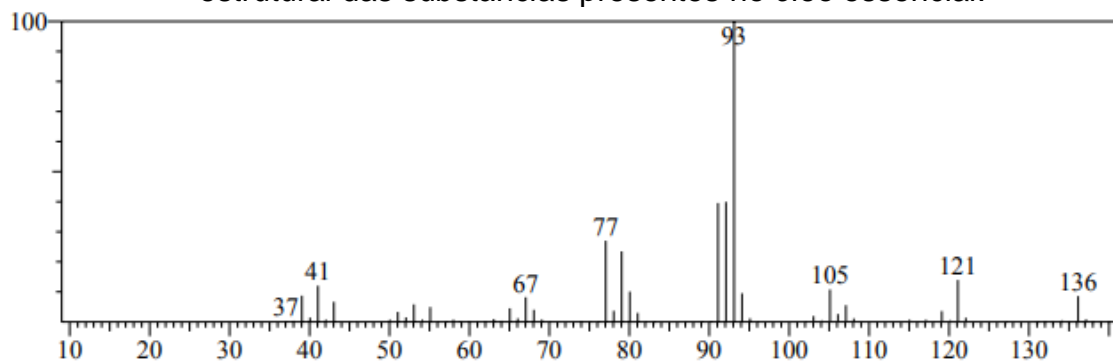
Figura 7 – Cromatograma do óleo essencial de *S. terebinthifolia* obtido em CG/EM.



Fonte: Resultados da pesquisa

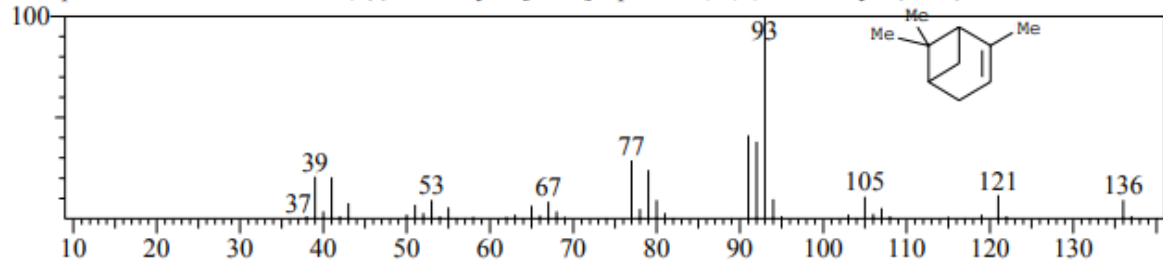
A figura 8 que se segue apresenta o espectro do pico com tempo de retenção correspondente a 5,075 min e suas possíveis estruturas, conforme banco de dados NIST08, Wiley 07 e FFNSC1.3 .

Figura 8 – (A) Espectro correspondente ao pico de tempo de retenção de 5,075min, área no cromatograma de 8,12%; (B, C e D) Espectros padrões similares ao obtido para amostra de pico 2, TR 5,075min. Tais espectros auxiliam na identificação estrutural das substâncias presentes no óleo essencial.



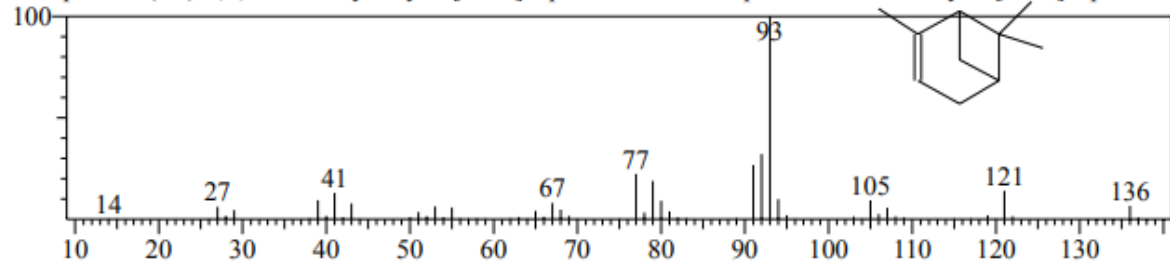
(A)

Hit#:1 Entry:26447 Library:WILEY7.LIB
 SI:97 Formula:C10H16 CAS:80-56-8 MolWeight:136 RetIndex:0
 CompName:..ALPHA.-PINENE, (-)- \$\$ Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6,6-trimethyl- (CAS) Pinene \$\$ 2-Pinen



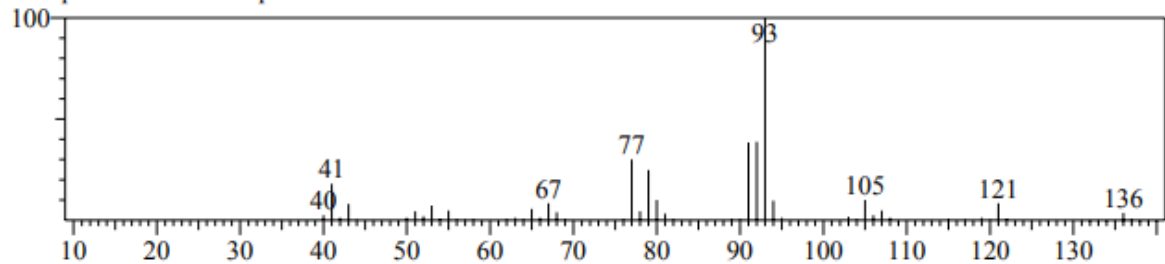
(B)

Hit#:2 Entry:9814 Library:NIST11.lib
 SI:96 Formula:C10H16 CAS:7785-70-8 MolWeight:136 RetIndex:948
 CompName:(1R)-2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]hept-2-ene \$\$ 1R-.alpha.-Pinene \$\$ Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene



(C)

Hit#:3 Entry:817 Library:FFNSCI.3.lib
 SI:96 Formula:C10H16 CAS:80-56-8 MolWeight:136 RetIndex:933
 CompName:Pinene <alpha->



(D)

Fonte: Resultados da pesquisa

A análise da similaridade entre os espectros do banco de dados e aqueles correspondentes à amostra é apenas uma das etapas no processo de identificação estrutural. Para cada pico identificado no cromatograma, foi calculado, por meio da equação 2, o índice de Kovats (IK). A comparação deste resultado com IK padrões, estabelecido em Adams 2017, asseguram a correta identificação estrutural do componente. Assim, a definição das estruturas foi baseada na análise destes dois parâmetros. A tabela 4 apresenta os IK calculados e tabelados.

Tabela 4 – Identificação dos componentes do óleo essencial de *S. terebinthifolia* (Raddi), com índice de Kovats calculados. Continua.

Nº	Nome do composto	IK (Calculado)	IK (Literatura)	Área (%)
1	α -Tujeno	928	930	0,11
2	α -Pino	937	939	8,12
3	α -Feneno	952	952	0,10
4	Canfeno	954	954	0,19
5	β –Pino	981	979	0,30
6	Mirceno	990	1002	5,96
7	2-Careno	1001	1002	0,13
8	δ -3-Careno	1015	1011	50,40
9	α -Terpino	1020	1017	0,12
10	p-Cimeno	1028	1029	1,93
11	Limoneno	1033	1029	2,98
12	β -felandreno	1034	1029	0,95
13	(E)- β -Ocimene	1049	1050	0,16
14	α -terpinoleno	1056	930	0,11
15	α -terpinoleno	1083	1088	0,33
16	β -Elemeno	1087	1088	2,03
17	p-Menta-1,5-dien-8-ol	1165	1170	0,34
18	p-Cimen-8-ol	1182	1182	0,20
19	α -Humuleno	1188	1252	0,14
20	Piperitone	1256	1252	0,11
21	Acetato de bornila	1284	1285	0,15
22	δ -Elemeno	1335	1338	0,61
23	Acetato de citronelila	1352	1352	0,71
24	β -Elemeno	1387	1390	0,24
25	trans-cariofileno	1416	1419	0,55
26	α -Bergamoteno	1431	1434	0,44
27	α -amorpheno	1470	1484	0,19
28	γ –Muurolo	1473	1479	0,15
29	Germacreno-D	1479	1481	9,05
30	Trans-Muurolo-4(14),5-diene	1488	1466	0,18
31	α -Muurolo	1495	1500	0,39

Tabela 4 – Identificação dos componentes do óleo essencial de *S. terebinthifolia* (Raddi), com índice de Kovats calculados. Conclusão

32	δ -cadineno	1515	1523	1,24
33	Elemol	1547	1549	4,02
34	Germacreno-B	1555	1561	0,59
35	γ -Eudesmol	1628	1632	1,44
36	α -Eudesmol	1652	1653	2,92
Total				97,58

Fonte: Dados da pesquisa.

A análise química do óleo essencial permitiu a identificação de pelo menos 36 substâncias, considerando o padrão de fragmentação, cálculo de IK e comparação com dados da literatura.

Os resultados mostraram que os componentes δ -3-careno, germacreno-D e o α -pineno são os componentes majoritários do óleo essencial, representando 50,4; 9,05 e 8,12% do total de substâncias detectadas no cromatograma. Resultado bem próximo do que foi encontrado por Santana et al., 2012, quando feita a análise do óleo essencial de amostras de *S. terebinthifolius*, sendo identificados os componentes α -pineno, δ -3-careno e mirceno como componentes majoritários da amostra, embora detectados em menor quantidade relativa.

Entretanto, há trabalhos que diferem quando a composição química do óleo essencial de espécies de *Schinus*, como aqueles encontrados por Bendaoud et al, 2010, onde mais de 40% da amostra correspondeu aos componentes α -pineno e γ -felandreno. Gundidza et al., 2009 apresentaram como componentes majoritários do óleo essencial de uma espécie de *Schinus* as substâncias sabineno, α -felandreno, β -mirceno, 1- β -pineno e α -pineno.

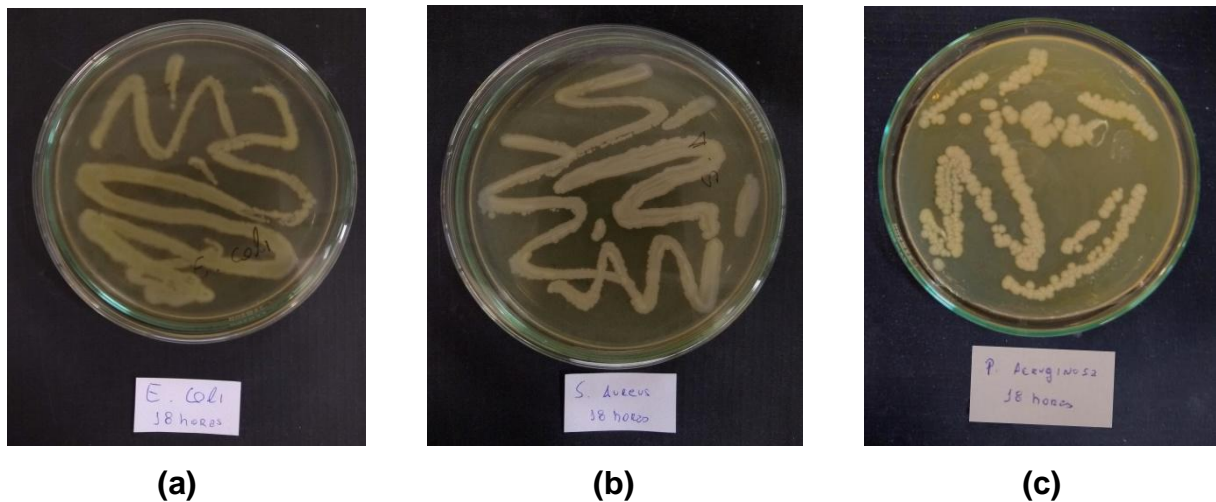
É muito comum a variação da composição química os óleos essenciais e de outros metabólitos secundários de uma planta. As condições de solo, aplicação ou não de fertilizantes, condições climáticas e geográfica são fatores que influenciam no tipo e na quantidade de metabólitos que são produzidos (Raut, Karuppayil, 2014). Interessante ressaltar neste momento que o perfil químico dos metabólitos de uma planta pode, inclusive, servir como parâmetro para seu mapeamento. Assim,

estudos desta natureza são muito importantes, uma vez que fornecem subsídios para o conhecimento da espécie.

4.3 Atividade antimicrobiana

No método de antibiograma, a substância teste (óleo essencial, neste caso) deve difundir em um meio de cultura, inoculado com o microrganismo indicador. Havendo atividade biológica, zonas de inibição são formadas e estas são comparadas com padrões de antibióticos conhecidos. A figura 9 mostra o resultado obtido com o processo de ativação do inóculo. Este inóculo foi utilizado na produção das placas de antibiograma.

Figura 9 – Placas de Petri contendo os inóculos de *E.coli* (A), *S.aureus* (B) e *P. aeruginosa* (C). Estes microrganismos foram utilizados como indicadores no processo de avaliação da atividade antimicrobiana do óleo essencial de aroeira vermelha.



Fonte: Fotos do autor.

Na tabela 5 são apresentados os valores dos halos de inibição apurados no teste de atividade do óleo essencial. Os discos de antibiótico padrão correspondem a Gentamicina para *E. coli* e *P. aeruginosa* e penicilina para *S. aureus*. Os valores foram mensurados em milímetros.

Tabela 5 – Diâmetros dos halos de inibição apurados no teste de atividade antimicrobiana do óleo essencial de aroeira vermelha.

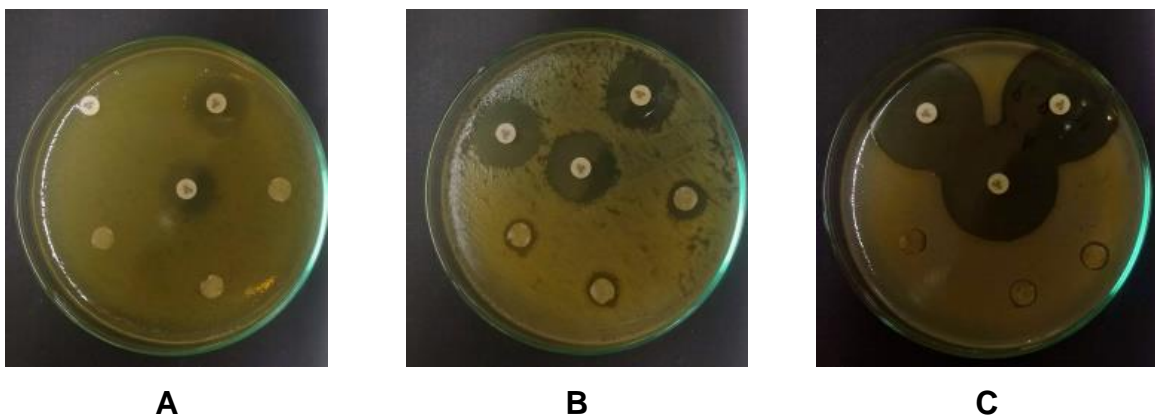
Microrganismo indicador	Diâmetro do halo (mm)/óleo essencial	Diâmetro do halo (mm)/controle +
<i>P. aeruginosa</i>	1,65	6,82
	1,72	7,71
	2,10	7,62
Média	1,82	7,38
<i>E. coli</i>	nd	4,89
	nd	4,96
	nd	nd
Média	-	4,92
<i>S. aureus</i>	0,58	13,66
	0,32	13,72
	0,34	14,27
Média	0,41	13,88

nd: não detectado.

Fonte: Dados da pesquisa.

De acordo com os resultados apresentados na tabela 4, pode-se verificar que não houve formação de halo de inibição para a cepa de *E. coli*, uma vez que foi observado o crescimento microbiano ao redor do disco de papel embebido com óleo essencial. Por outro lado, para as cepas de *S. aureus* e *P. aeruginosa*, verificou-se indícios de inibição do crescimento microbiano. A figura 10 exibe os antibiogramas correspondentes aos três microrganismos indicadores utilizados, preparados na forma da figura 5.

Figura 10 – Aspecto das placas de antibiograma do óleo essencial de aroeira vermelha. Microrganismos indicadores: (A) *E. coli*, (B) *P.aeruginosa* e (C) *S. aureus*.



Fonte: Fotos do autor

Vale ressaltar que o disco de Gentamicina que não apresentou inibição frente às cepas de *E. coli* descolou-se do ágar na etapa de inverter placa para incubação e caiu sobre a tampa. Após a incubação, as placas foram invertidas novamente para leitura dos resultados e o disco movimentou-se para a posição que se encontra na figura 10 – A (disco superior esquerdo). O deslocamento do disco impossibilitou a inibição do antibiótico visto que não teve contato com o microrganismo no período de incubação.

5 CONCLUSÃO

A análise química do óleo essencial de *Schinus terebinthifolia* permitiu a identificação de pelo menos 36 substâncias, sendo o δ -3-careno, germacreno-D e o α -pineno os componentes majoritários, representando 50,4; 9,05 e 8,12% do total de substâncias detectadas no cromatograma. Ressalta-se ainda que o método de extração escolhido (sistema de hidrodestilação) foi adequado para a obtenção do óleo, considerando o rendimento médio de 3,71%, comum para amostras de óleo essencial.

Quanto aos dados de atividade antimicrobiana, pode-se concluir que na composição química do óleo essencial há substâncias químicas capazes de inibir o crescimento de *S. aureus* e *P. aeruginosa*. Tal resultado é um importante parâmetro para o desenvolvimento de novos agentes com atividade antimicrobiana. Entretanto, novos estudos poderão ser realizados com o objetivo de potencializar tais atividades biológicas, ampliando o espectro de ação das substâncias que compõem o óleo essencial desta espécie.

Por fim, um ponto importante que pode ser levantado com este trabalho é a sua importância na veiculação em discussões acerca da importância da flora brasileira (e mundial) no desenvolvimento de novos fármacos e da necessidade de preservação de espécies vegetais.

REFERÊNCIAS

- ABOLGHASEMI, Asma et al. Composition of Pistacia khinjuk (Anacardiaceae) Leaf Essential Oil and its Insecticidal Activity on Common Pistachio Psyllid, *Agonoscena pistaciae* (Hem., Psylloidea). **Journal of Essential Oil Bearing Plants**, v. 21, n. 3, p. 796-802, 2018.
- ADAMS, Robert P. et al. **Identification of essential oil components by gas chromatography/mass spectrometry**. Carol Stream, IL: Allured publishing corporation, 2007.
- AJILEYE, O. O. et al. Isolation and characterization of antioxidant and antimicrobial compounds from *Anacardium occidentale* L.(Anacardiaceae) leaf extract. **Journal of King Saud University-Science**, v. 27, n. 3, p. 244-252, 2015.
- ALIA, A. H. N. A.; SHUKRI, MA Mohd; RAZALI, M. Antimicrobial potency of essential oil from cashew (*Anacardium occidentale* Linn.) clones. **J. Trop. Agric**, v. 44, p. 73-80, 2016.
- AL-RUBAYE, Abeer Fauzi; HAMEED, Imad Hadi; KADHIM, Mohanad Jawad. A Review: Uses of Gas Chromatography-Mass Spectrometry (GC-MS) Technique for Analysis of Bioactive Natural Compounds of Some Plants. **International Journal of Toxicological and Pharmacological Research**, v. 9, n. 1, p. 81-85, 2017.
- ALTENDORF, S. 2019. Major tropical fruits market review 2018. **Food and Agriculture Organization of the United Nations**, Rome, Italy.
- ARAUJO, Márcio Martins de; LONGO, Priscila Larcher. In vitro antibacterial activity of *Origanum vulgare* (oregano) essential oil against *Escherichia coli* and *Staphylococcus aureus* strains. **Arquivos do Instituto Biológico**, v. 83, 2016.
- ATANASSOV, Lyubomir M. et al. Phenolic Compounds In Traditional Bulgarian Medical Plants. **The Journal of Microbiology, Biotechnology and Food Sciences**, v. 6, n. 2, p. 858, 2016.
- BALBINO, Eliane et al. Genome survey and development of 18 microsatellite markers to assess genetic diversity in *Spondias tuberosa* Arruda Câmara (Anacardiaceae) and cross-amplification in congeneric species. **Molecular biology reports**, p. 1-7, 2019.
- BALDIM, Lara et al. Lippia sidoides essential oil encapsulated in lipid nanosystem as an anti-Candida agent. **Industrial crops and products**, v. 127, p. 73-81, 2019.
- BARBOSA, Luiz Cláudio Almeida et al. Seasonal variation in the composition of volatile oils from *Schinus terebinthifolius* raddi. **Quím. Nova**, São Paulo, v. 30, n. 8, p. 1959-1965, 2007.
- BASER, K. Husnu Can; BUCHBAUER, Gerhard. **Handbook of essential oils: science, technology, and applications**. CRC press, 2015.

BEKTAŞ, Ersan et al. In vitro antimicrobial, antioxidant, and antiviral activities of the essential oil and various extracts from *Thymus nummularis* M. Bieb. **Niscair-csir**, 2016.

BENDAOUD, Houcine et al. Chemical composition and anticancer and antioxidant activities of *Schinus molle* L. and *Schinus terebinthifolius* Raddi berries essential oils. **Journal of food Science**, v. 75, n. 6, p. C466-C472, 2010.

BISHT, Balam Singh; KUMAR, Amit. Terpenoid composition of *Chenopodium ambrosioides* L. and its Antimicrobial activity from Uttarakhand Himalaya of India. **Journal of Drug Delivery and Therapeutics**, v. 9, n. 4-A, p. 612-617, 2019.

BLOWMAN, K. et al. Anticancer properties of essential oils and other natural products. **Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine**, v. 2018, 2018.

CAMPOLO, Orlando et al. Essential oils in stored product insect pest control. **Journal of Food Quality**, v. 2018, 2018.

CARVALHO, J. A. M. et al. Composição Química e Avaliação da Atividade Antimicrobiana do Óleo de Pimenta Rosa (*Schinus terebinthifolius*). **Blucher Chemical Engineering Proceedings**, v. 4, n. 1, p. 59-63, 2017.

CHRISTENSEN, Lars Porskjær. Polyphenols and polyphenol-derived compounds from plants and contact dermatitis. In: **Polyphenols: Prevention and Treatment of Human Disease**. Academic Press, 2018. p. 349-384.

DE ALMEIDA, Anderson Soares et al. Óleo de pequi (*Caryocar brasiliense* Camb) métodos de extração, constituição química e propriedades medicinais. **Diversitas Journal**, v. 3, n. 3, p. 557-563, 2018.

DO PRADO, Ana Carolina et al. *Schinus molle* essential oil as a potential source of bioactive compounds: antifungal and antibacterial properties. **Journal of applied microbiology**, v. 126, n. 2, p. 516-522, 2019.

EN ISO 9235. ICS 71.100.60; 01.040.71. English Version. Aromatic natural raw materials- Vocabulary (ISO 9235:2013). 2013.

FU, Qiong-Yao et al. Mummified fruits of *Choerospondias nanningensis* sp. nov. (Anacardiaceae) from the upper Oligocene of a low latitude site in East Asia. **Journal of systematics and evolution**, v. 55, n. 5, p. 477-483, 2017.

GERHARDT, N. S. **AVALIAÇÃO DA QUALIDADE DOS FRUTOS DE GENÓTIPOS DE AROEIRA (*Schinus Terebinthifolius* Raddi) EM DIFERENTES ESTÁDIOS DE MATURAÇÃO**. 2018. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Espírito Santo.

GUNDIDZA, M. et al. Chemical composition and biological activities of essential oil from the leaves of *Sesuvium portulacastrum*. **Journal of Ethnopharmacology**, v. 103, n. 1, p. 85-89, 2006.

HAMAD, A. et al. Chemical constituents and antimicrobial activities of essential oils of *Syzygium polyanthum* and *Syzygium aromaticum*. **Rasayan J Chem**, v. 10, n. 2, p. 564-9, 2017.

IERI, Francesca et al. GC-MS and HS-SPME-GC× GC-TOFMS Determination of the Volatile Composition of Essential Oils and Hydrosols (By-Products) from Four Eucalyptus Species Cultivated in Tuscany. **Molecules**, v. 24, n. 2, p. 226, 2019.

KHORSHIDIAN, N., YOUSEFI, M., KHANNIRI, E., & MORTAZAVIAN, A. M. Potential application of essential oils as antimicrobial preservatives in cheese. **Innovative Food Science & Emerging Technologies**, 45, 62–72. 2018.

KINSLEY, Charles; NGUYEN, D. Thieu. Antimicrobial Activity of Extracts from *Rhus integrifolia*. **Agriculture and Biology Journal of North America**, v. 7, n. 5, p. 284-286, 2016.

LIMA, M. R. F.; LUNA, J. S.; SANTOS, A.F.; ANDRADE, M. C. C.; SANT'ANA, A. E. G.; GENET, J. P.; MARQUEZ, B.; NEUVILLE, L.; MOREAU, N. Anti-bacterial activity of some Brazilian medicinal plants. **Journal of Ethnopharmacology**, v. 105, p. 137–147, 2006.

LORENZI, H. & MATOS, F.J.A. **Plantas Medicinais no Brasil: nativas e exóticas**. 2ª ed. Nova Odessa, Instituto Plantarum, 2008.

LUNA, Emanuela Coutinho et al. Active Essential Oils and Their Components in Use against Neglected Diseases and Arboviruses. **Oxidative medicine and cellular longevity**, v. 2019, 2019.

MAGGIERI, MGA; SILVA, B. G.; FILETI, AMF. Influência do pré-tratamento da matéria-prima na obtenção de óleo essencial de frutos de aroeira-vermelha (*Schinus terebinthifolius* Raddi). **Blucher Chemical Engineering Proceedings**, v. 1, n. 3, p. 2099-2104, 2015.

MARTINEZ, M. J. et al. 1996. Screening of Cuban medicinal plants for antimicrobial activity. **Journal of Ethnopharmacology** 52, 171–174.

MUNIRAJA, M. et al. A developmental study on anther wall and pollen in *Mangifera indica* L. var. Beneshan (Anacardiaceae). **South African Journal of Botany**, v. 119, p. 142-153, 2018.

MUÑOZ, Guillermo Riesco; ENCINAS, José Imaña; DE PAULA, José Elias. Wood density as an auxiliary classification criterion for botanical identification of 241 tree species in the order Sapindales. **European Journal of Forest Research**, p. 1-12, 2019.

NISHIMOTO, K. S. **Extração do óleo essencial da schinus terebinthifolius raddi e avaliação da eficiência bactericida do sabonete desenvolvido**. 2016. Tese de Doutorado. UNIVERSIDADE DO VALE DO PARAÍBA.

PAGANI, Alessandra Almeida Castro et al. Quantification of bioactive compounds of pink pepper (*Schinus Terebinthifolius*, Raddi). **International Journal of Engineering and Innovative Technology**, v. 4, p. 37-41, 2014.

PERRICONE, Marianne et al. Bioactivity of essential oils: a review on their interaction with food components. **Frontiers in microbiology**, v. 6, p. 76, 2015.

PHONGKRATHUNG, Renupha; VAJRODAYA, Srunya; KERMANEE, Prasart. Wood anatomy and properties of three species in the genus *Spondias lakonensis* (Anacardiaceae) found in Thailand. **Agriculture and Natural Resources**, v. 50, n. 1, p. 14-19, 2016.

RAJA, M. R. C. et al. Versatile and synergistic potential of eugenol: a review. **Pharm Anal Acta**, v. 6, n. 5, p. 367, 2015.

RAUT, Jayant Shankar; KARUPPAYIL, Sankunny Mohan. A status review on the medicinal properties of essential oils. **Industrial crops and products**, v. 62, p. 250-264, 2014.

REMILA, Saliha et al. Antioxidant, cytoprotective, anti-inflammatory and anticancer activities of *Pistacia lentiscus* (Anacardiaceae) leaf and fruit extracts. **European Journal of Integrative Medicine**, v. 7, n. 3, p. 274-286, 2015.

REY-VALEIRÓN, Catalina et al. Acaricidal effect of *Schinus molle* (Anacardiaceae) essential oil on unengorged larvae and engorged adult females of *Rhipicephalus sanguineus* (Acari: Ixodidae). **Experimental and Applied Acarology**, v. 76, n. 3, p. 399-411, 2018.

ROMANI, Annalisa et al. Health Effects of Phenolic Compounds Found in Extra-Virgin Olive Oil, By-Products, and Leaf of *Olea europaea* L. **Nutrients**, v. 11, n. 8, p. 1776, 2019.

SAHARKHIZ, Mohammad Jamal et al. Chemical compositions and antimicrobial activities of *Ocimum sanctum* L. essential oils at different harvest stages. **Jundishapur journal of microbiology**, v. 8, n. 1, 2015.

SANTANA, J. S. et al. Essential oils from *Schinus terebinthifolius* leaves—chemical composition and in vitro cytotoxicity evaluation. **Pharmaceutical Biology**, v. 50, n. 10, p. 1248-1253, 2012.

SANTOS, Suikinai Nobre et al. Chemical composition and antibacterial activity of the essential oil of *Hyptis leucocephala*. **Atas de Saúde Ambiental-ASA (ISSN 2357-7614)**, v. 3, n. 1, p. 03-11, 2015.

SCHULZE-KAYSERS, N.; FEUEREISEN, M. M.; SCHIEBER, A. Phenolic compounds in edible species of the *Anacardiaceae* family—a review. **RSC Advances**, v. 5, n. 89, p. 73301-73314, 2015.

SIDDIQUI, Imran Ali et al. Suppression of *Meloidogyne javanica* by *Pseudomonas aeruginosa* IE-6S+ in tomato: the influence of NaCl, oxygen and iron levels. **Soil Biology and Biochemistry**, v. 35, n. 12, p. 1625-1634, 2003.

SILVEIRA, JENIFFER C.; COSTA, ANDRÉA OS DA; JUNIOR, COSTA. Modelagem da extração de óleos essenciais empregando coeficiente de difusão variável. **Engenharia agrícola**, v. 35, n. 2, p. 302-312, 2015.

SLAUGHTER, Robin; BEASLEY, Michael; SCHEP, Leo. Dermatitis due to Toxicodendron plants: a common occurrence during autumn. **The New Zealand Medical Journal (Online)**, v. 130, n. 1451, p. 82, 2017.

TÖLKE ED, Bachelier JB, de Lima EA, Ferreira MJP, Demarco D, Carmello-Guerreiro SM. 2018. Osmophores and floral fragrance in *Anacardium humile* and *Mangifera indica* (Anacardiaceae): an overlooked secretory structure in Sapindales. **AoB PLANTS** 10: ply062;

VENTURA, J. A. et al. Plantas medicinais e aromáticas do Espírito Santo: o óleo essencial de folhas e frutos da espécie *Schinus terebinthifolia* RADDI (Aroeira vermelha). 2019.

VINATORU, M.; MASON, T. J.; CALINESCU, I. Ultrasonically assisted extraction (UAE) and microwave assisted extraction (MAE) of functional compounds from plant materials. **TrAC Trends in Analytical Chemistry**, v. 97, p. 159-178, 2017

WEEKS, Andrea et al. To move or to evolve: contrasting patterns of intercontinental connectivity and climatic niche evolution in "Terebinthaceae"(Anacardiaceae and Burseraceae). **Frontiers in Genetics**, v. 5, p. 409, 2014.

YOUSAF, Ali; ZUHARAH, Wan Fatma. Lethal response of the dengue vectors to the plant extracts from family Anacardiaceae. **Asian Pacific Journal of Tropical Biomedicine**, v. 5, n. 10, p. 812-818, 2015.

ANEXO A – EXCICATA DE IDENTIFICAÇÃO DA AMOSTRA DE *S. terebinthifolia*,
DEPOSITADA NO JARDIM BOTÂNICO DE BRASÍLIA.



JARDIM BOTÂNICO DE BRASÍLIA

Brasil

Distrito Federal

Herbário HEPH - 35939

Anacardiaceae

Schinus terebinthifolia

var. *raddiana* Engl.

Det.: Rosa, PO November 2019

Popular: Aroeira-vermelha

Brasil, Distrito Federal, Brasília: Asa Norte, perímetro urbano.
Desenvolvida no solo vermelho do cerrado. Área antropizada. 15°
47'36" S, 47°51'31" W

Árvore de aproximadamente 2,5 m de altura, com flores de coloração
verde creme e frutos maduros de coloração vermelha.

Coletada para fins de trabalho de conclusão do curso de licenciatura...

Leg.: Correa, T.C.V.

No s.n.

Duplicatas: HEPH

17/10/2019

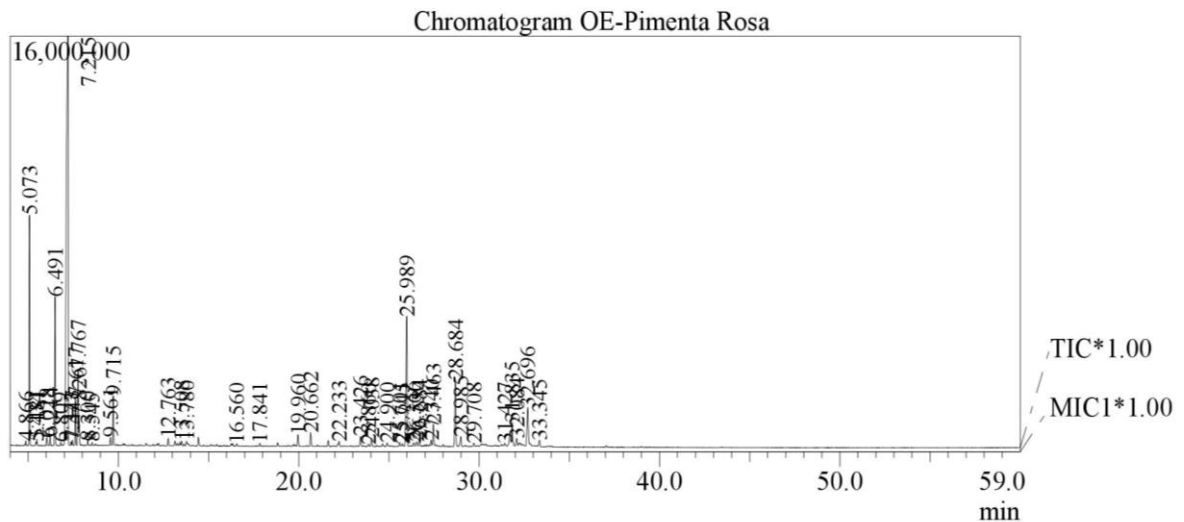


HEPH00032444

**ANEXO – B CROMATOGRAMA DO ÓLEO ESSENCIAL DE *S. terebinthifolia* E
ESPECTROS VINCULADOS.**

Sample Information

Analyzed by : Admin
 Analyzed : 17/10/2019 15:13:15
 Sample Type : Unknown
 Level # : 1
 \$EndIf\$IS Amount : [1]=1
 Sample Amount : 1
 Dilution Factor : 1
 Vial # : 1
 Injection Volume : 1.00
 Data File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\Marley\OE_17-10-2019\OE-Pimenta
 Method File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\Marley\R Adams.qgm
 Org Method File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\Marley\R Adams.qgm
 Report File :
 Tuning File : C:\GCMSsolution\System\Tune1\2019\07-10-2019.qgt



Peak Report TIC

Peak#	R. Time	Area	Area%	Name
1	4.866	269297	0.11	.alpha.-Thujene
2	5.073	20544898	8.12	.ALPHA.-PINENE, (-)-
3	5.434	260187	0.10	Fenchene <alpha->
4	5.481	480375	0.19	Camphene
5	6.028	872190	0.34	Cymene <para->
6	6.214	754764	0.30	2-.BETA.-PINENE
7	6.491	15096337	5.96	Myrcene
8	6.809	337372	0.13	2-Carene
9	7.215	127583243	50.40	.DELTA.3-Carene
10	7.373	299415	0.12	.alpha.-Terpinene
11	7.447	443737	0.18	Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (
12	7.617	4875945	1.93	Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (
13	7.767	7545456	2.98	Limonene

Peak#	R.Time	Area	Area%	Name
14	7.826	2415918	0.95	.beta.-Phellandrene
15	8.300	414134	0.16	Ocimene <(E)-, beta->
16	8.545	273917	0.11	.alpha.-Thujene
17	9.561	836845	0.33	.ALPHA.-TERPINOLENE
18	9.715	5150752	2.03	.ALPHA.-TERPINOLENE
19	12.763	848699	0.34	p-Mentha-1,5-dien-8-ol
20	13.508	515324	0.20	Cymen-8-ol <para->
21	13.780	349004	0.14	
22	16.560	277186	0.11	2-Cyclohexen-1-one, 3-methyl-6-(1-met
23	17.841	367459	0.15	Bornyl acetate
24	19.960	1532857	0.61	Elemene <delta->
25	20.662	1792049	0.71	6-Octen-1-ol, 3,7-dimethyl-, acetate
26	22.233	615658	0.24	.BETA. ELEMENE
27	23.426	1395511	0.55	trans-Caryophyllene
28	23.860	221508	0.09	
29	24.038	1119890	0.44	Bergamotene <alpha-, cis->
30	24.900	463102	0.18	
31	25.601	473142	0.19	Amorphene <delta->
32	25.745	391973	0.15	Cadinene <gamma->
33	25.989	22901163	9.05	GERMACRENE-D
34	26.366	462930	0.18	Muurola-4(14),5-diene <cis->
35	26.530	757183	0.30	
36	26.684	979642	0.39	.alpha.-Muurolene
37	27.340	718343	0.28	4-epi-cubedol
38	27.463	3135189	1.24	Cadinene <delta->
39	28.684	10165885	4.02	Elemol <alpha->
40	28.985	1494049	0.59	Germacrene B
41	29.708	425595	0.17	
42	31.427	297635	0.12	8-epi-.gama.-eudesmol
43	31.835	3644528	1.44	.gama.-eudesmol
44	32.084	1101854	0.44	
45	32.696	7382924	2.92	2-Naphthalenemethanol, 1,2,3,4,4a,5,6,8
46	33.345	867870	0.34	Elemol <alpha->
		253152934	100.00	

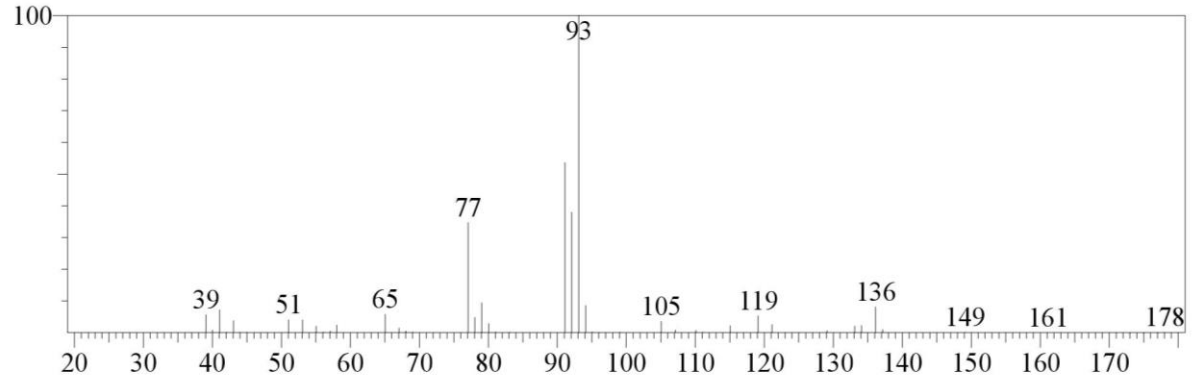
Library

<< Target >>

Line#: 1 R.Time: 4.865(Scan#: 174) MassPeaks: 52

RawMode: Averaged 4.860-4.870(173-175) BasePeak: 93.10(47751)

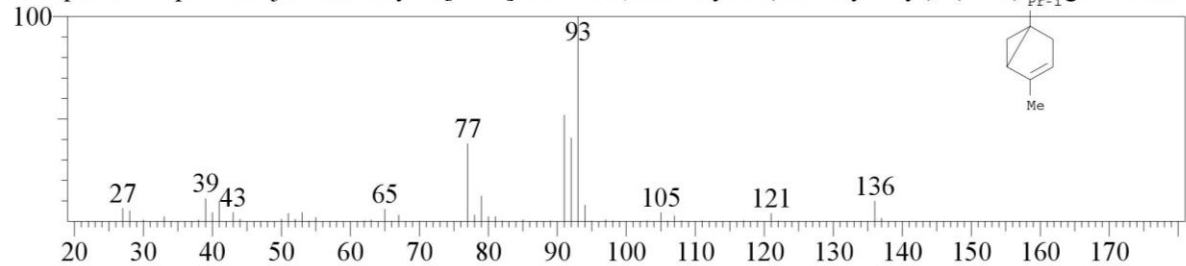
BG Mode: Calc. from Peak



Hit#: 1 Entry: 26414 Library: WILEY7.LIB

SI: 94 Formula: C₁₀H₁₆ CAS: 2867-05-2 MolWeight: 136 RetIndex: 0

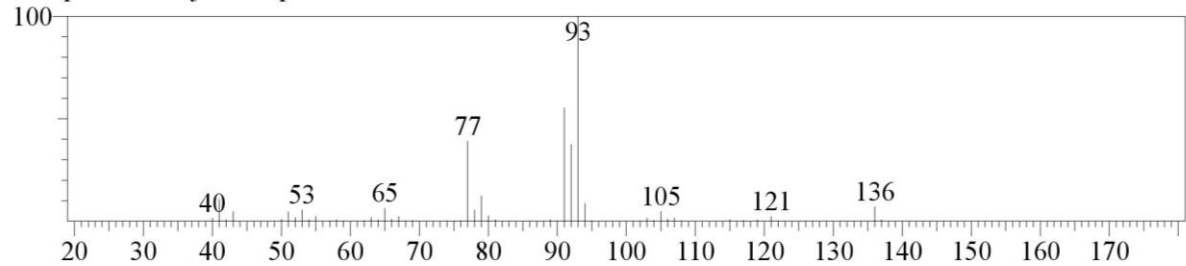
CompName: .alpha.-Thujene \$\$ Bicyclo[3.1.0]hex-2-ene, 2-methyl-5-(1-methylethyl)- (CAS) Origanene \$\$:



Hit#: 2 Entry: 957 Library: FFNSC1.3.lib

SI: 94 Formula: C₁₀H₁₆ CAS: 2867-05-2 MolWeight: 136 RetIndex: 927

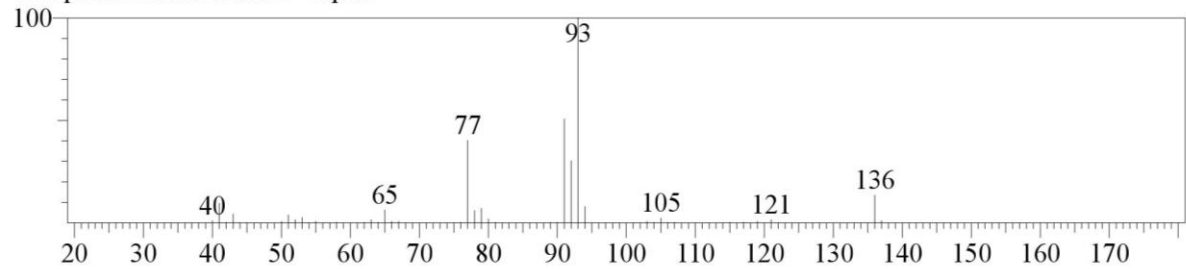
CompName: Thujene <alpha->



Hit#: 3 Entry: 648 Library: FFNSC1.3.lib

SI: 93 Formula: C₁₀H₁₆ CAS: 99-83-2 MolWeight: 136 RetIndex: 1007

CompName: Phellandrene <alpha->

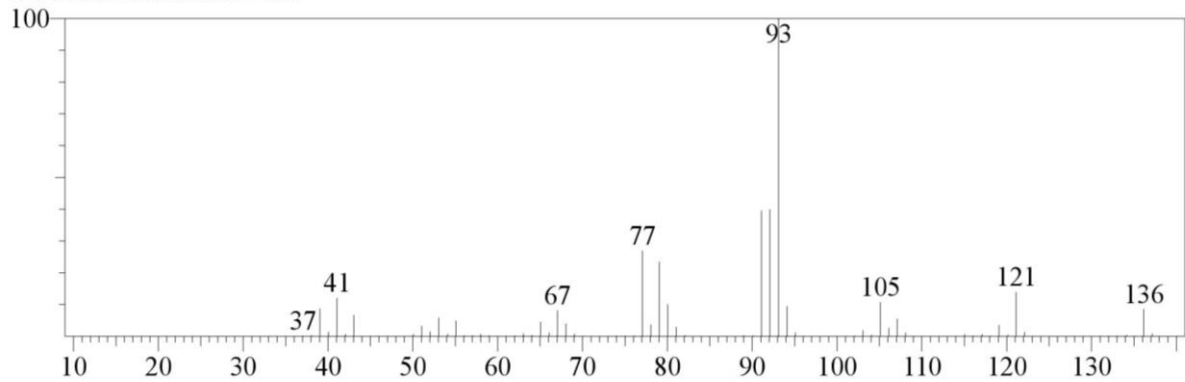


<< Target >>

Line#:2 R.Time:5.075(Scan#:216) MassPeaks:78

RawMode:Averaged 5.070-5.080(215-217) BasePeak:93.10(2245558)

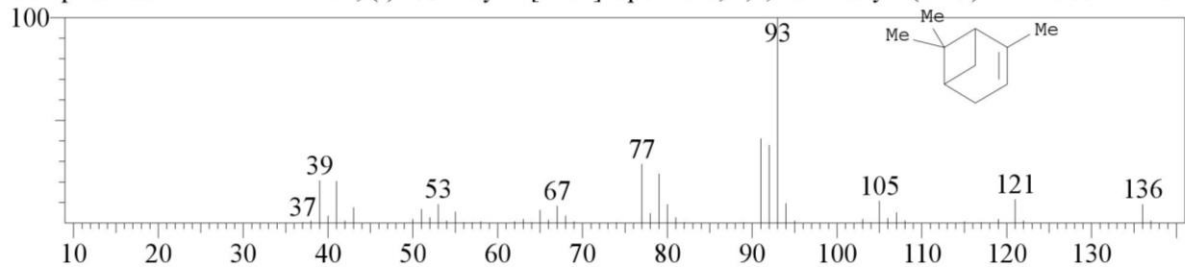
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:26447 Library:WILEY7.LIB

SI:97 Formula:C10H16 CAS:80-56-8 MolWeight:136 RetIndex:0

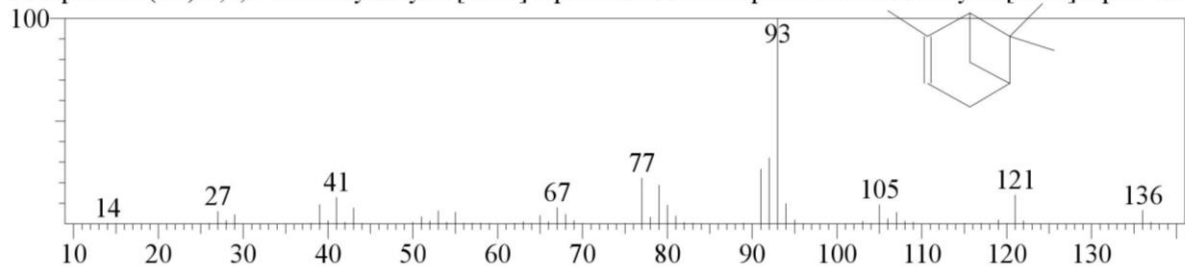
CompName:..ALPHA.-PINENE, (-)- \$\$ Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6,6-trimethyl- (CAS) Pinene \$\$ 2-Pinen



Hit#:2 Entry:9814 Library:NIST11.lib

SI:96 Formula:C10H16 CAS:7785-70-8 MolWeight:136 RetIndex:948

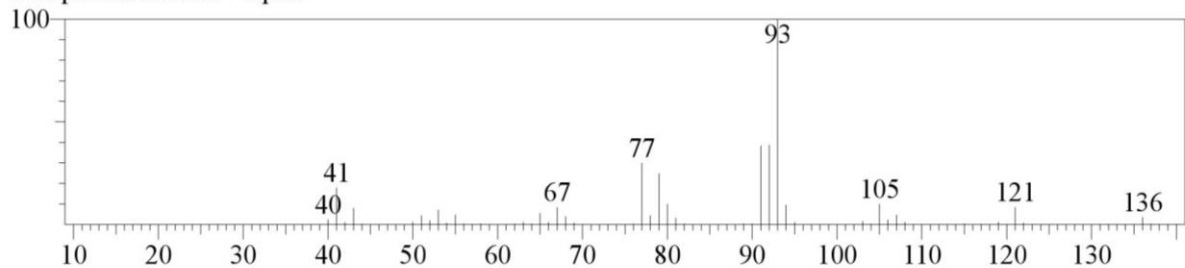
CompName:(1R)-2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]hept-2-ene \$\$ 1R-.alpha.-Pinene \$\$ Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene



Hit#:3 Entry:817 Library:FFNSC1.3.lib

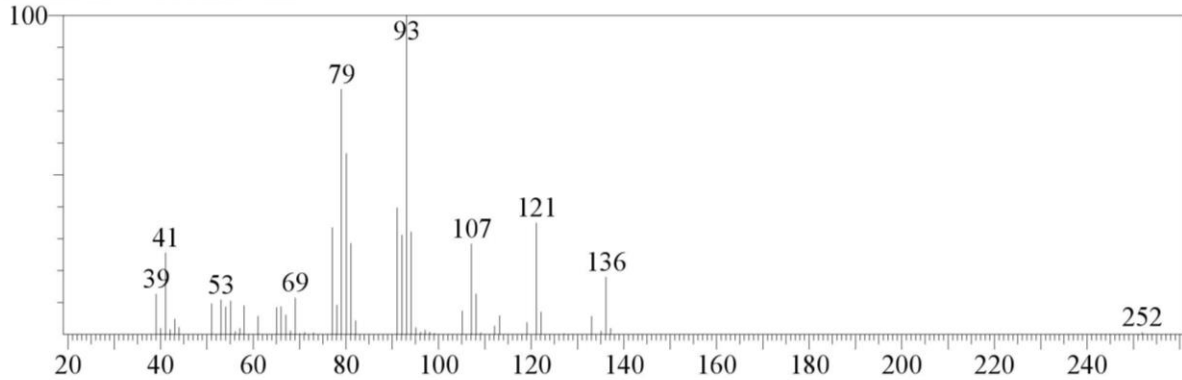
SI:96 Formula:C10H16 CAS:80-56-8 MolWeight:136 RetIndex:933

CompName:Pinene <alpha->

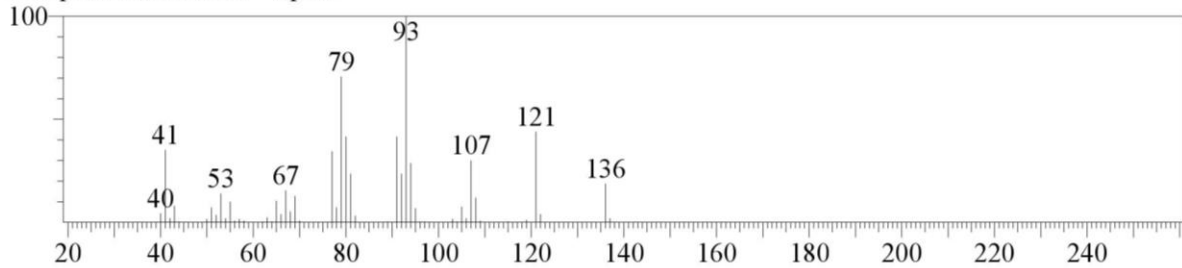


<< Target >>

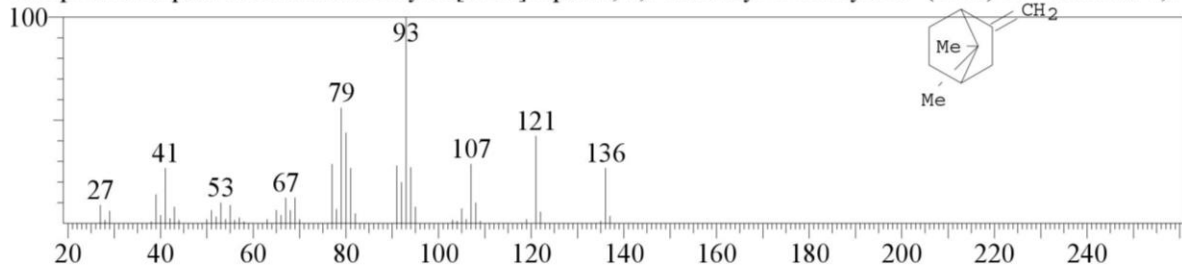
Line#:3 R.Time:5.435(Scan#:288) MassPeaks:52
 RawMode:Averaged 5.430-5.440(287-289) BasePeak:93.10(11808)
 BG Mode:Calc. from Peak



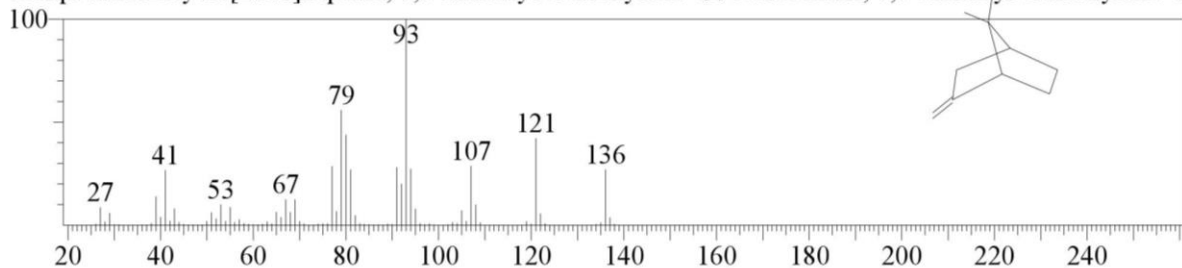
Hit#:1 Entry:1287 Library:FFNSC1.3.lib
 SI:92 Formula:C10 H16 CAS:471-84-1 MolWeight:136 RetIndex:948
 CompName:Fenchene <alpha->



Hit#:2 Entry:26389 Library:WILEY7.LIB
 SI:91 Formula:C10 H16 CAS:471-84-1 MolWeight:136 RetIndex:0
 CompName:.alpha.-Fenchene \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptane, 7,7-dimethyl-2-methylene- (CAS) Fenchene \$\$ 7,7-

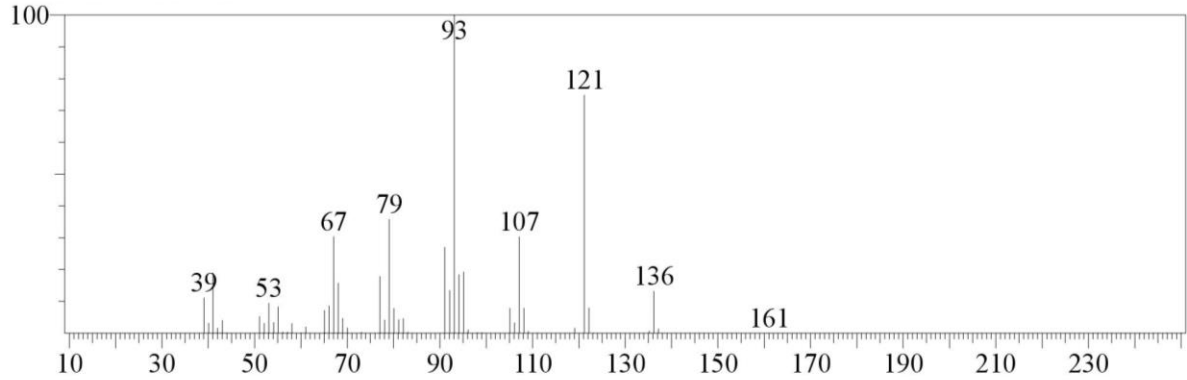


Hit#:3 Entry:9795 Library:NIST11.lib
 SI:91 Formula:C10H16 CAS:471-84-1 MolWeight:136 RetIndex:943
 CompName:Bicyclo[2.2.1]heptane, 7,7-dimethyl-2-methylene- \$\$ Norbornane, 7,7-dimethyl-2-methylene- \$



<< Target >>

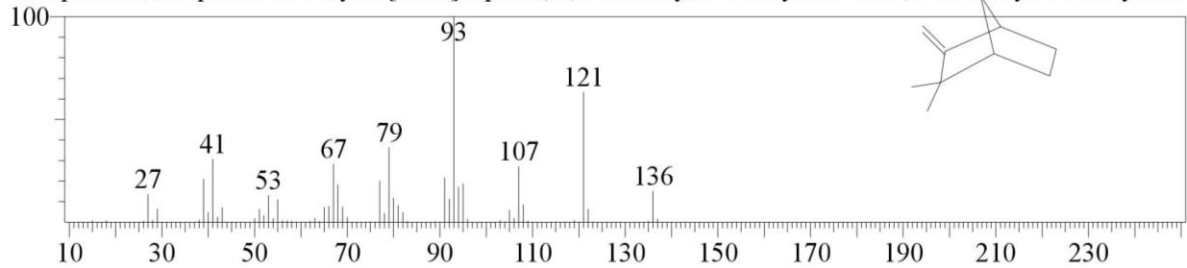
Line#:4 R.Time:5.480(Scan#:297) MassPeaks:55
 RawMode:Averaged 5.475-5.485(296-298) BasePeak:93.10(36149)
 BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:6672 Library:NIST11s.lib

SI:95 Formula:C₁₀H₁₆ CAS:79-92-5 MolWeight:136 RetIndex:943

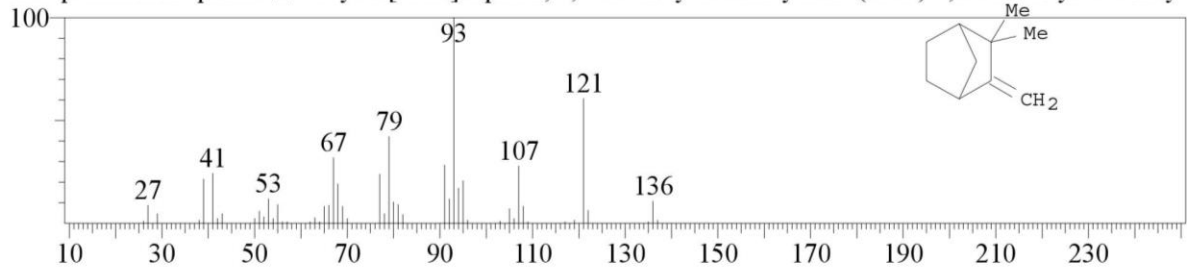
CompName:Camphene \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptane, 2,2-dimethyl-3-methylene-



Hit#:2 Entry:26396 Library:WILEY7.LIB

SI:95 Formula:C₁₀H₁₆ CAS:79-92-5 MolWeight:136 RetIndex:0

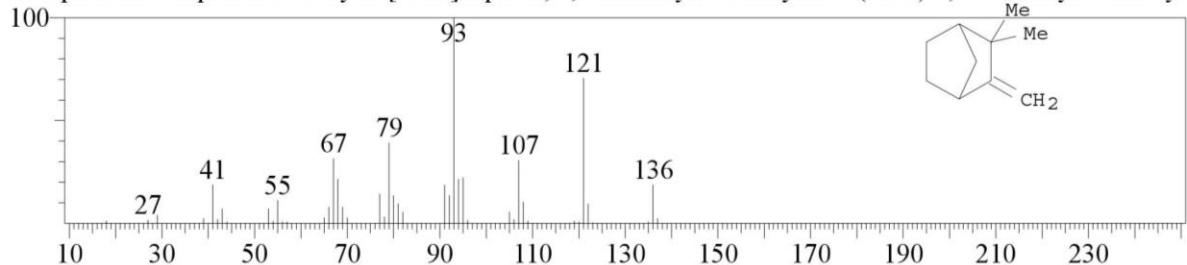
CompName:Camphene \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptane, 2,2-dimethyl-3-methylene-



Hit#:3 Entry:26406 Library:WILEY7.LIB

SI:94 Formula:C₁₀H₁₆ CAS:79-92-5 MolWeight:136 RetIndex:0

CompName:Camphene \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptane, 2,2-dimethyl-3-methylene-

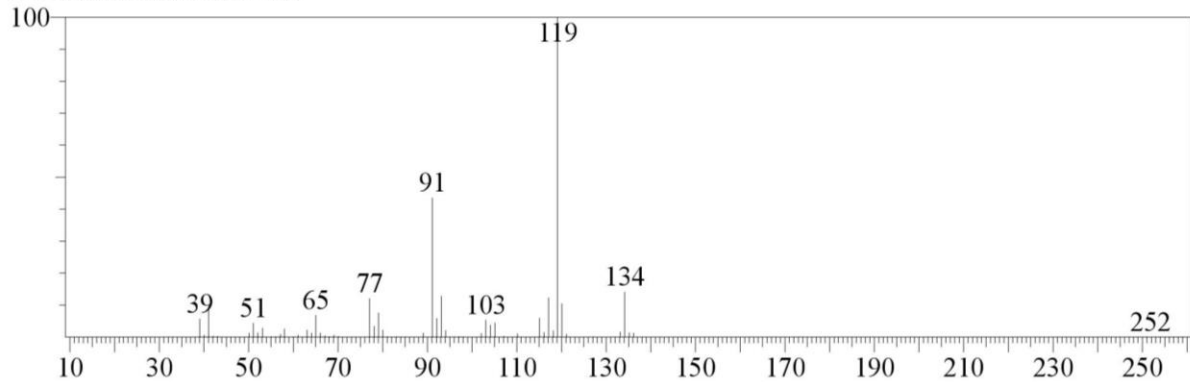


<< Target >>

Line#:5 R.Time:6.030(Scan#:407) MassPeaks:59

RawMode:Averaged 6.025-6.035(406-408) BasePeak:119.10(95622)

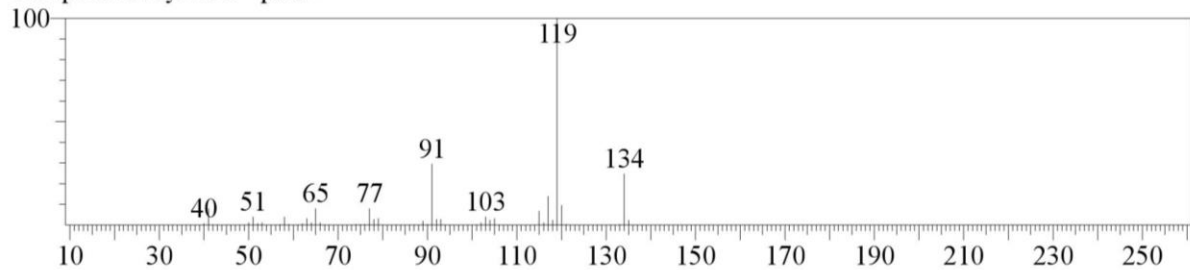
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:317 Library:FFNSC1.3.lib

SI:91 Formula:C10H14 CAS:99-87-6 MolWeight:134 RetIndex:1025

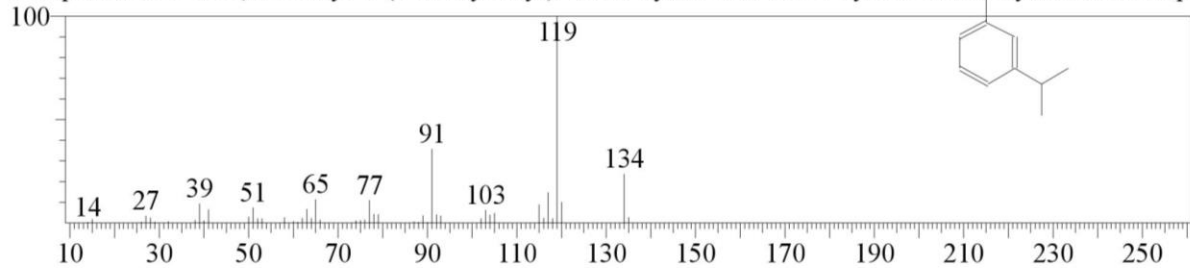
CompName:Cymene <para->



Hit#:2 Entry:6208 Library:NIST11s.lib

SI:91 Formula:C10H14 CAS:535-77-3 MolWeight:134 RetIndex:1042

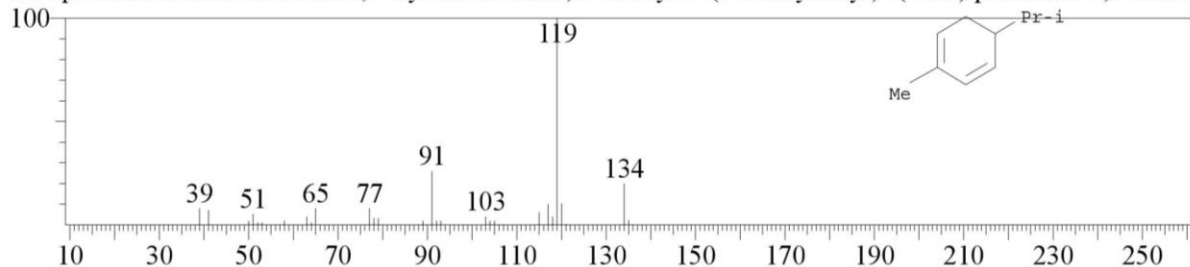
CompName:Benzen, 1-methyl-3-(1-methylethyl)- \$\$ m-Cymene \$\$.beta.-Cymene \$\$ m-Cymol \$\$ m-Isop.



Hit#:3 Entry:26263 Library:WILEY7.LIB

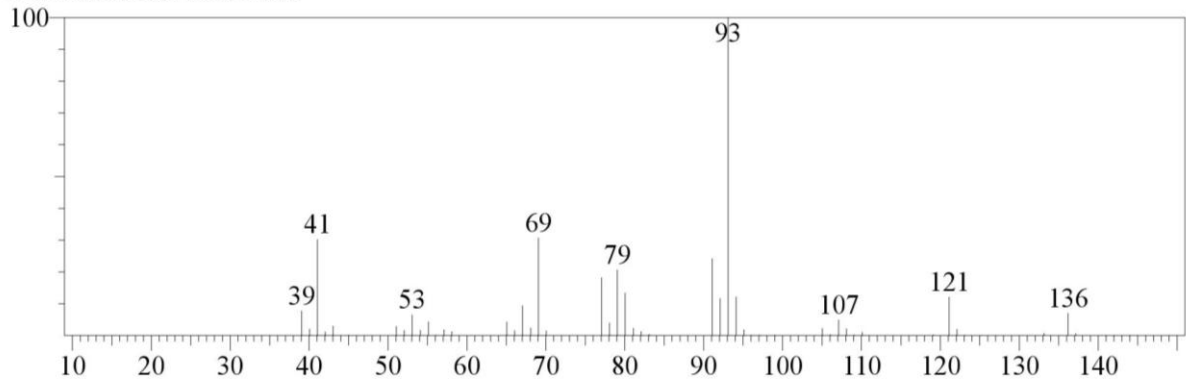
SI:91 Formula:C10H16 CAS:99-83-2 MolWeight:136 RetIndex:0

CompName:l-Phellandrene \$\$ 1,3-Cyclohexadiene, 2-methyl-5-(1-methylethyl)- (CAS) p-Mentha-1,5-diene



<< Target >>

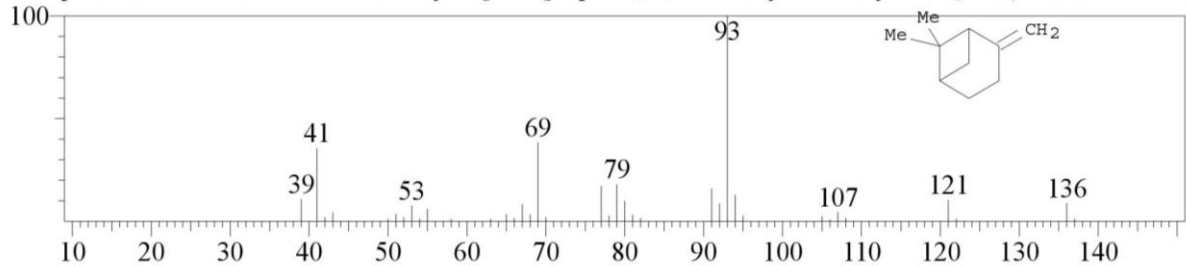
Line#:6 R.Time:6.215(Scan#:444) MassPeaks:53
 RawMode:Averaged 6.210-6.220(443-445) BasePeak:93.10(91098)
 BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:26466 Library:WILEY7.LIB

SI:95 Formula:C10H16 CAS:127-91-3 MolWeight:136 RetIndex:0

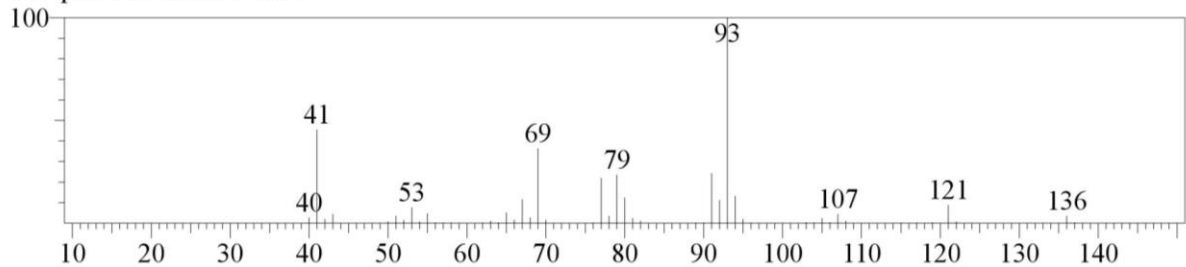
CompName:2-.BETA.-PINENE \$\$ Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene- (CAS) .beta.-Pinene \$



Hit#:2 Entry:837 Library:FFNSC1.3.lib

SI:95 Formula:C10H16 CAS:127-91-3 MolWeight:136 RetIndex:978

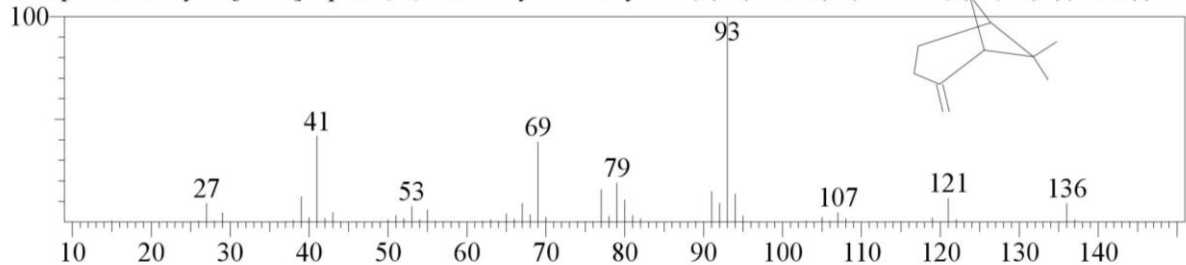
CompName:Pinene <beta->



Hit#:3 Entry:9776 Library:NIST11.lib

SI:94 Formula:C10H16 CAS:18172-67-3 MolWeight:136 RetIndex:943

CompName:Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene-, (1S)- \$\$ 2(10)-Pinene, (1S,5S)-(-)- \$\$ (-)-.b

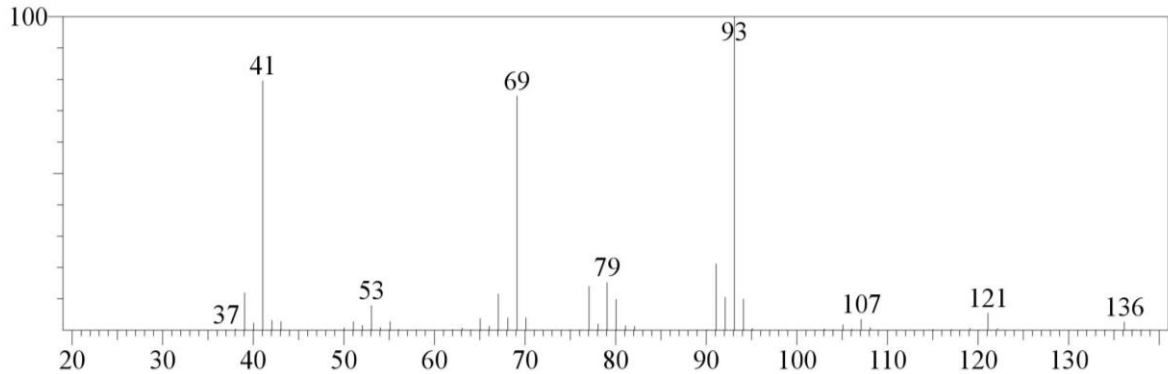


<< Target >>

Line#:7 R.Time:6.490(Scan#:499) MassPeaks:68

RawMode:Averaged 6.485-6.495(498-500) BasePeak:93.10(1330287)

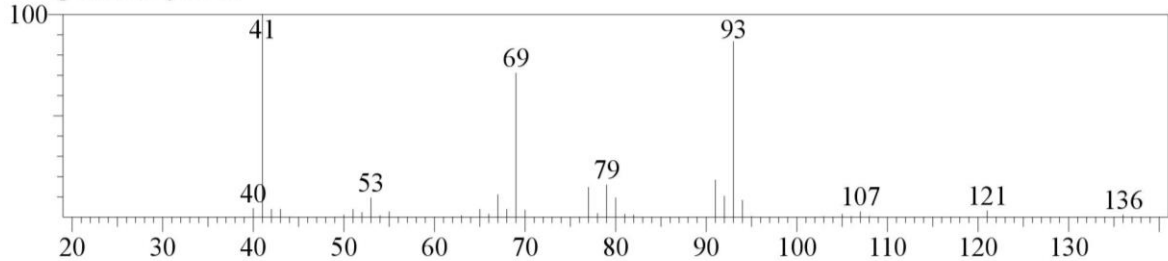
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:628 Library:FFNSC1.3.lib

SI:95 Formula:C10H16 CAS:123-35-3 MolWeight:136 RetIndex:991

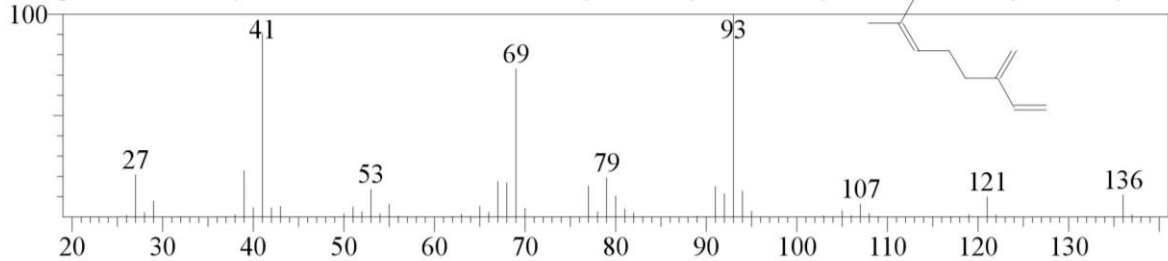
CompName:Myrcene



Hit#:2 Entry:6636 Library:NIST11s.lib

SI:94 Formula:C10H16 CAS:123-35-3 MolWeight:136 RetIndex:958

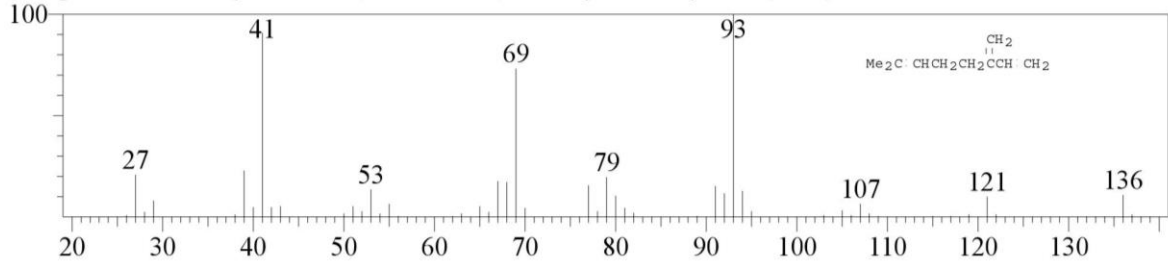
CompName:.beta.-Myrcene \$\$ 1,6-Octadiene, 7-methyl-3-methylene- \$\$ Myrcene \$\$ 7-Methyl-3-methylene-



Hit#:3 Entry:26193 Library:WILEY7.LIB

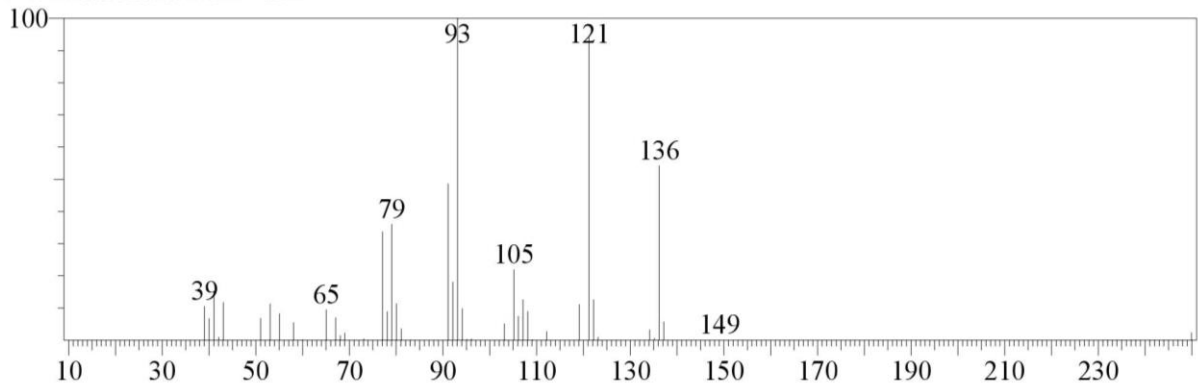
SI:94 Formula:C10H16 CAS:123-35-3 MolWeight:136 RetIndex:0

CompName:.beta.-Myrcene \$\$ 1,6-Octadiene, 7-methyl-3-methylene- (CAS) 2-METHYL-6-METHYLENE



<< Target >>

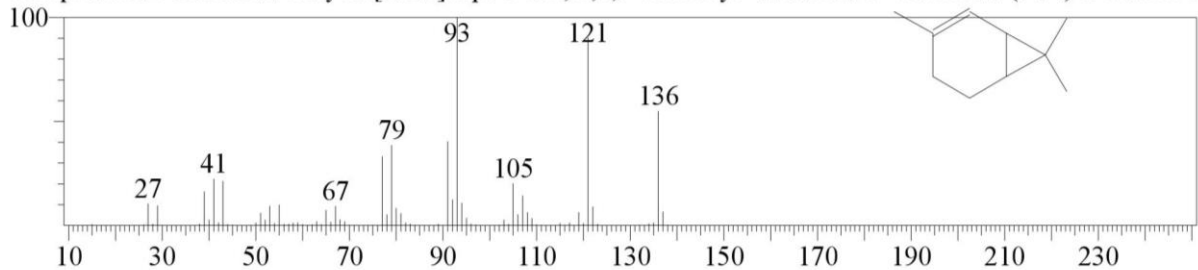
Line#:8 R.Time:6.810(Scan#:563) MassPeaks:46
 RawMode:Averaged 6.805-6.815(562-564) BasePeak:93.10(20584)
 BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:9826 Library:NIST11.lib

SI:94 Formula:C10H16 CAS:554-61-0 MolWeight:136 RetIndex:948

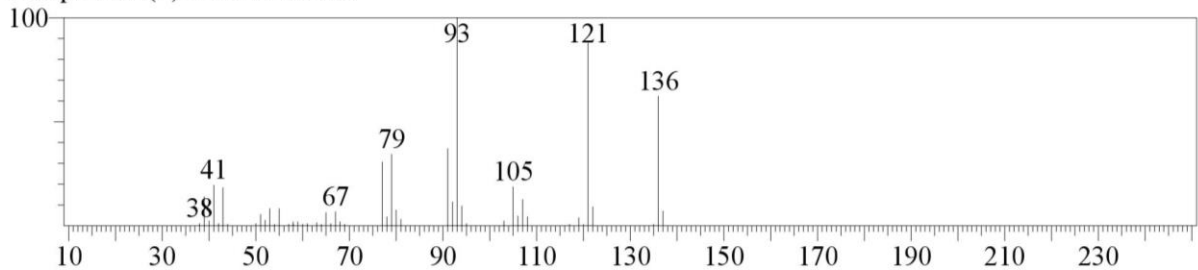
CompName:2-Carene \$\$ Bicyclo[4.1.0]hept-2-ene, 3,7,7-trimethyl- \$\$.delta.-2-Carene \$\$ (.+/-)-2-Carene \$



Hit#:2 Entry:25524 Library:WILEY7.LIB

SI:93 Formula:C10H16 CAS:0-00-0 MolWeight:136 RetIndex:0

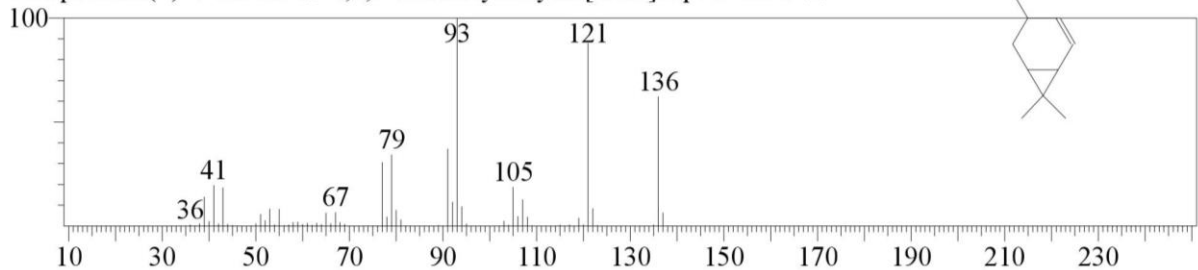
CompName:(+)-2-CARENE \$\$



Hit#:3 Entry:9827 Library:NIST11.lib

SI:93 Formula:C10H16 CAS:29050-33-7 MolWeight:136 RetIndex:919

CompName:(+)-4-Carene \$\$ 4,7,7-Trimethylbicyclo[4.1.0]hept-2-ene # \$\$

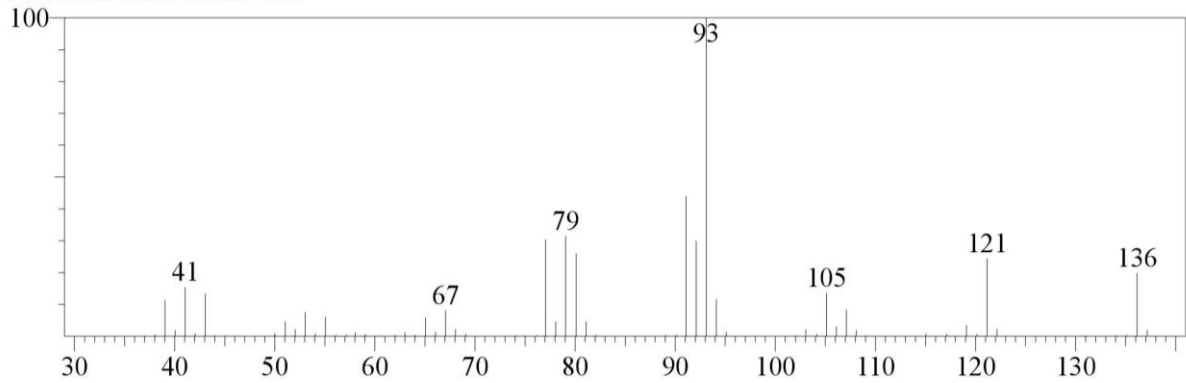


<< Target >>

Line#:9 R.Time:7.215(Scan#:644) MassPeaks:80

RawMode:Averaged 7.210-7.220(643-645) BasePeak:93.10(3972777)

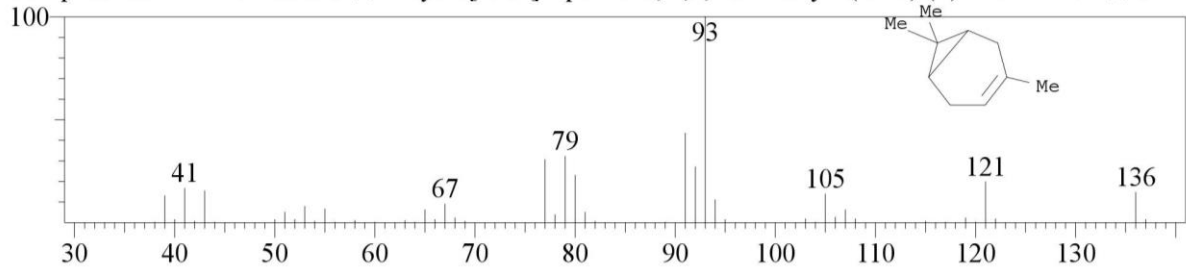
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:26489 Library:WILEY7.LIB

SI:98 Formula:C10 H16 CAS:13466-78-9 MolWeight:136 RetIndex:0

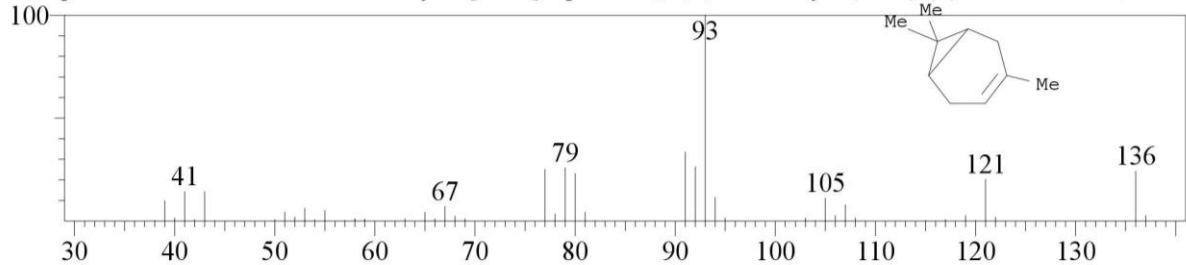
CompName:.DELTA.3-Carene \$\$ Bicyclo[4.1.0]hept-3-ene, 3,7,7-trimethyl- (CAS) (+)-3-CARENE \$\$.DE]



Hit#:2 Entry:26487 Library:WILEY7.LIB

SI:97 Formula:C10 H16 CAS:13466-78-9 MolWeight:136 RetIndex:0

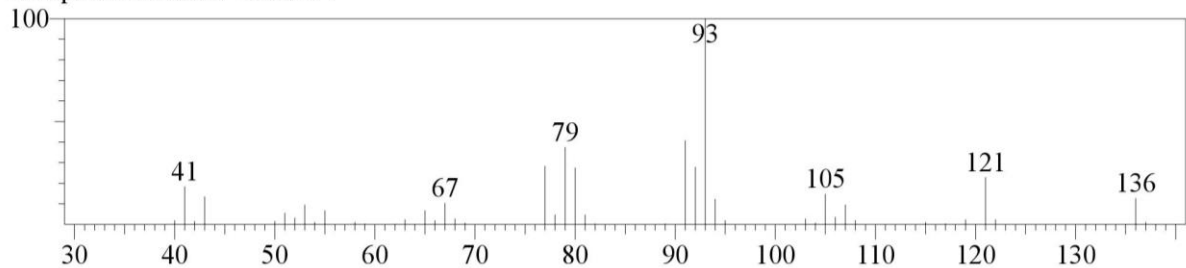
CompName:.DELTA.3-Carene \$\$ Bicyclo[4.1.0]hept-3-ene, 3,7,7-trimethyl- (CAS) (+)-3-CARENE \$\$.DE]



Hit#:3 Entry:1124 Library:FFNSC1.3.lib

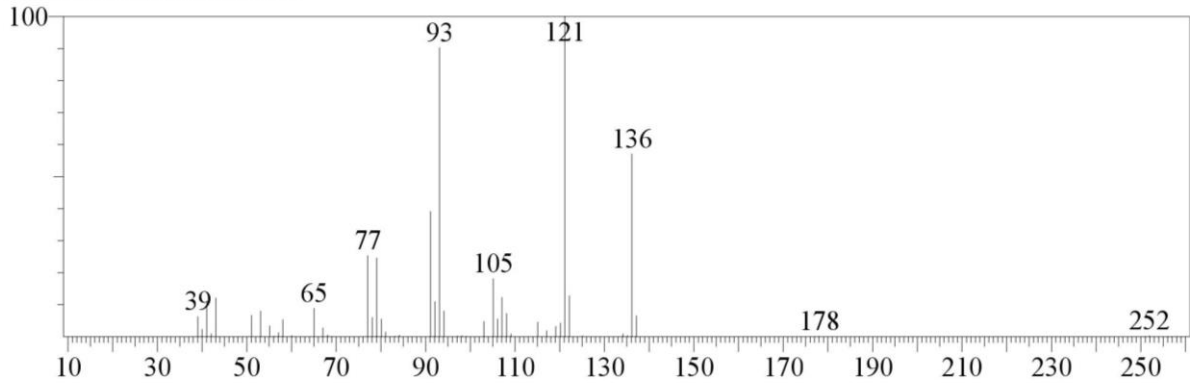
SI:96 Formula:C10 H16 CAS:13466-78-9 MolWeight:136 RetIndex:1009

CompName:Carene <delta-3->



<< Target >>

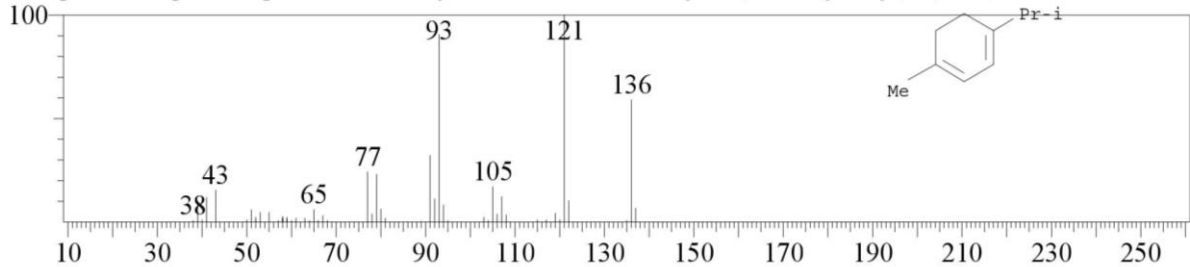
Line#:10 R.Time:7.375(Scan#:676) MassPeaks:50
 RawMode:Averaged 7.370-7.380(675-677) BasePeak:121.15(24467)
 BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:26227 Library:WILEY7.LIB

SI:95 Formula:C10 H16 CAS:99-86-5 MolWeight:136 RetIndex:0

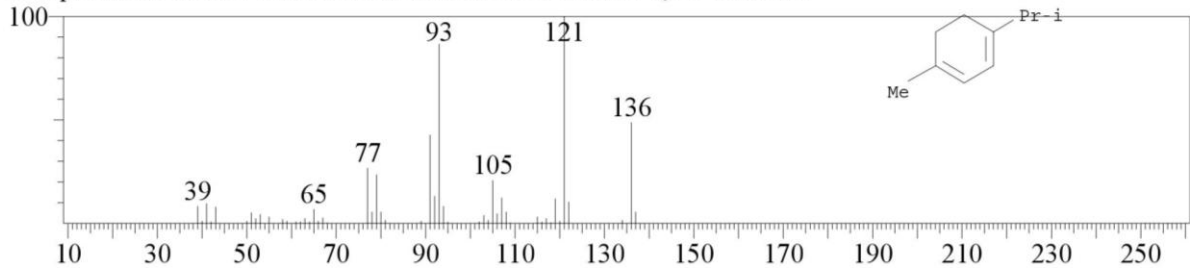
CompName:.alpha.-Terpinene \$\$ 1,3-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) 1,3-P-MENTHA



Hit#:2 Entry:25507 Library:WILEY7.LIB

SI:95 Formula:C10 H16 CAS:99-86-5 MolWeight:136 RetIndex:0

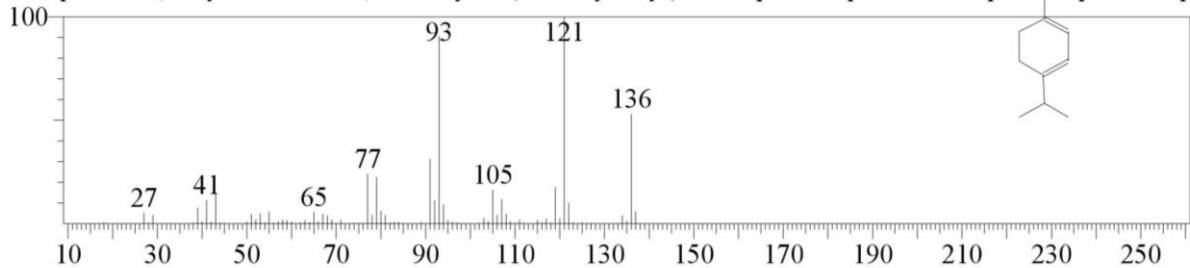
CompName:.ALPHA. TERPINENE \$\$ PARA-MENTHA-1,3-DIENE \$\$



Hit#:3 Entry:6679 Library:NIST11s.lib

SI:94 Formula:C10H16 CAS:99-86-5 MolWeight:136 RetIndex:998

CompName:1,3-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- \$\$.alpha.-Terpinene \$\$.alpha.-Terpinen \$\$ p

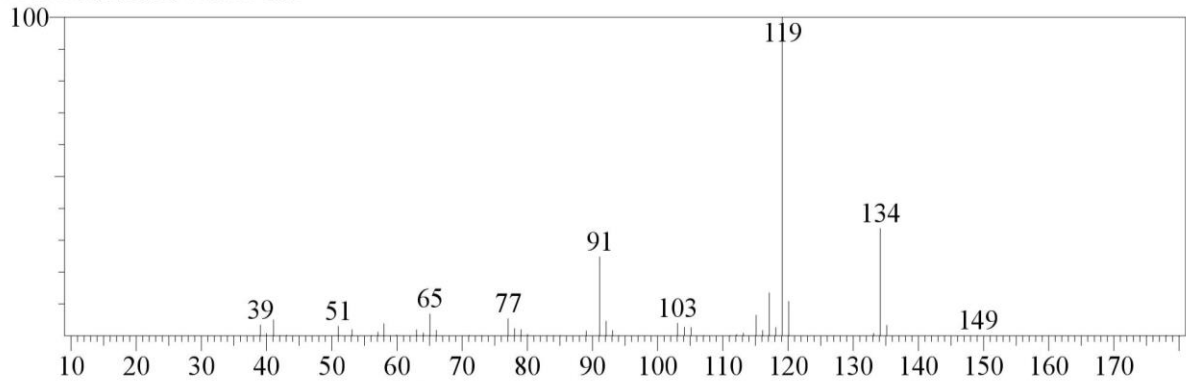


<< Target >>

Line#:11 R.Time:7.445(Scan#:690) MassPeaks:54

RawMode:Averaged 7.440-7.450(689-691) BasePeak:119.10(71502)

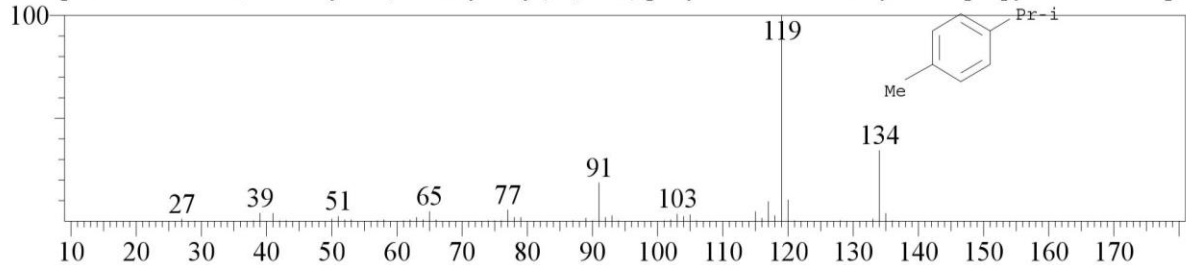
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:24441 Library:WILEY7.LIB

SI:95 Formula:C10H14 CAS:99-87-6 MolWeight:134 RetIndex:0

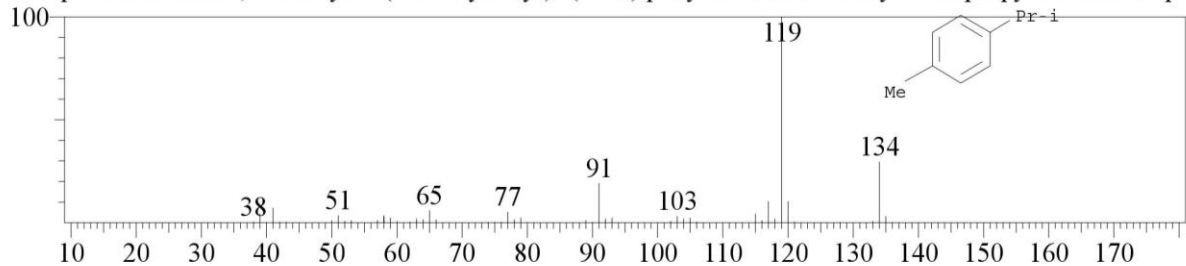
CompName:Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) p-Cymene \$\$ 1-Methyl-4-isopropylbenzene \$\$ p-



Hit#:2 Entry:24439 Library:WILEY7.LIB

SI:94 Formula:C10H14 CAS:99-87-6 MolWeight:134 RetIndex:0

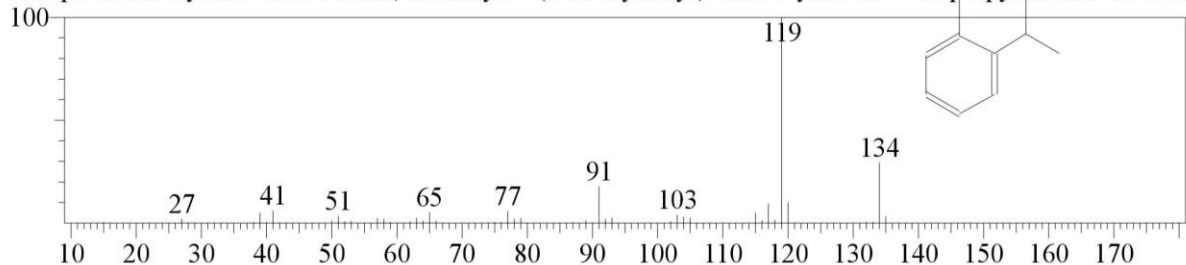
CompName:Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) p-Cymene \$\$ 1-Methyl-4-isopropylbenzene \$\$ p-



Hit#:3 Entry:6234 Library:NIST11s.lib

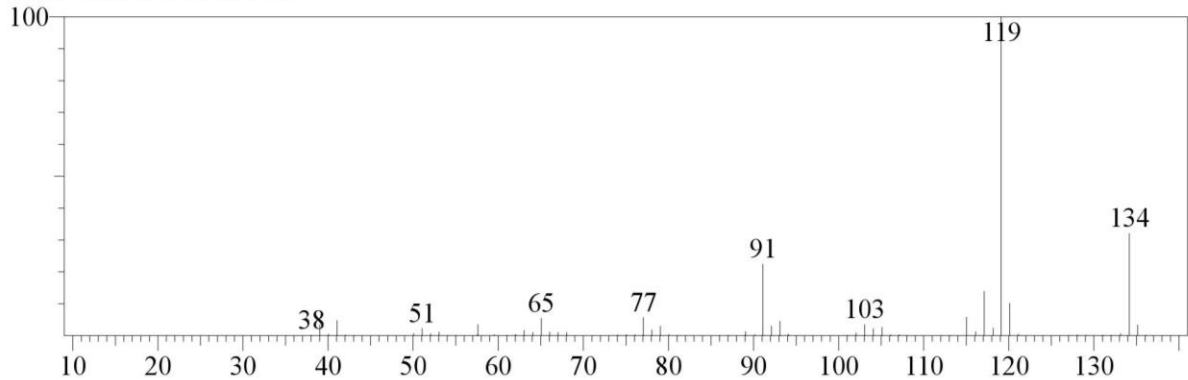
SI:94 Formula:C10H14 CAS:527-84-4 MolWeight:134 RetIndex:1042

CompName:o-Cymene \$\$ Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)- \$\$ o-Cymol \$\$ o-Isopropyltoluene \$\$ 1-Is



<< Target >>

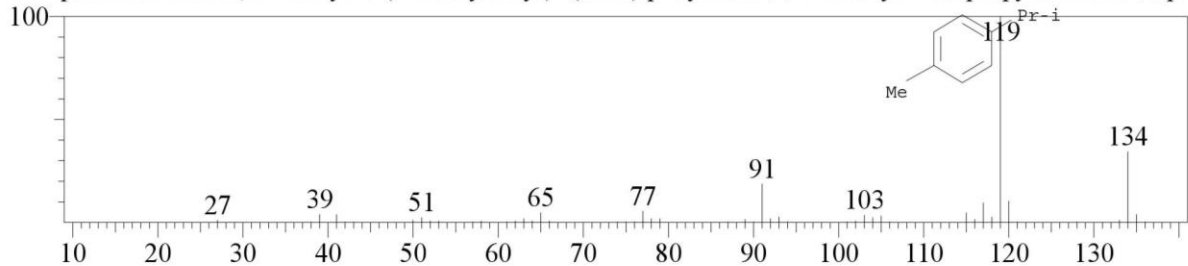
Line#:12 R.Time:7.615(Scan#:724) MassPeaks:69
 RawMode:Averaged 7.610-7.620(723-725) BasePeak:119.10(715830)
 BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:24441 Library:WILEY7.LIB

SI:96 Formula:C10H14 CAS:99-87-6 MolWeight:134 RetIndex:0

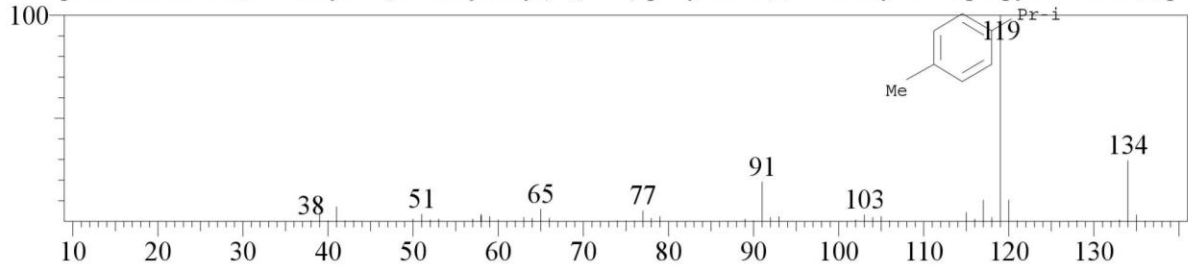
CompName:Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) p-Cymene \$\$ 1-Methyl-4-isopropylbenzene \$\$ p-



Hit#:2 Entry:24439 Library:WILEY7.LIB

SI:96 Formula:C10H14 CAS:99-87-6 MolWeight:134 RetIndex:0

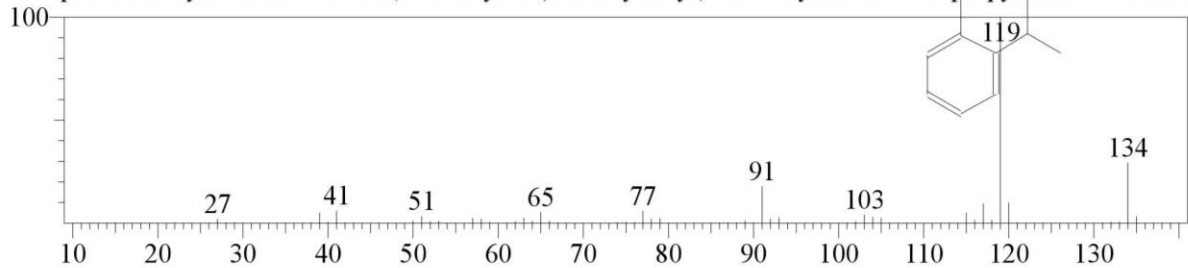
CompName:Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) p-Cymene \$\$ 1-Methyl-4-isopropylbenzene \$\$ p-



Hit#:3 Entry:6234 Library:NIST11s.lib

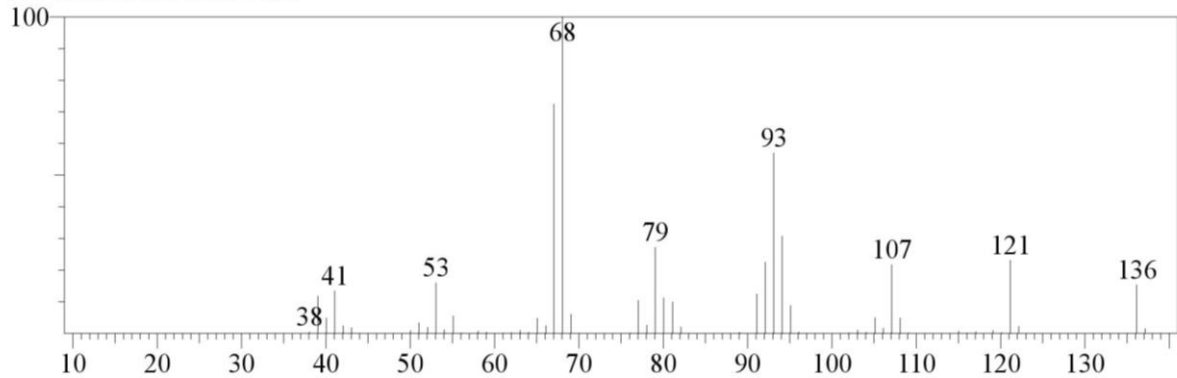
SI:96 Formula:C10H14 CAS:527-84-4 MolWeight:134 RetIndex:1042

CompName:o-Cymene \$\$ Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)- \$\$ o-Cymol \$\$ o-Isopropyltoluene \$\$ 1-Is

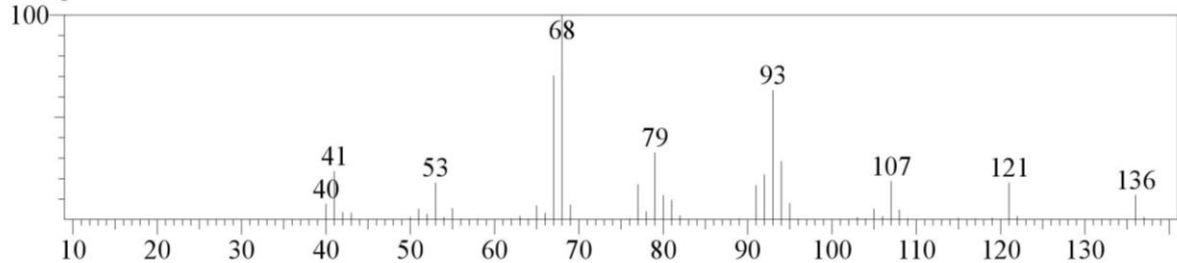


<< Target >>

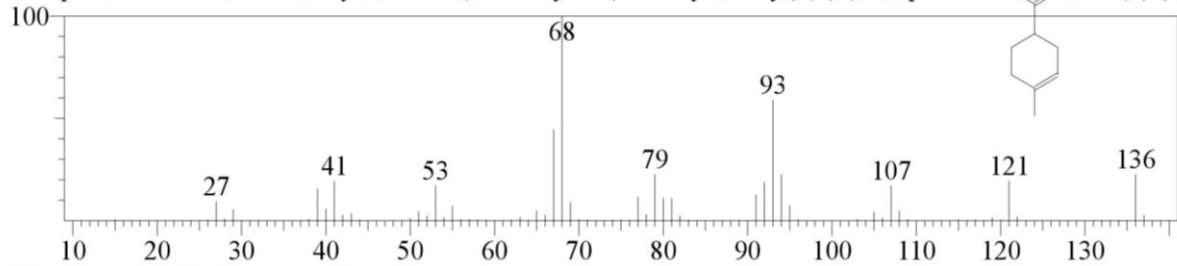
Line#:13 R.Time:7.765(Scan#:754) MassPeaks:64
 RawMode:Averaged 7.760-7.770(753-755) BasePeak:68.05(482570)
 BG Mode:Calc. from Peak



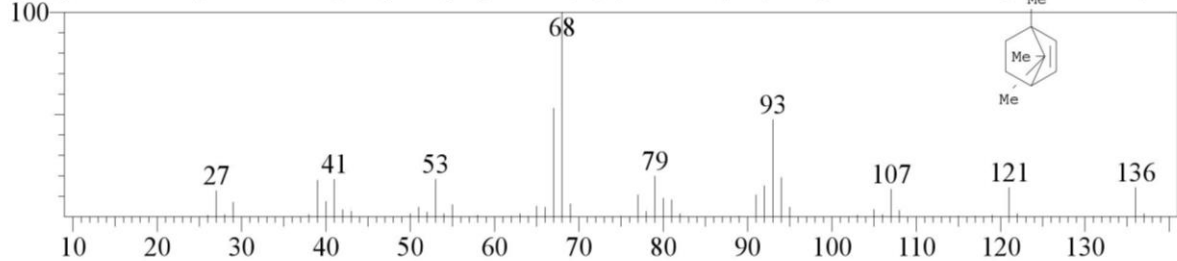
Hit#:1 Entry:443 Library:FFNSC1.3.lib
 SI:96 Formula:C10H16 CAS:138-86-3 MolWeight:136 RetIndex:1030
 CompName:Limonene



Hit#:2 Entry:9748 Library:NIST11.lib
 SI:95 Formula:C10H16 CAS:5989-27-5 MolWeight:136 RetIndex:1018
 CompName:D-Limonene \$\$ Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, (R)- \$\$ p-Mentha-1,8-diene, (R)-



Hit#:3 Entry:26384 Library:WILEY7.LIB
 SI:94 Formula:C10H16 CAS:464-17-5 MolWeight:136 RetIndex:0
 CompName:Bornylene \$\$ Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 1,7,7-trimethyl- (CAS) 2-Bornene \$\$ 1,7,7-Trimethylbicyclo[2.2.1]hept-2-ene

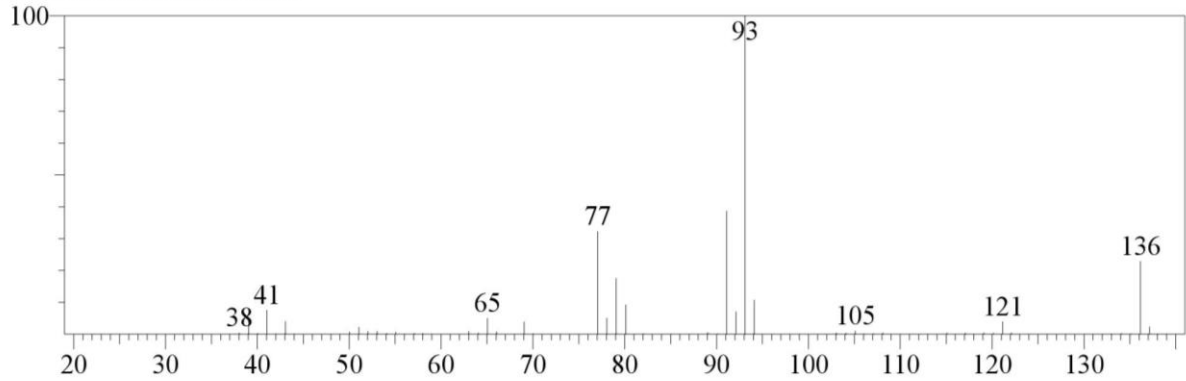


<< Target >>

Line#: 14 R.Time: 7.825(Scan#: 766) MassPeaks: 52

RawMode: Averaged 7.820-7.830(765-767) BasePeak: 93.10(258521)

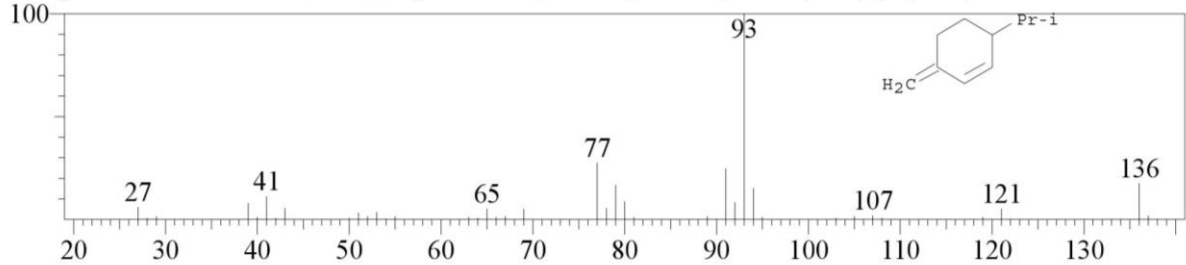
BG Mode: Calc. from Peak



Hit#: 1 Entry: 26355 Library: WILEY7.LIB

SI: 94 Formula: C₁₀H₁₆ CAS: 555-10-2 MolWeight: 136 RetIndex: 0

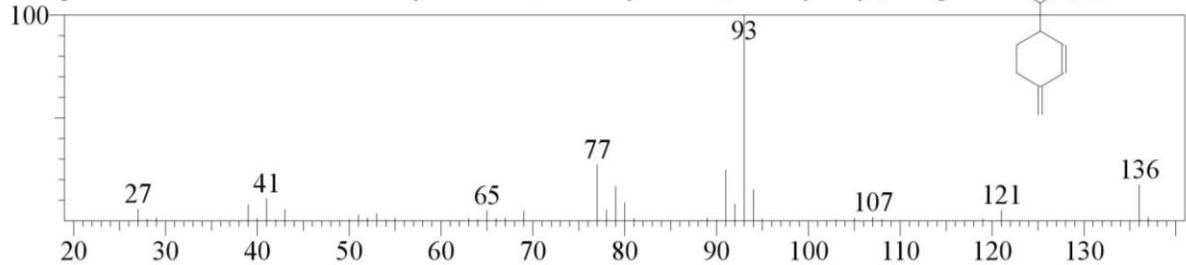
CompName: beta.-Phellandrene \$\$ Cyclohexene, 3-methylene-6-(1-methylethyl)- (CAS) 3-ISOPROPYL-6-



Hit#: 2 Entry: 9790 Library: NIST11.lib

SI: 94 Formula: C₁₀H₁₆ CAS: 555-10-2 MolWeight: 136 RetIndex: 964

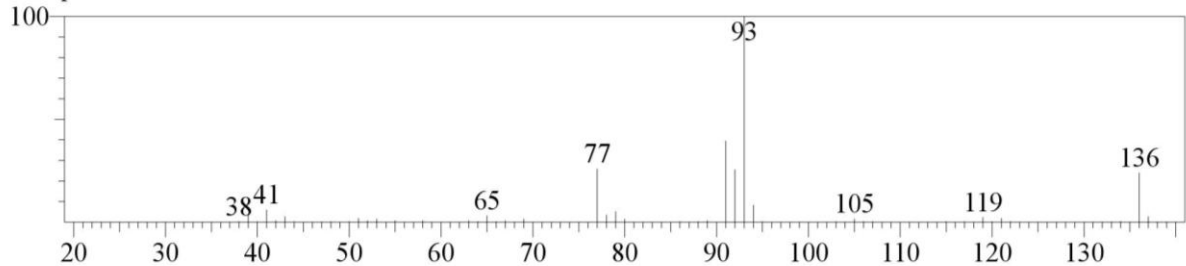
CompName: beta.-Phellandrene \$\$ Cyclohexene, 3-methylene-6-(1-methylethyl)- \$\$ p-Mentha-1(7),2-diene



Hit#: 3 Entry: 25523 Library: WILEY7.LIB

SI: 93 Formula: C₁₀H₁₆ CAS: 0-00-0 MolWeight: 136 RetIndex: 0

CompName: 1-PHELLANDRENE \$\$

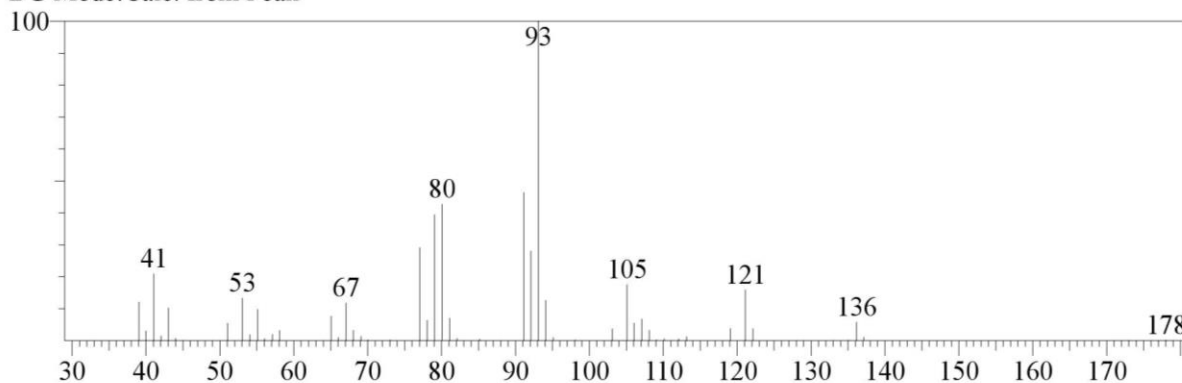


<< Target >>

Line#:15 R.Time:8.300(Scan#:861) MassPeaks:52

RawMode:Averaged 8.295-8.305(860-862) BasePeak:93.10(33111)

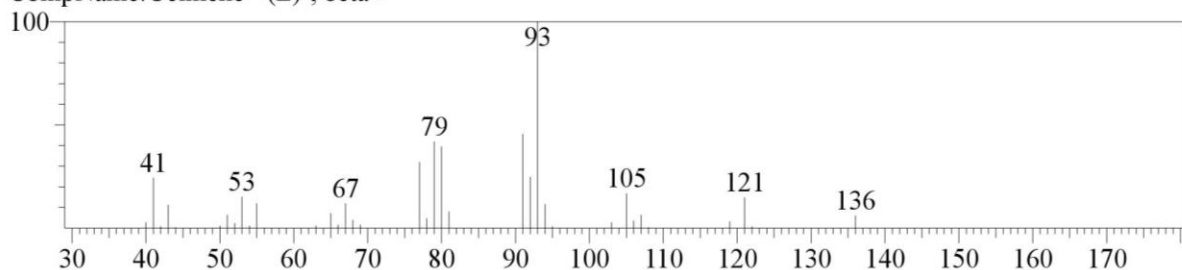
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:1125 Library:FFNSC1.3.lib

SI:95 Formula:C10 H16 CAS:3779-61-1 MolWeight:136 RetIndex:1046

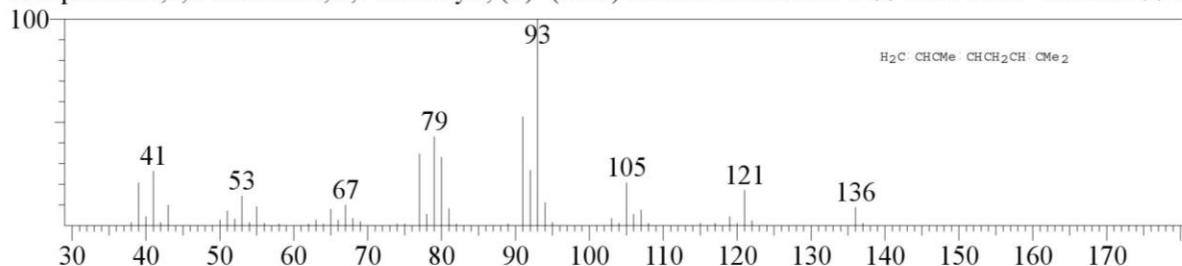
CompName:Ocimene <(E)-, beta->



Hit#:2 Entry:26155 Library:WILEY7.LIB

SI:94 Formula:C10 H16 CAS:3779-61-1 MolWeight:136 RetIndex:0

CompName:1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-, (E)- (CAS) .BETA. OCIMENE Y \$\$ trans-.beta.-Ocimene \$\$.l



Hit#:3 Entry:26489 Library:WILEY7.LIB

SI:94 Formula:C10 H16 CAS:13466-78-9 MolWeight:136 RetIndex:0

CompName:..DELTA.3-Carene \$\$ Bicyclo[4.1.0]hept-3-ene, 3,7,7-trimethyl- (CAS) (+)-3-CARENE \$\$.DE]

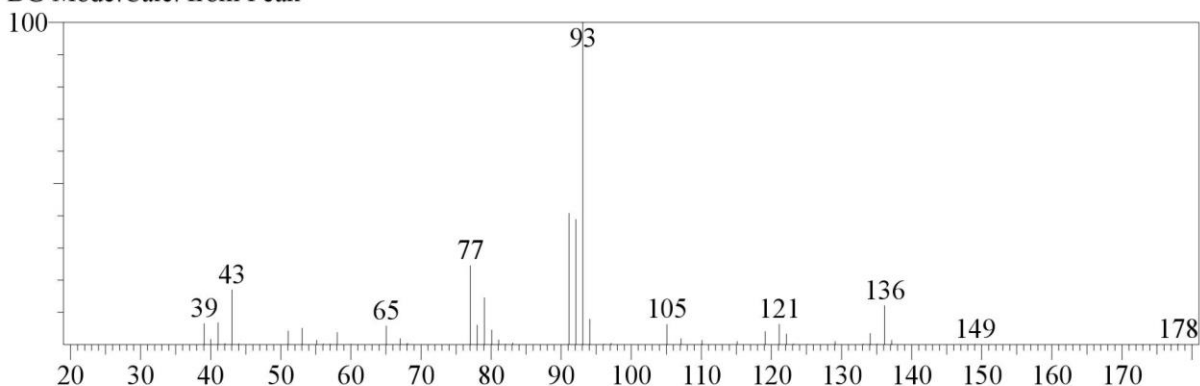


<< Target >>

Line#:16 R.Time:8.545(Scan#:910) MassPeaks:47

RawMode:Averaged 8.540-8.550(909-911) BasePeak:93.10(32628)

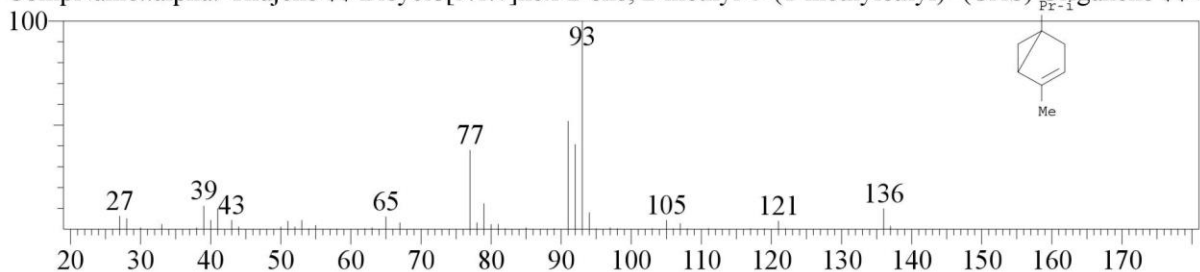
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:26414 Library:WILEY7.LIB

SI:92 Formula:C10 H16 CAS:2867-05-2 MolWeight:136 RetIndex:0

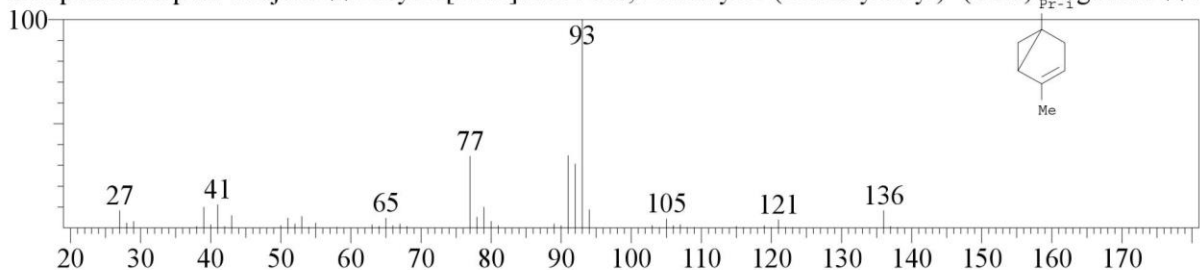
CompName:.alpha.-Thujene \$\$ Bicyclo[3.1.0]hex-2-ene, 2-methyl-5-(1-methylethyl)- (CAS) Origanene \$\$:



Hit#:2 Entry:26412 Library:WILEY7.LIB

SI:91 Formula:C10 H16 CAS:2867-05-2 MolWeight:136 RetIndex:0

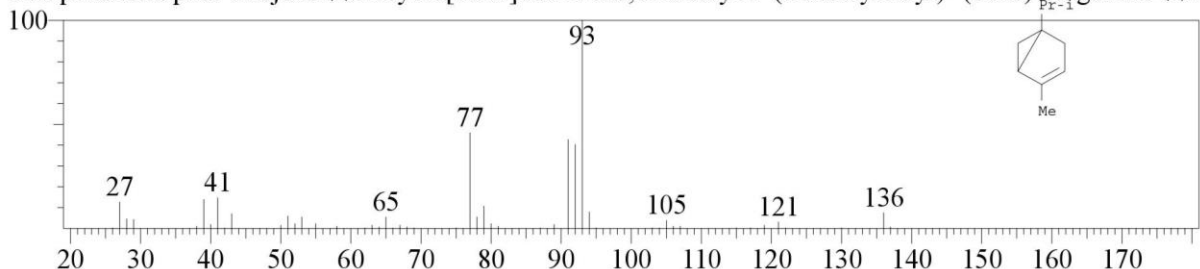
CompName:.alpha.-Thujene \$\$ Bicyclo[3.1.0]hex-2-ene, 2-methyl-5-(1-methylethyl)- (CAS) Origanene \$\$:



Hit#:3 Entry:26413 Library:WILEY7.LIB

SI:91 Formula:C10 H16 CAS:2867-05-2 MolWeight:136 RetIndex:0

CompName:.alpha.-Thujene \$\$ Bicyclo[3.1.0]hex-2-ene, 2-methyl-5-(1-methylethyl)- (CAS) Origanene \$\$:

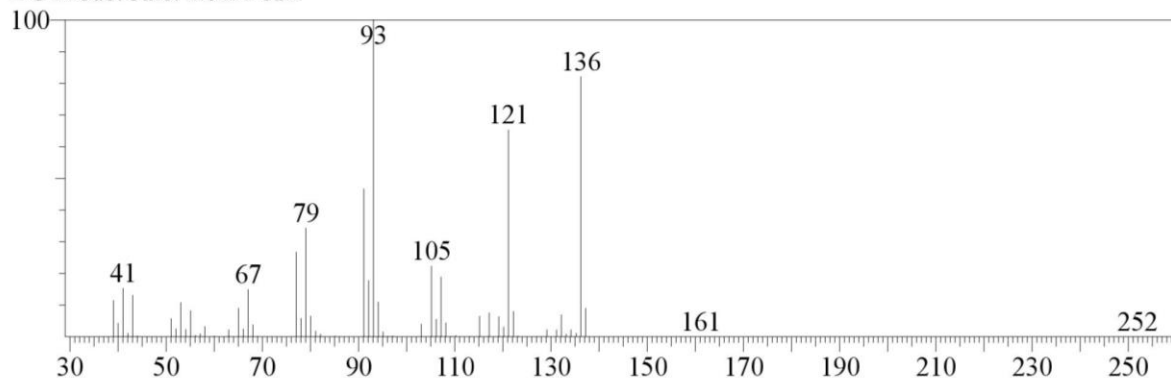


<< Target >>

Line#:17 R.Time:9.560(Scan#:1113) MassPeaks:61

RawMode:Averaged 9.555-9.565(1112-1114) BasePeak:93.10(48386)

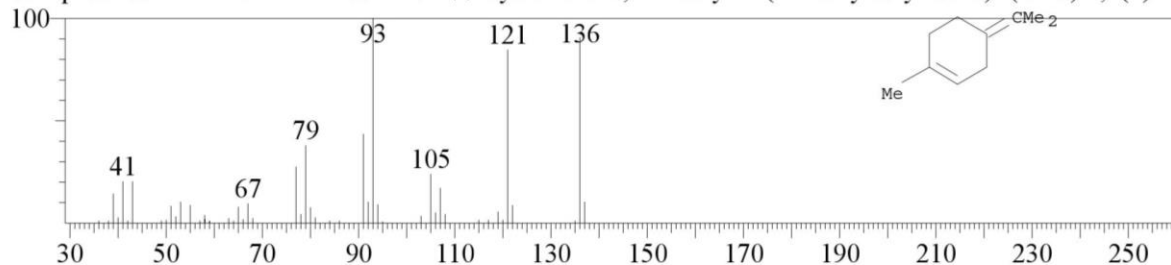
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:26336 Library:WILEY7.LIB

SI:94 Formula:C10 H16 CAS:586-62-9 MolWeight:136 RetIndex:0

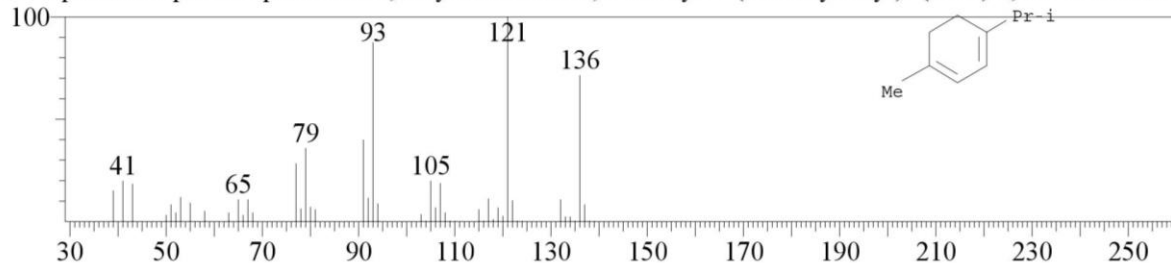
CompName:.ALPHA.-TERPINOLENE \$\$ Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethylidene)- (CAS) 1,4(8)-P-



Hit#:2 Entry:26234 Library:WILEY7.LIB

SI:93 Formula:C10 H16 CAS:99-86-5 MolWeight:136 RetIndex:0

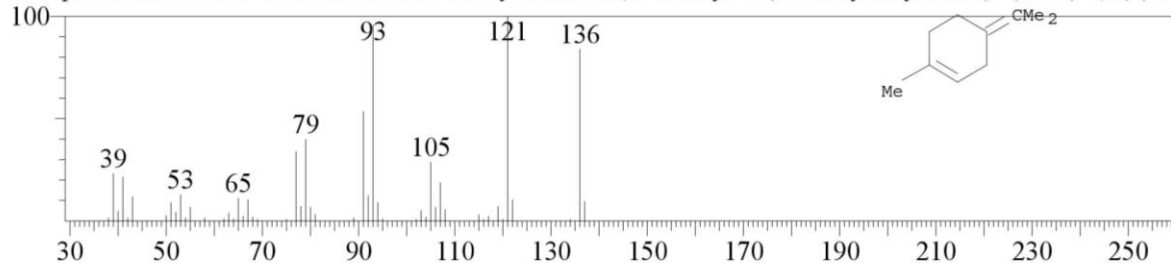
CompName:.alpha.-Terpinene \$\$ 1,3-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) 1,3-P-MENTHA



Hit#:3 Entry:26339 Library:WILEY7.LIB

SI:93 Formula:C10 H16 CAS:586-62-9 MolWeight:136 RetIndex:0

CompName:.ALPHA.-TERPINOLENE \$\$ Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethylidene)- (CAS) 1,4(8)-P-

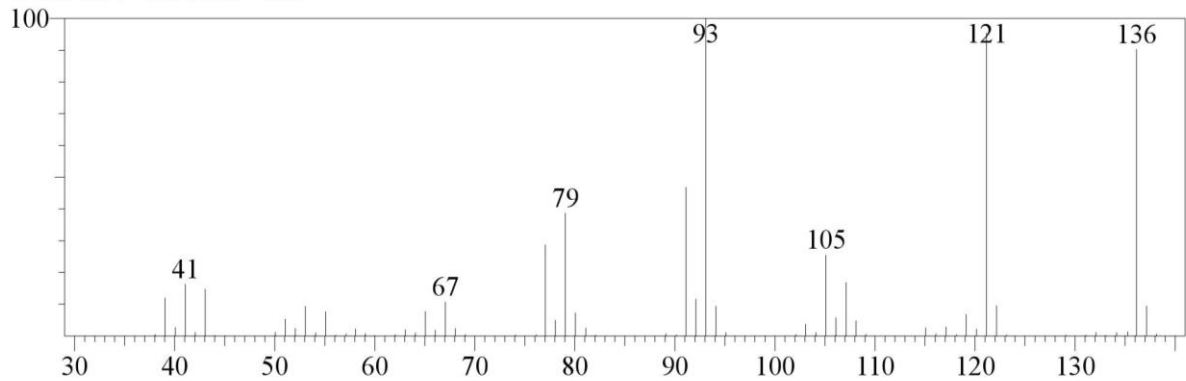


<< Target >>

Line#:18 R.Time:9.715(Scan#:1144) MassPeaks:72

RawMode:Averaged 9.710-9.720(1143-1145) BasePeak:93.10(289956)

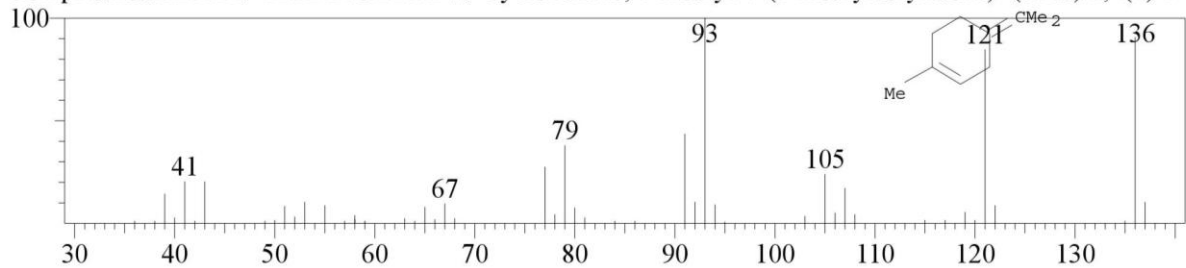
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:26336 Library:WILEY7.LIB

SI:97 Formula:C10 H16 CAS:586-62-9 MolWeight:136 RetIndex:0

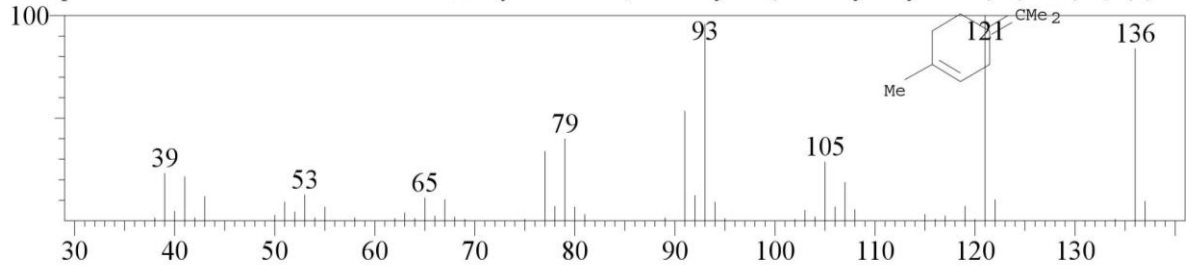
CompName:.ALPHA.-TERPINOLENE \$\$ Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethylidene)- (CAS) 1,4(8)-P-



Hit#:2 Entry:26339 Library:WILEY7.LIB

SI:96 Formula:C10 H16 CAS:586-62-9 MolWeight:136 RetIndex:0

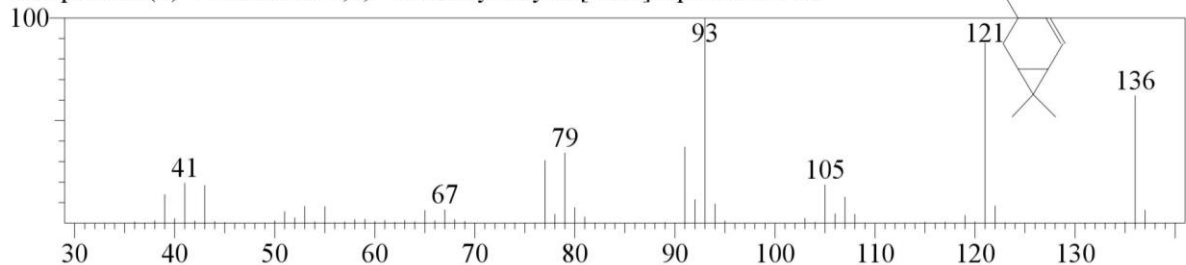
CompName:.ALPHA.-TERPINOLENE \$\$ Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethylidene)- (CAS) 1,4(8)-P-



Hit#:3 Entry:9827 Library:NIST11.lib

SI:95 Formula:C10H16 CAS:29050-33-7 MolWeight:136 RetIndex:919

CompName:(+)-4-Carene \$\$ 4,7,7-Trimethylbicyclo[4.1.0]hept-2-ene # \$\$

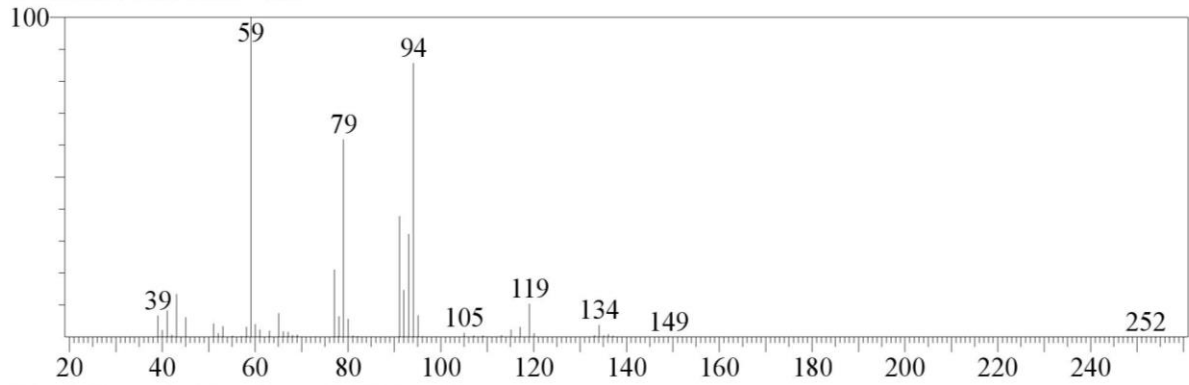


<< Target >>

Line#:19 R.Time:12.765(Scan#:1754) MassPeaks:53

RawMode:Averaged 12.760-12.770(1753-1755) BasePeak:59.10(60015)

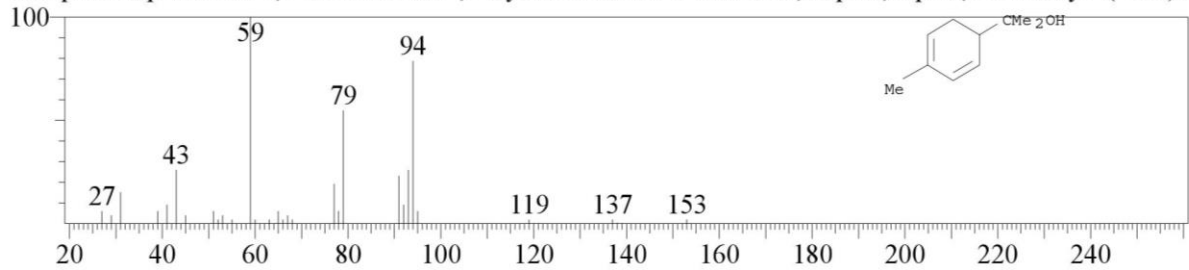
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:41021 Library:WILEY7.LIB

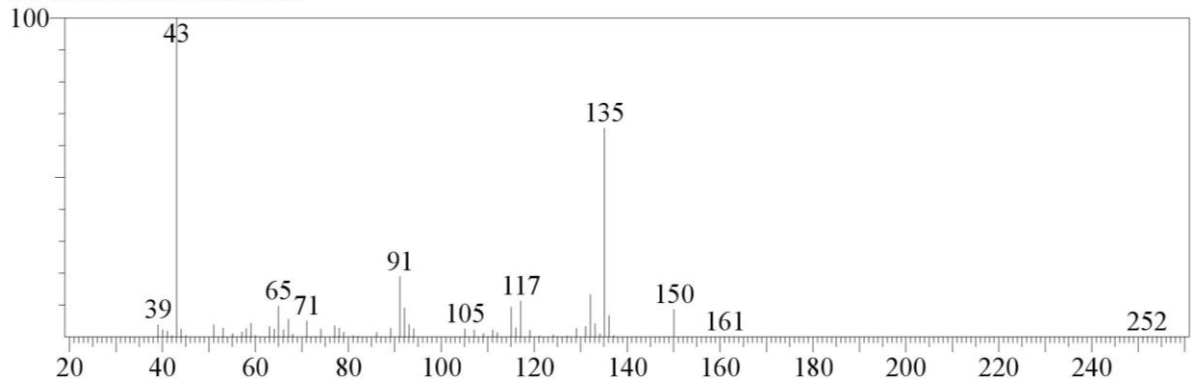
SI:92 Formula:C10 H16 O CAS:1686-20-0 MolWeight:152 RetIndex:0

CompName:p-Mentha-1,5-dien-8-ol \$\$ 2,4-Cyclohexadiene-1-methanol, .alpha.,.alpha.,4-trimethyl- (CAS) .

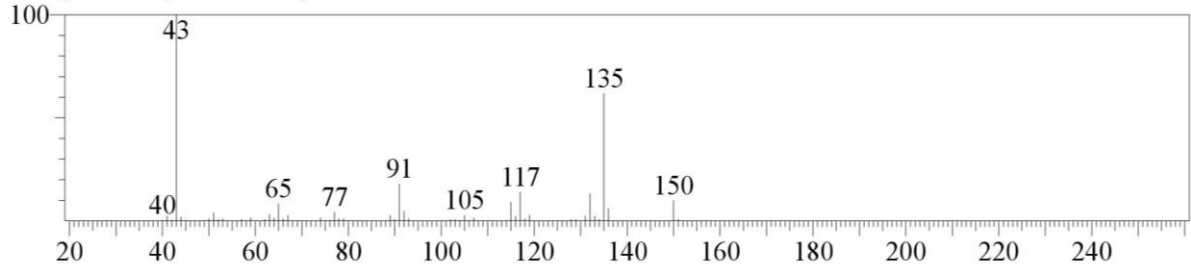


<< Target >>

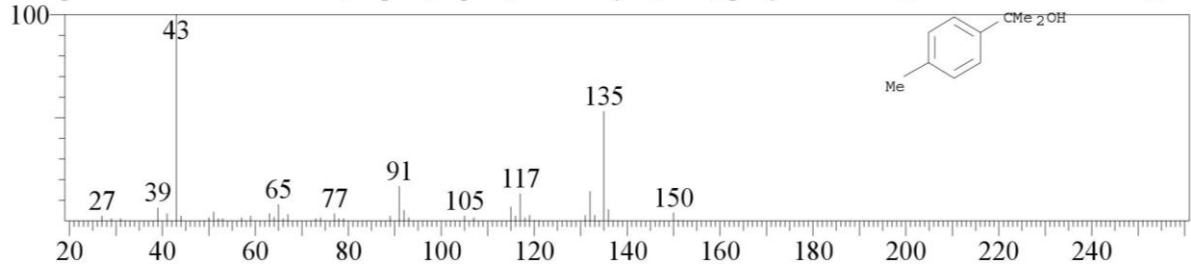
Line#:20 R.Time:13.510(Scan#:1903) MassPeaks:62
 RawMode:Averaged 13.505-13.515(1902-1904) BasePeak:43.05(47670)
 BG Mode:Calc. from Peak



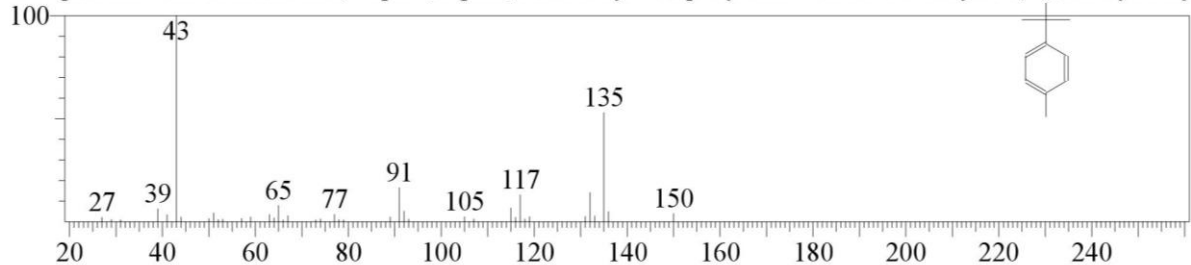
Hit#:1 Entry:875 Library:FFNSC1.3.lib
 SI:92 Formula:C10 H14 O CAS:1197-01-9 MolWeight:150 RetIndex:1189
 CompName:Cymen-8-ol <para->



Hit#:2 Entry:38655 Library:WILEY7.LIB
 SI:91 Formula:C10 H14 O CAS:1197-01-9 MolWeight:150 RetIndex:0
 CompName:Benzenemethanol, .alpha.,.alpha.,4-trimethyl- (CAS) p-Cymen-8-ol \$\$ P-CYMENE-8-OL \$\$ 8-



Hit#:3 Entry:15324 Library:NIST11.lib
 SI:91 Formula:C10H14O CAS:1197-01-9 MolWeight:150 RetIndex:1197
 CompName:Benzenemethanol, .alpha.,.alpha.,4-trimethyl- \$\$ p-Cymen-8-ol \$\$ 1-Methyl-4-(.alpha.-hydroxy

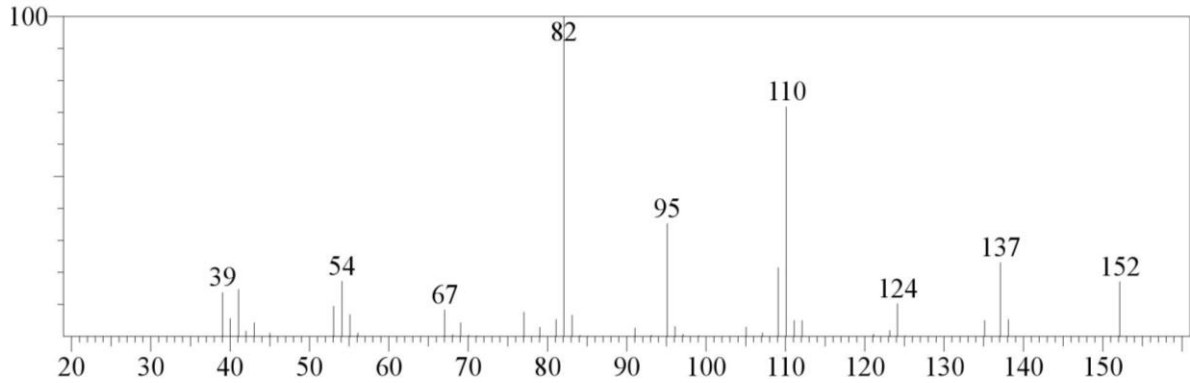


<< Target >>

Line#:21 R.Time:16.560(Scan#:2513) MassPeaks:42

RawMode:Averaged 16.555-16.565(2512-2514) BasePeak:82.05(21044)

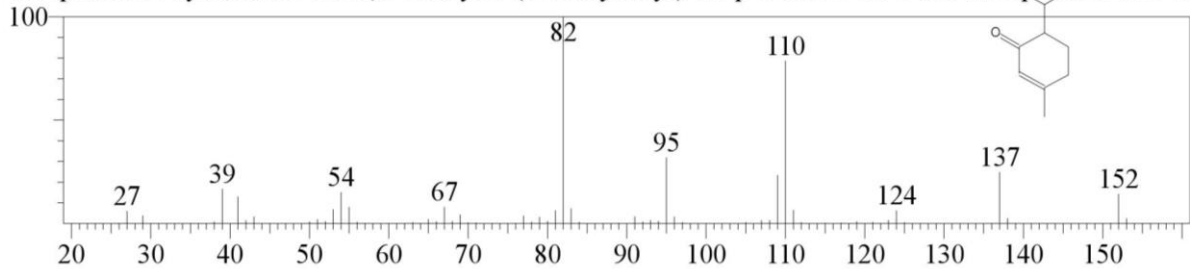
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:9534 Library:NIST11s.lib

SI:93 Formula:C10H16O CAS:89-81-6 MolWeight:152 RetIndex:1158

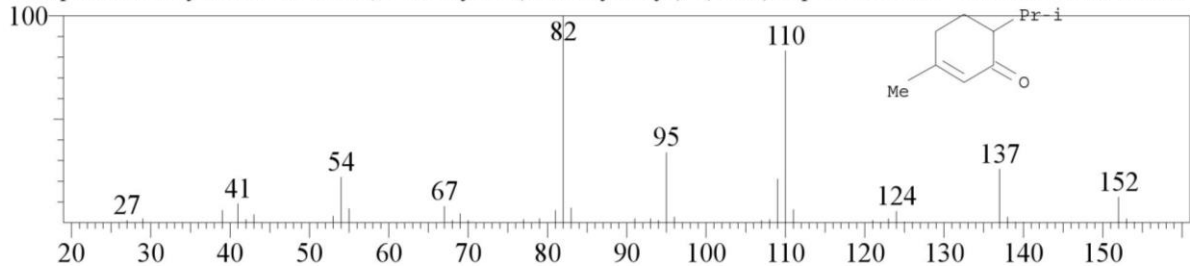
CompName:2-Cyclohexen-1-one, 3-methyl-6-(1-methylethyl)- \$\$ p-Menth-1-en-3-one \$\$ Piperitone \$\$ 3-C



Hit#:2 Entry:41063 Library:WILEY7.LIB

SI:93 Formula:C10H16O CAS:89-81-6 MolWeight:152 RetIndex:0

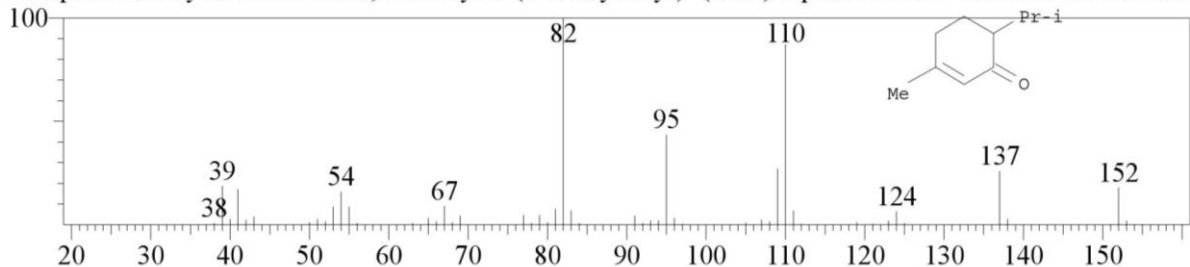
CompName:2-Cyclohexen-1-one, 3-methyl-6-(1-methylethyl)- (CAS) Piperitone \$\$ 3-Carvomenthenone \$\$



Hit#:3 Entry:41053 Library:WILEY7.LIB

SI:93 Formula:C10H16O CAS:89-81-6 MolWeight:152 RetIndex:0

CompName:2-Cyclohexen-1-one, 3-methyl-6-(1-methylethyl)- (CAS) Piperitone \$\$ 3-Carvomenthenone \$\$

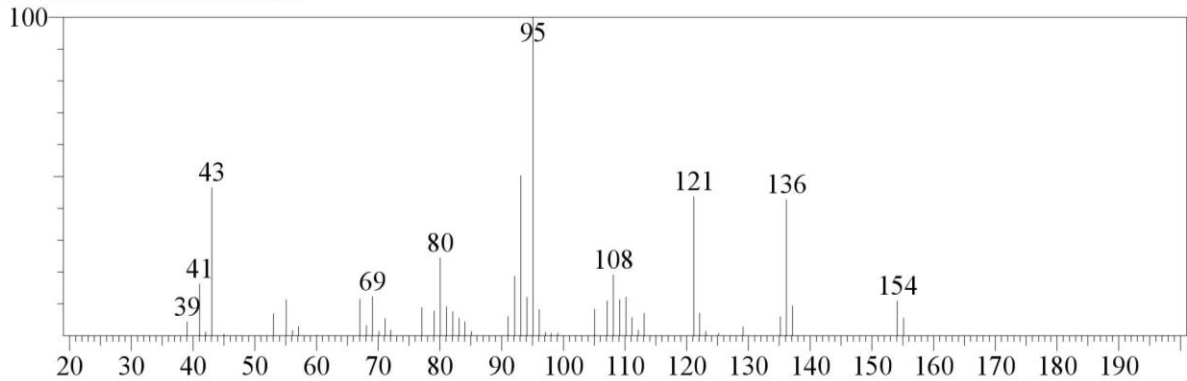


<< Target >>

Line#:22 R.Time:17.840(Scan#:2769) MassPeaks:51

RawMode:Averaged 17.835-17.845(2768-2770) BasePeak:95.10(18748)

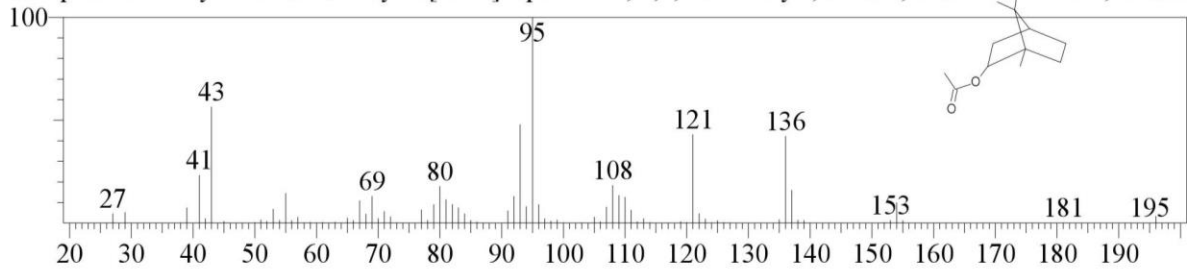
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:16919 Library:NIST11s.lib

SI:94 Formula:C₁₂H₂₀O₂ CAS:76-49-3 MolWeight:196 RetIndex:1277

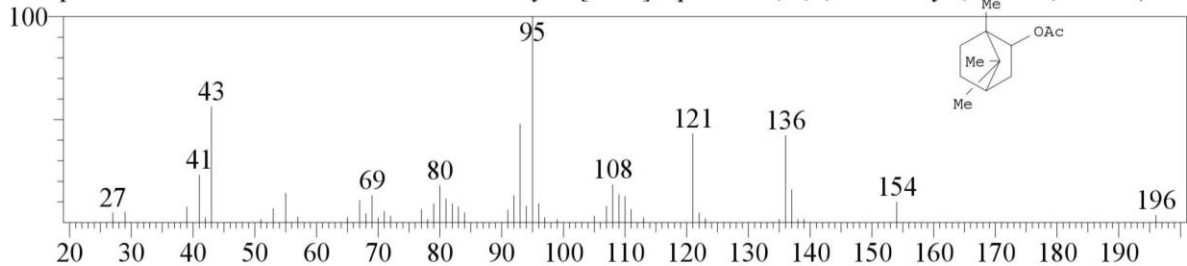
CompName:Borneyl acetate \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimethyl-, acetate, endo- \$\$ Borneol, acetate



Hit#:2 Entry:91079 Library:WILEY7.LIB

SI:94 Formula:C₁₂H₂₀O₂ CAS:76-49-3 MolWeight:196 RetIndex:0

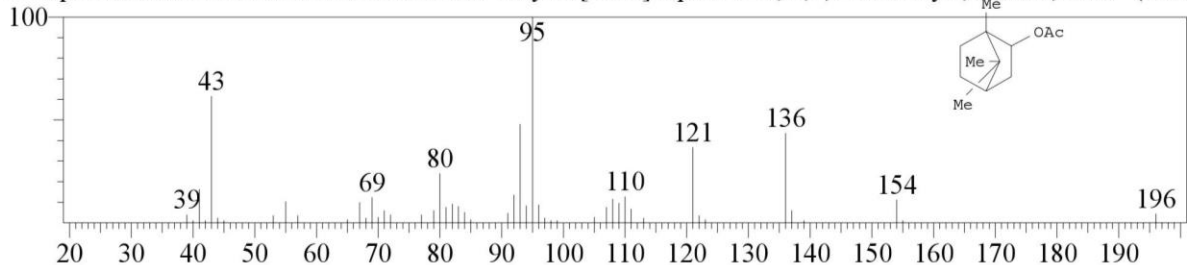
CompName:ENDOBORNYL ACETATE \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimethyl-, acetate, endo- (CAS



Hit#:3 Entry:91081 Library:WILEY7.LIB

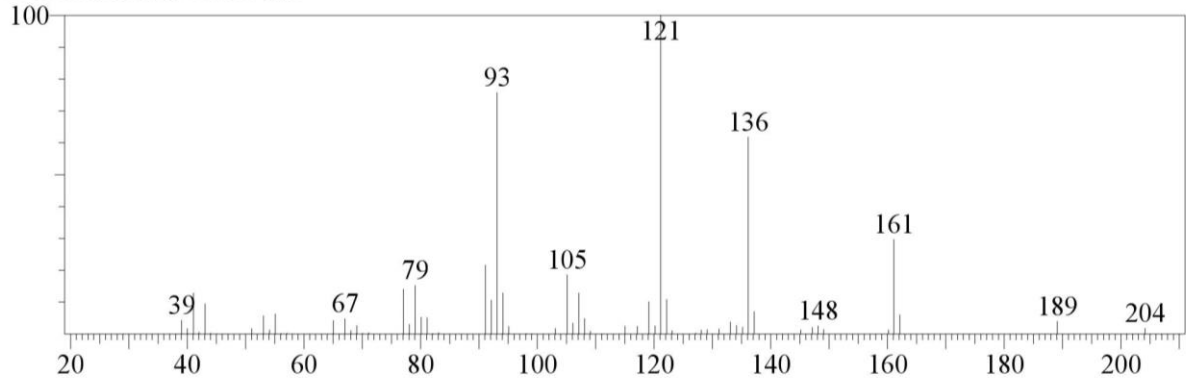
SI:94 Formula:C₁₂H₂₀O₂ CAS:76-49-3 MolWeight:196 RetIndex:0

CompName:ENDOBORNYL ACETATE \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimethyl-, acetate, endo- (CAS

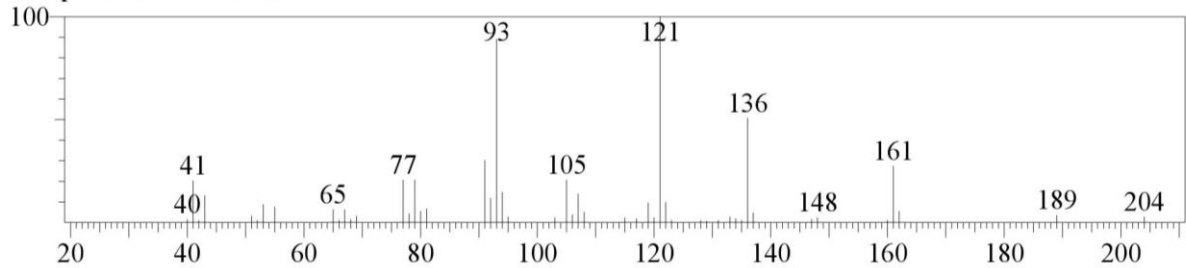


<< Target >>

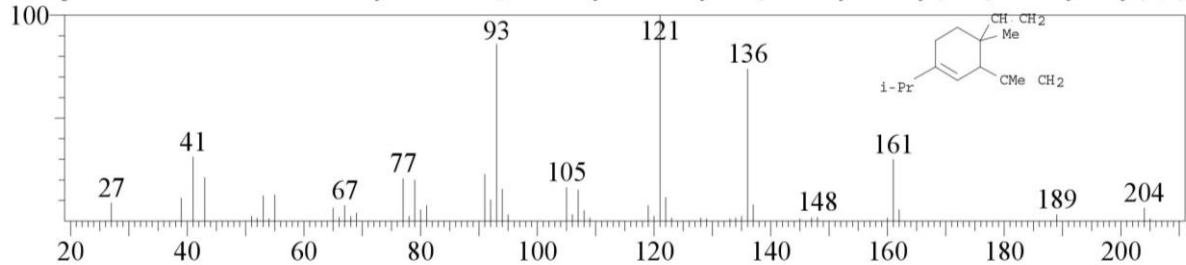
Line#:23 R.Time:19.960(Scan#:3193) MassPeaks:68
 RawMode:Averaged 19.955-19.965(3192-3194) BasePeak:121.15(81976)
 BG Mode:Calc. from Peak



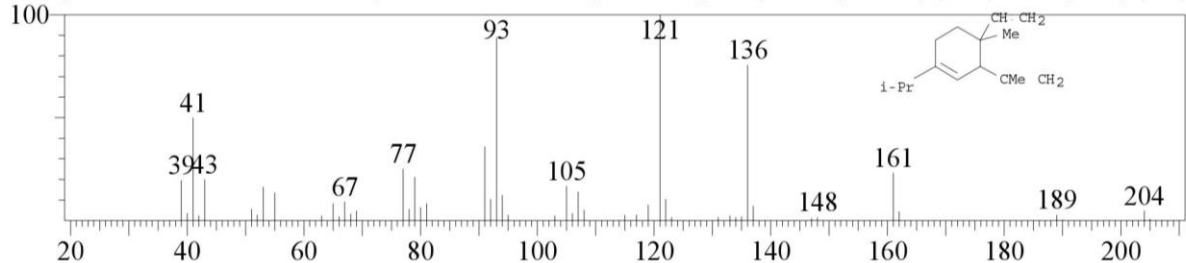
Hit#:1 Entry:1067 Library:FFNSC1.3.lib
 SI:95 Formula:C15 H24 CAS:370572-92-2 MolWeight:204 RetIndex:1335
 CompName:Elemene <delta->



Hit#:2 Entry:100718 Library:WILEY7.LIB
 SI:93 Formula:C15 H24 CAS:20307-84-0 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:.delta.-Elemene \$\$ Cyclohexene, 4-ethenyl-4-methyl-3-(1-methylethenyl)-1-(1-methylethyl)-, (



Hit#:3 Entry:100720 Library:WILEY7.LIB
 SI:90 Formula:C15 H24 CAS:20307-84-0 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:.delta.-Elemene \$\$ Cyclohexene, 4-ethenyl-4-methyl-3-(1-methylethenyl)-1-(1-methylethyl)-, (

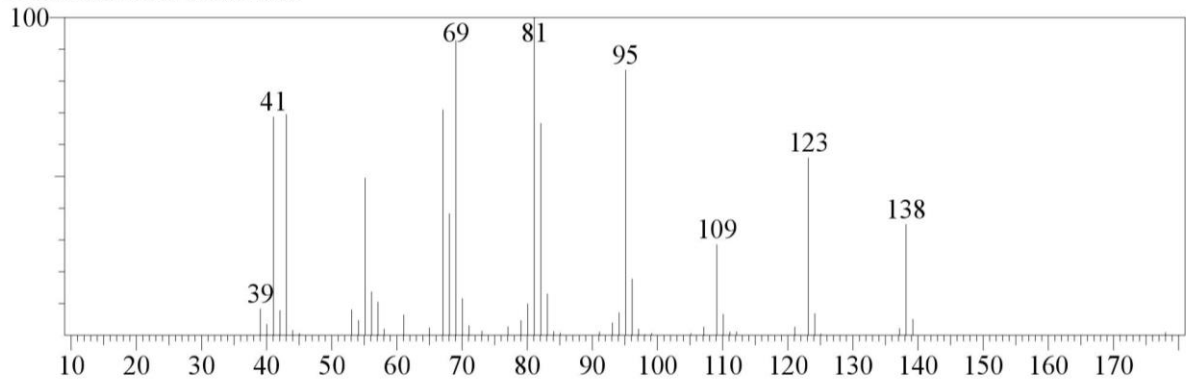


<< Target >>

Line#:24 R.Time:20.660(Scan#:3333) MassPeaks:51

RawMode:Averaged 20.655-20.665(3332-3334) BasePeak:81.10(55345)

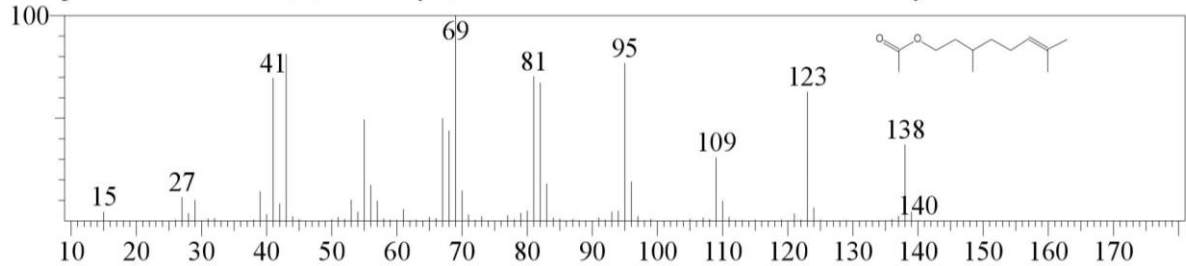
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:17239 Library:NIST11s.lib

SI:96 Formula:C₁₂H₂₂O₂ CAS:150-84-5 MolWeight:198 RetIndex:1302

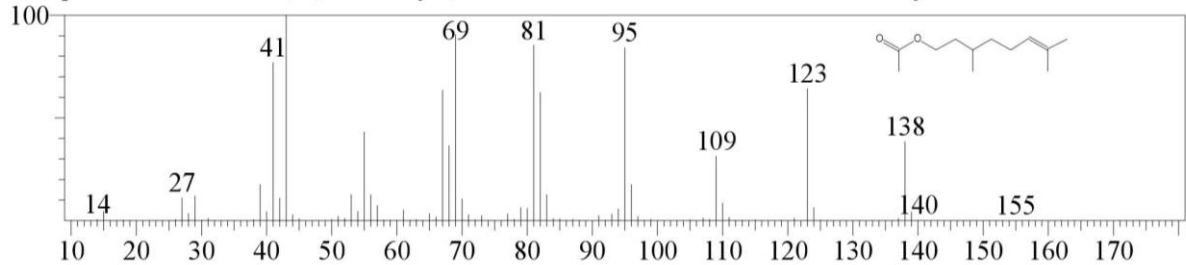
CompName:6-Octen-1-ol, 3,7-dimethyl-, acetate \$\$ Citronellol acetate \$\$ Citronellyl acetate \$\$ Natural rho



Hit#:2 Entry:42684 Library:NIST11.lib

SI:96 Formula:C₁₂H₂₂O₂ CAS:150-84-5 MolWeight:198 RetIndex:1302

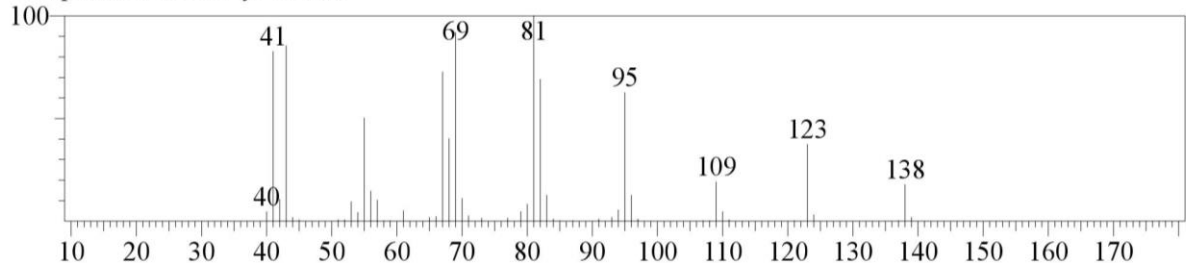
CompName:6-Octen-1-ol, 3,7-dimethyl-, acetate \$\$ Citronellol acetate \$\$ Citronellyl acetate \$\$ Natural rho



Hit#:3 Entry:1004 Library:FFNSC1.3.lib

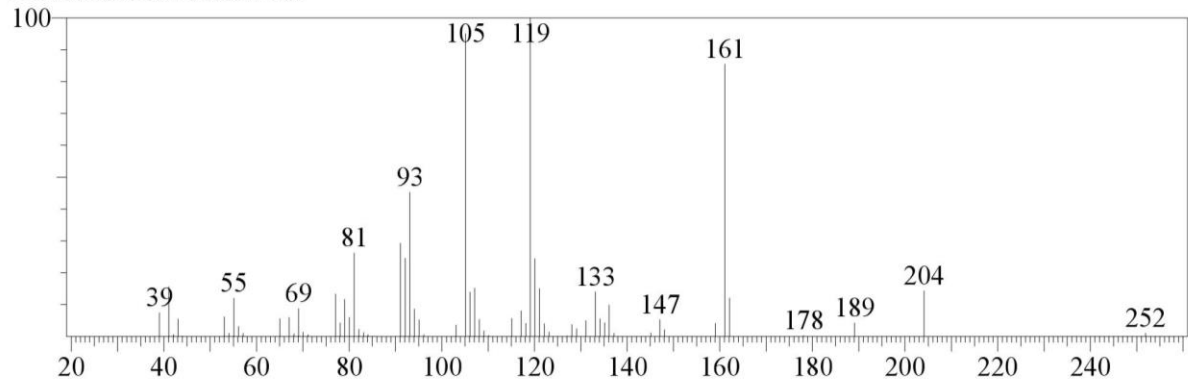
SI:95 Formula:C₁₂H₂₂O₂ CAS:150-84-5 MolWeight:198 RetIndex:1350

CompName:Citronellyl acetate



<< Target >>

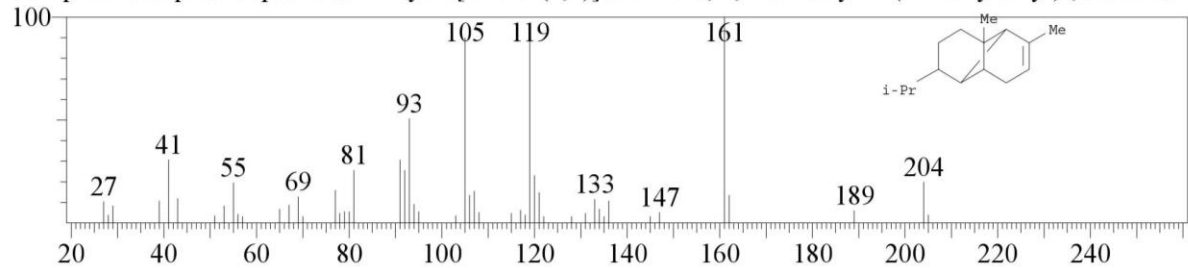
Line#:25 R.Time:21.635(Scan#:3528) MassPeaks:66
 RawMode:Averaged 21.630-21.640(3527-3529) BasePeak:119.10(30647)
 BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:101056 Library:WILEY7.LIB

SI:94 Formula:C15 H24 CAS:3856-25-5 MolWeight:204 RetIndex:0

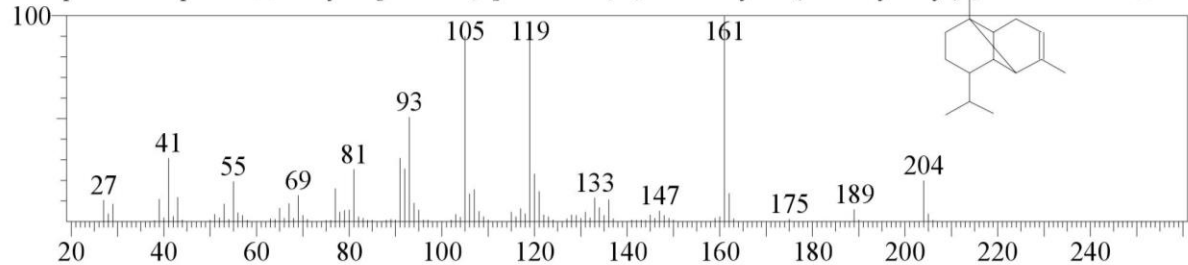
CompName:.alpha.-Copaene \$\$ Tricyclo[4.4.0.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, stereoisor



Hit#:2 Entry:46736 Library:NIST11.lib

SI:94 Formula:C15H24 CAS:3856-25-5 MolWeight:204 RetIndex:1221

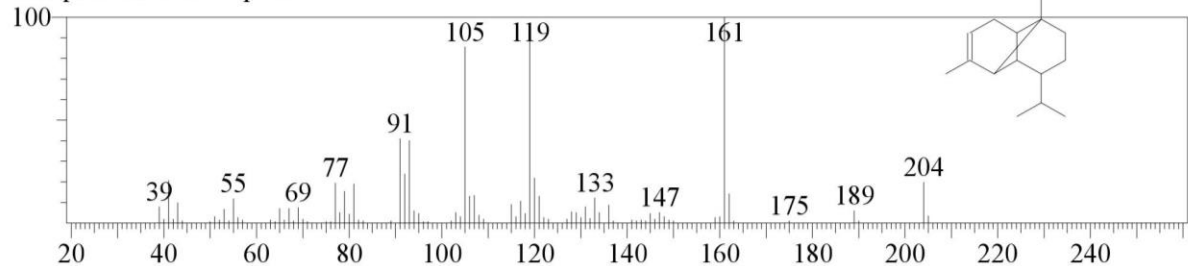
CompName:Copaene \$\$ Tricyclo[4.4.0.02,7]dec-3-ene, 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, stereoisomer \$\$ Tr



Hit#:3 Entry:46735 Library:NIST11.lib

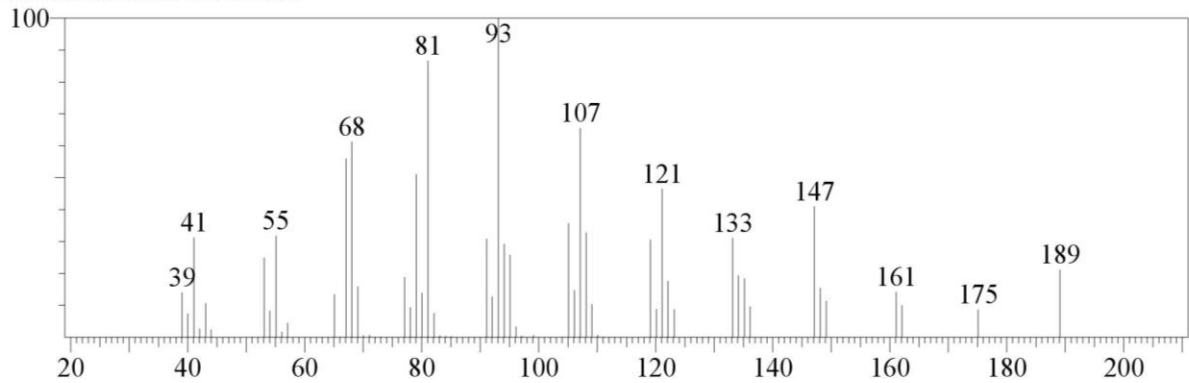
SI:94 Formula:C15H24 CAS:0-00-0 MolWeight:204 RetIndex:1221

CompName:.alfa.-Copaene

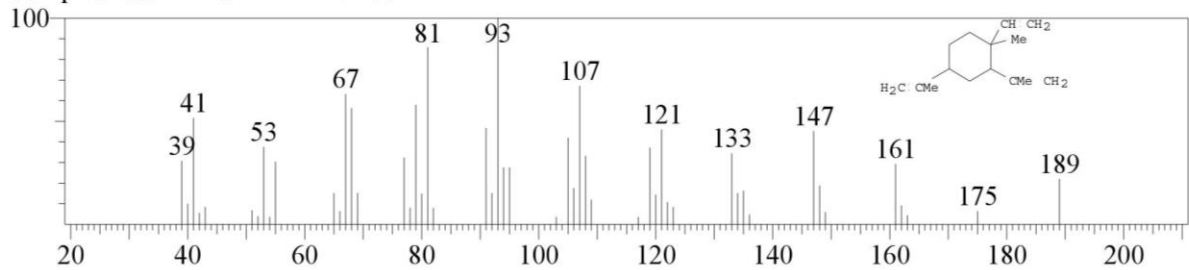


<< Target >>

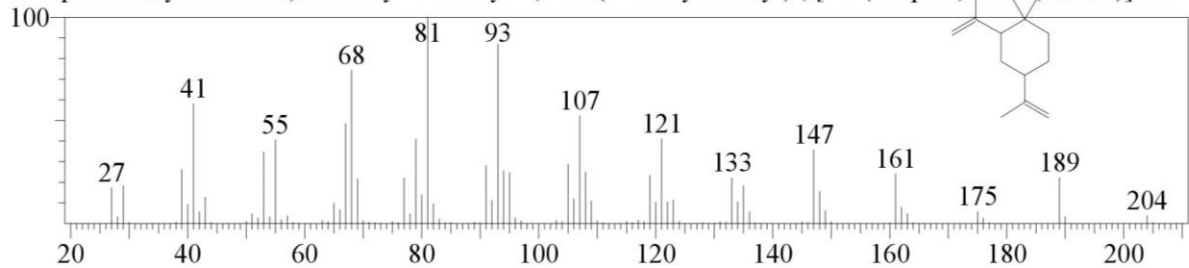
Line#:26 R.Time:22.235(Scan#:3648) MassPeaks:59
 RawMode:Averaged 22.230-22.240(3647-3649) BasePeak:93.10(13081)
 BG Mode:Calc. from Peak



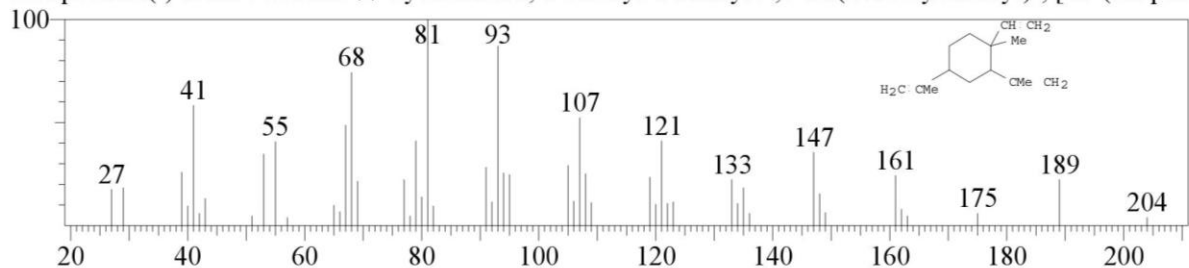
Hit#:1 Entry:100278 Library:WILEY7.LIB
 SI:94 Formula:C15 H24 CAS:515-13-9 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:.BETA. ELEMENE \$\$



Hit#:2 Entry:46610 Library:NIST11.lib
 SI:93 Formula:C15H24 CAS:515-13-9 MolWeight:204 RetIndex:1398
 CompName:Cyclohexane, 1-ethenyl-1-methyl-2,4-bis(1-methylethenyl)-, [1S-(1.alpha.,2.beta.,4.beta.)]- \$\$\$\$



Hit#:3 Entry:100725 Library:WILEY7.LIB
 SI:93 Formula:C15 H24 CAS:515-13-9 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:(-).beta.-Elemene \$\$ Cyclohexane, 1-ethenyl-1-methyl-2,4-bis(1-methylethenyl)-, [1S-(1.alpha.

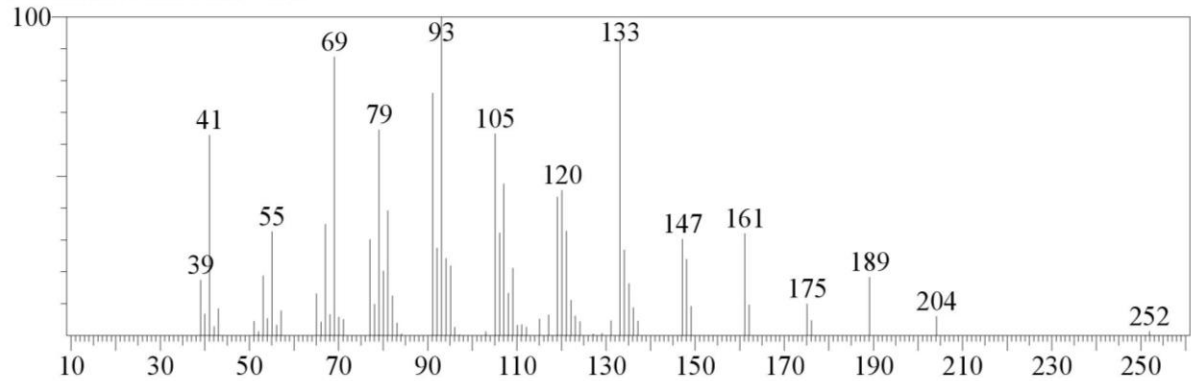


<< Target >>

Line#:27 R.Time:23.425(Scan#:3886) MassPeaks:69

RawMode:Averaged 23.420-23.430(3885-3887) BasePeak:93.10(26338)

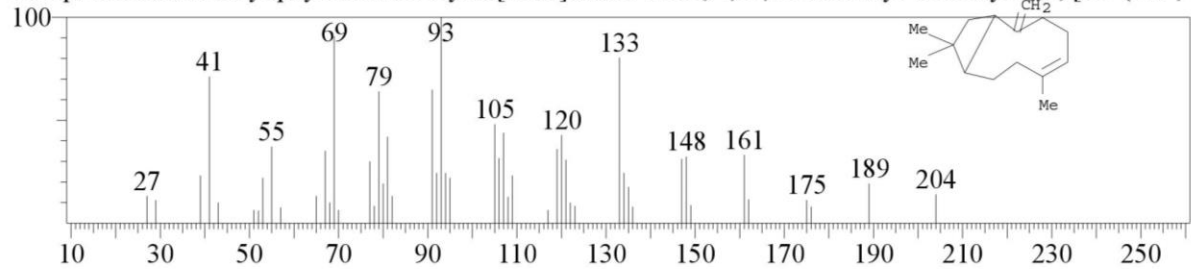
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:100782 Library:WILEY7.LIB

SI:96 Formula:C15H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:0

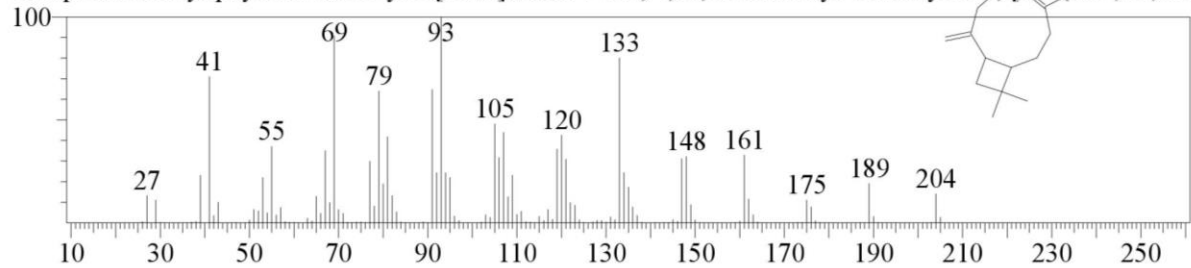
CompName:trans-Caryophyllene \$\$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4



Hit#:2 Entry:18069 Library:NIST11s.lib

SI:96 Formula:C15H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:1494

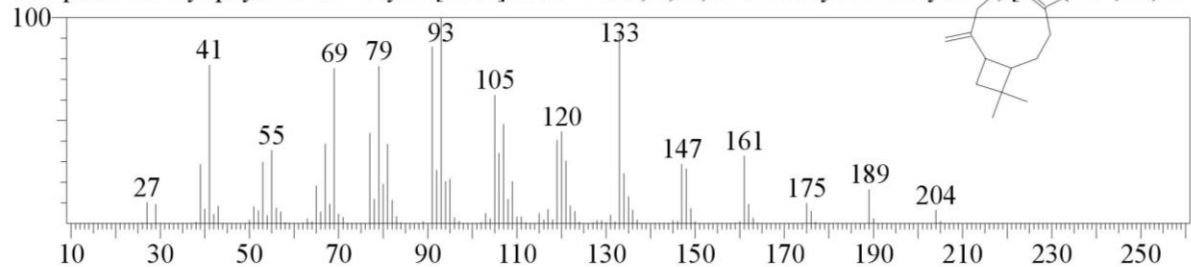
CompName:Caryophyllene \$\$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S:



Hit#:3 Entry:46636 Library:NIST11.lib

SI:96 Formula:C15H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:1494

CompName:Caryophyllene \$\$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S:

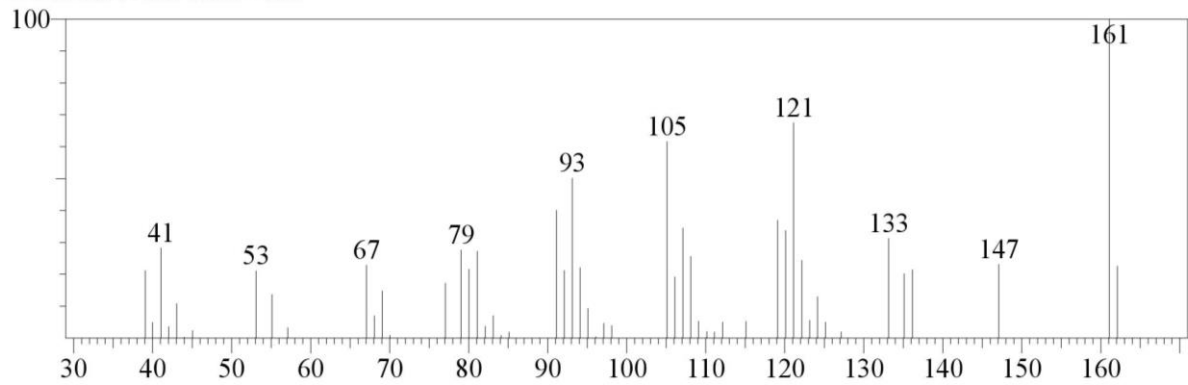


<< Target >>

Line#:28 R.Time:23.860(Scan#:3973) MassPeaks:53

RawMode:Averaged 23.855-23.865(3972-3974) BasePeak:161.10(6719)

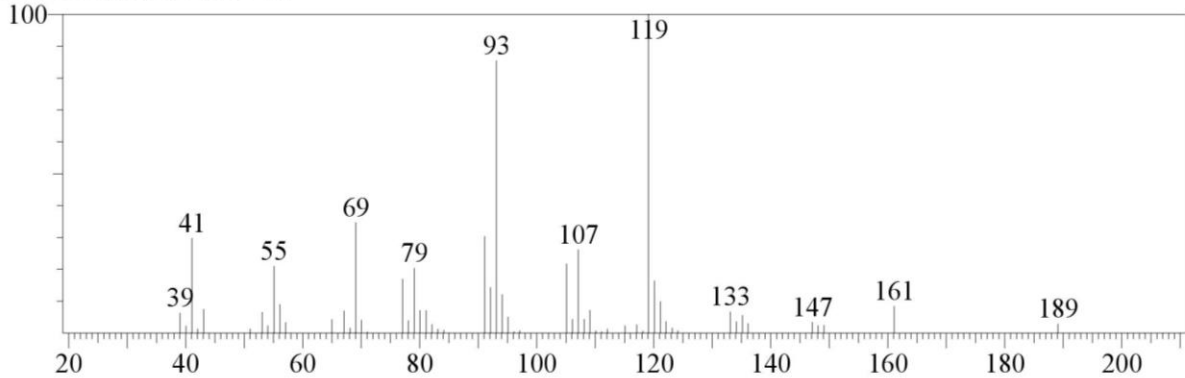
BG Mode:Calc. from Peak



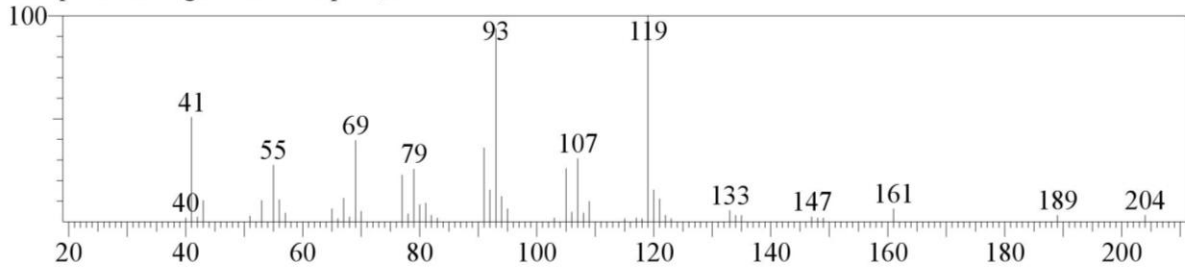
No hit compound

<< Target >>

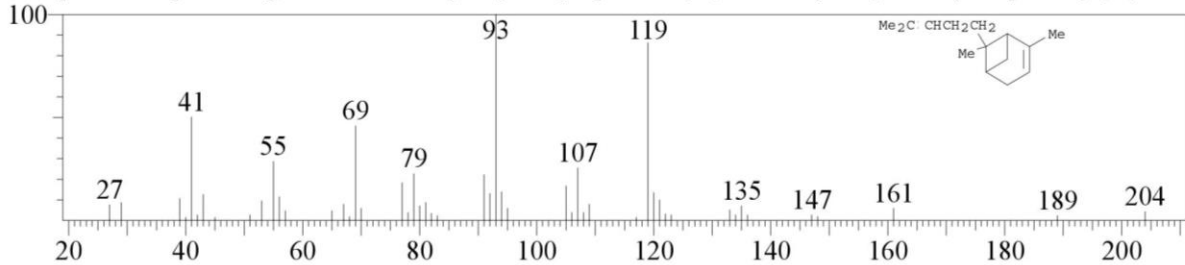
Line#:29 R.Time:24.040(Scan#:4009) MassPeaks:61
 RawMode:Averaged 24.035-24.045(4008-4010) BasePeak:119.10(51178)
 BG Mode:Calc. from Peak



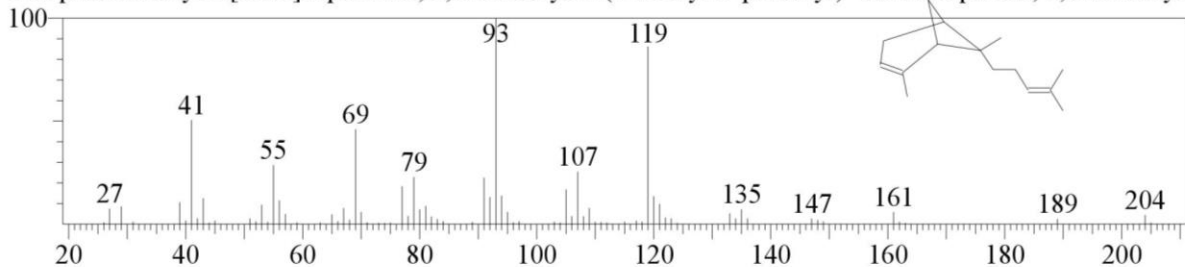
Hit#:1 Entry:1205 Library:FFNSC1.3.lib
 SI:94 Formula:C15 H24 CAS:18252-46-5 MolWeight:204 RetIndex:1416
 CompName:Bergamotene <alpha-, cis->



Hit#:2 Entry:100220 Library:WILEY7.LIB
 SI:94 Formula:C15 H24 CAS:17699-05-7 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:.alpha.-Bergamotene \$\$ Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6-dimethyl-6-(4-methyl-3-pentenyl)- (CAS



Hit#:3 Entry:18073 Library:NIST11s.lib
 SI:94 Formula:C15H24 CAS:17699-05-7 MolWeight:204 RetIndex:1430
 CompName:Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6-dimethyl-6-(4-methyl-3-pentenyl)- \$\$ 2-Norpinene, 2,6-dimethyl

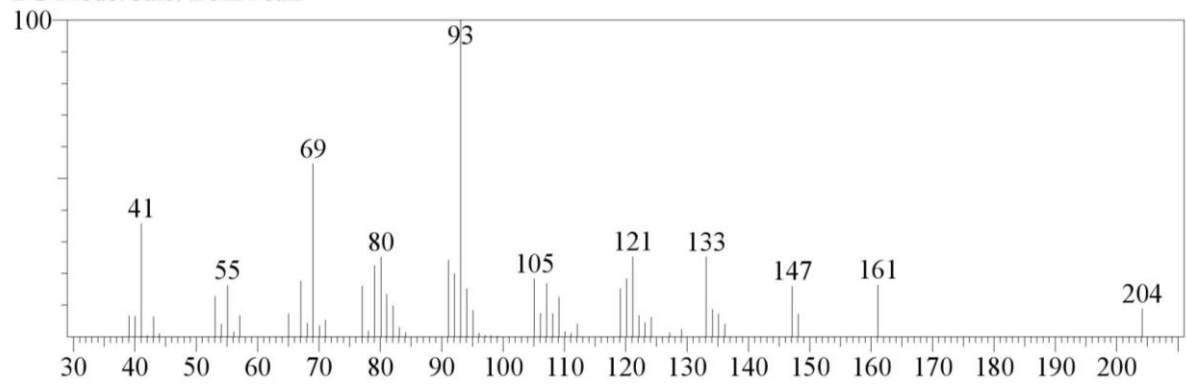


<< Target >>

Line#:30 R.Time:24.900(Scan#:4181) MassPeaks:60

RawMode:Averaged 24.895-24.905(4180-4182) BasePeak:93.10(16809)

BG Mode:Calc. from Peak



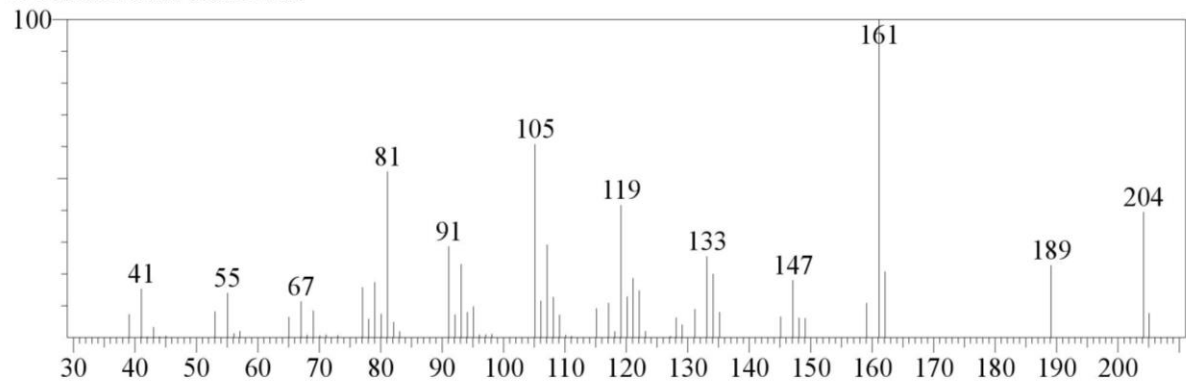
No hit compound

<< Target >>

Line#:31 R.Time:25.600(Scan#:4321) MassPeaks:64

RawMode:Averaged 25.595-25.605(4320-4322) BasePeak:161.10(17279)

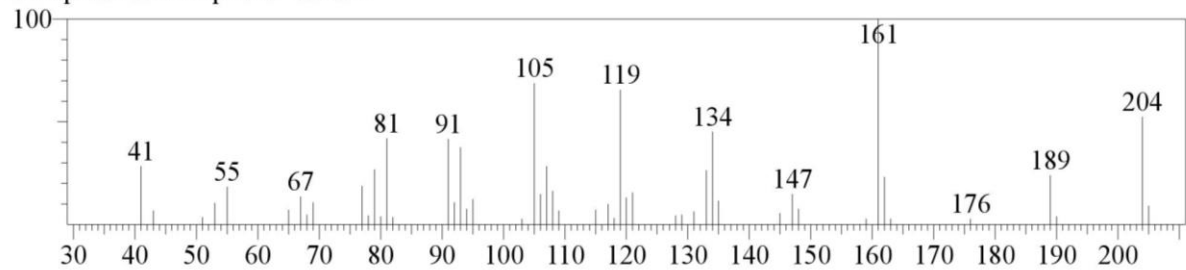
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:1773 Library:FFNSC1.3.lib

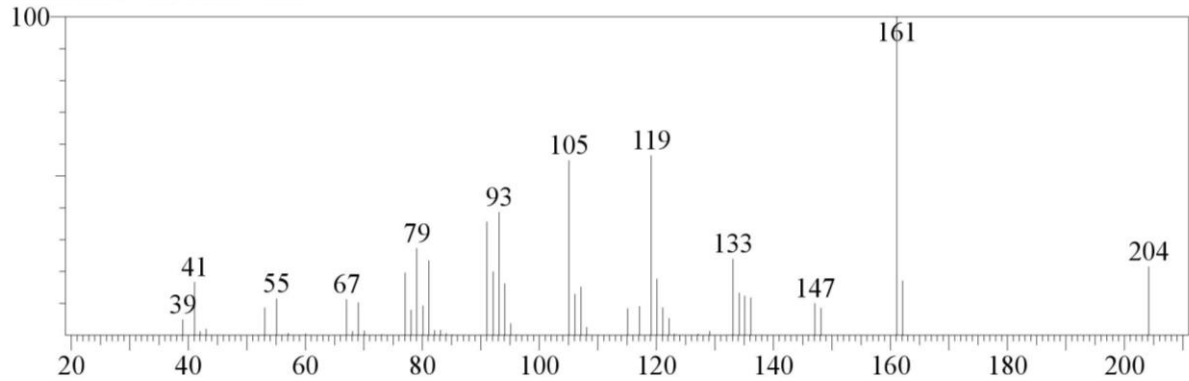
SI:91 Formula:C₁₅H₂₄ CAS:317819-82-2 MolWeight:204 RetIndex:1506

CompName:Amorphene <delta->

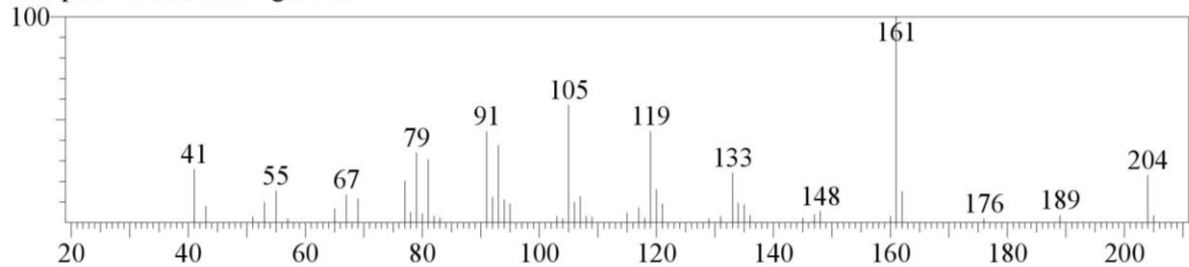


<< Target >>

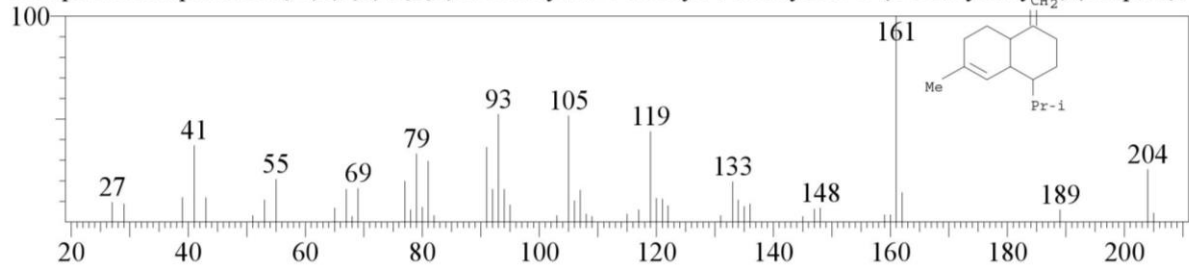
Line#:32 R.Time:25.745(Scan#:4350) MassPeaks:51
 RawMode:Averaged 25.740-25.750(4349-4351) BasePeak:161.10(13318)
 BG Mode:Calc. from Peak



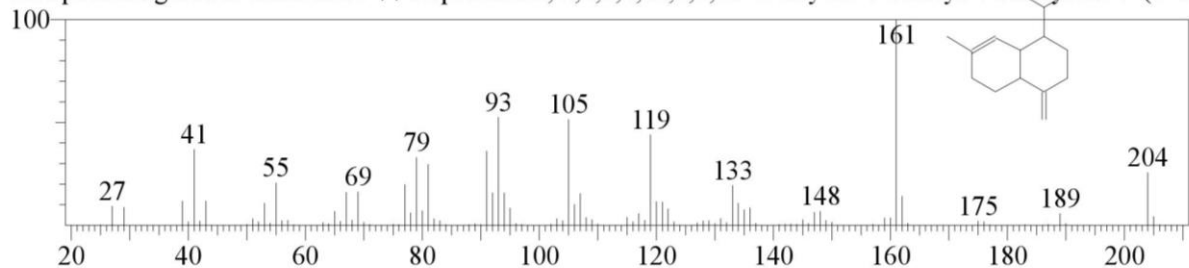
Hit#:1 Entry:1093 Library:FFNSC1.3.lib
 SI:91 Formula:C15 H24 CAS:38357-83-4 MolWeight:204 RetIndex:1512
 CompName:Cadinene <gamma->



Hit#:2 Entry:100949 Library:WILEY7.LIB
 SI:91 Formula:C15 H24 CAS:30021-74-0 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,4



Hit#:3 Entry:18125 Library:NIST11s.lib
 SI:91 Formula:C15H24 CAS:30021-74-0 MolWeight:204 RetIndex:1435
 CompName:.gamma.-Muurolene \$\$ Naphthalene, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-7-methyl-4-methylene-1-(1-n

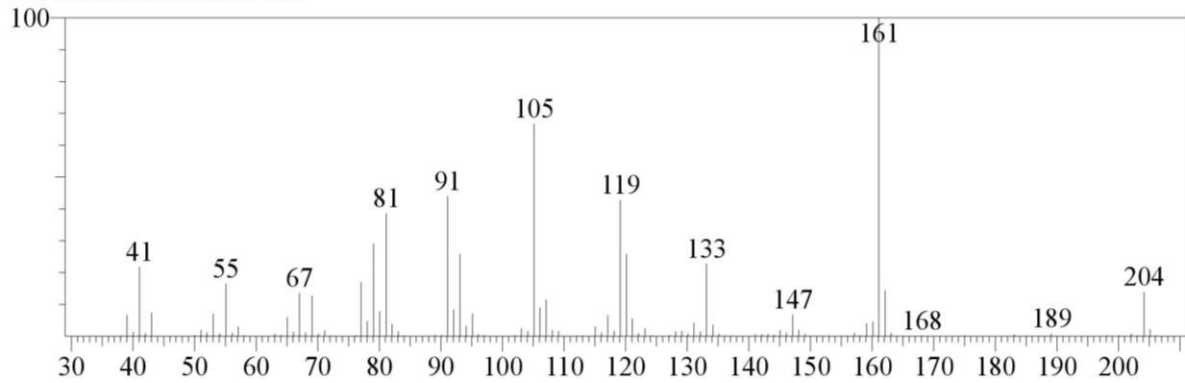


<< Target >>

Line#:33 R.Time:25.990(Scan#:4399) MassPeaks:112

RawMode:Averaged 25.985-25.995(4398-4400) BasePeak:161.10(723791)

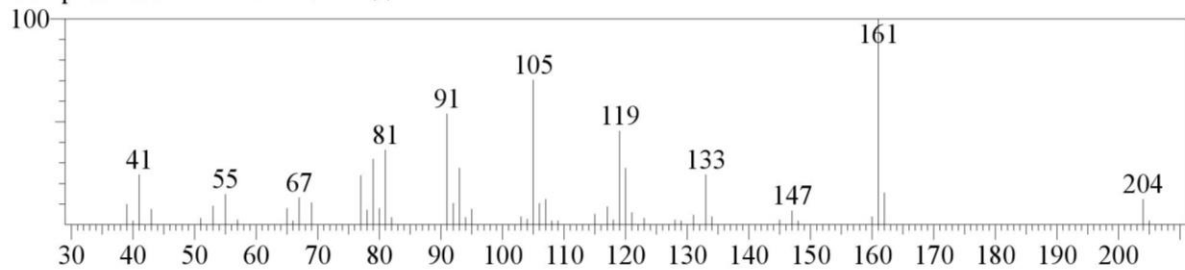
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:100272 Library:WILEY7.LIB

SI:96 Formula:C15 H24 CAS:23986-74-5 MolWeight:204 RetIndex:0

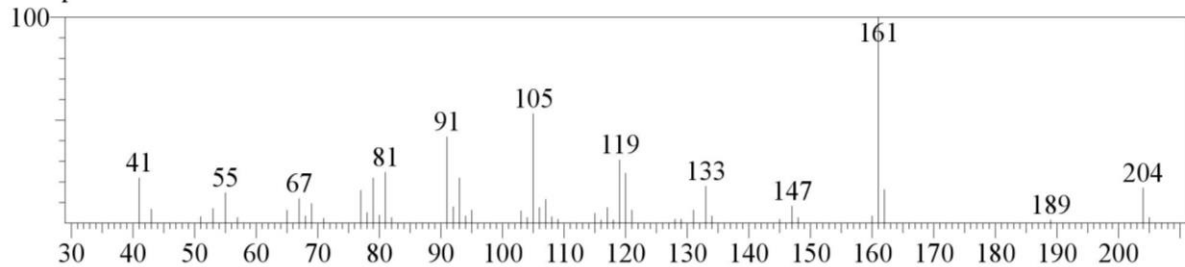
CompName:GERMACRENE-D \$\$



Hit#:2 Entry:1471 Library:FFNSC1.3.lib

SI:94 Formula:C15 H24 CAS:13744-15-5 MolWeight:204 RetIndex:1392

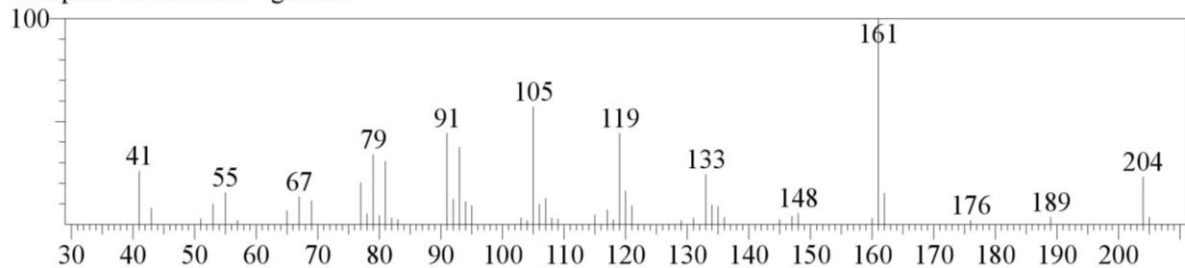
CompName:Cubebene <beta->



Hit#:3 Entry:1093 Library:FFNSC1.3.lib

SI:93 Formula:C15 H24 CAS:38357-83-4 MolWeight:204 RetIndex:1512

CompName:Cadinene <gamma->

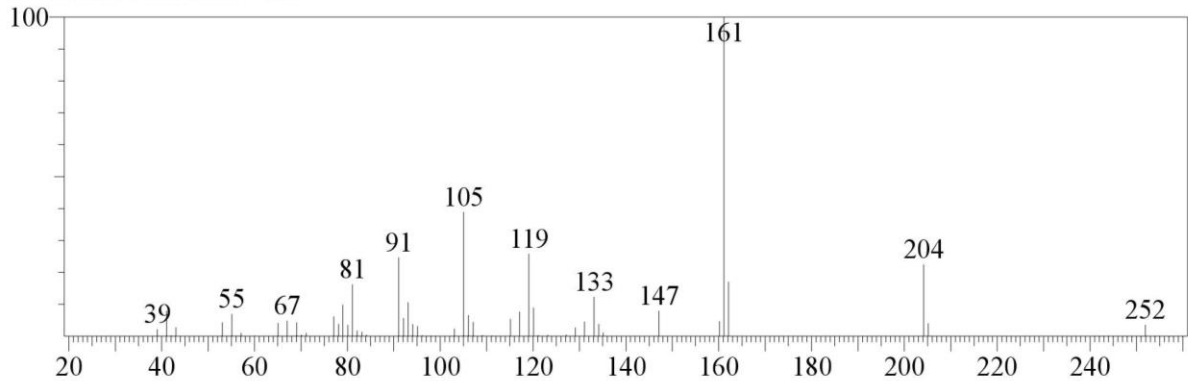


<< Target >>

Line#:34 R.Time:26.365(Scan#:4474) MassPeaks:59

RawMode:Averaged 26.360-26.370(4473-4475) BasePeak:161.10(29600)

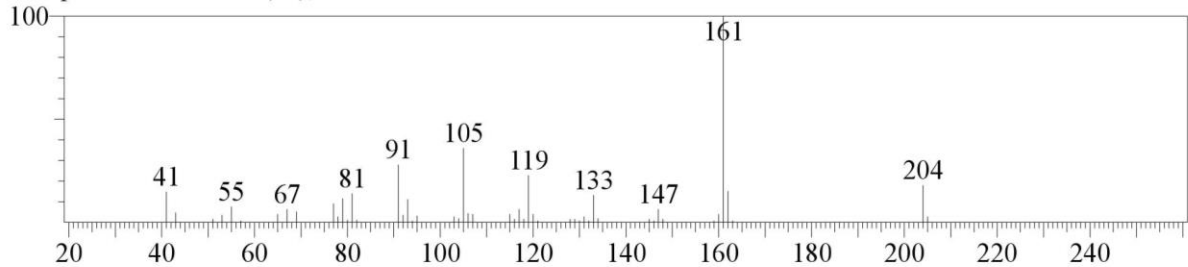
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:1723 Library:FFNSC1.3.lib

SI:93 Formula:C15 H24 CAS:157477-72-0 MolWeight:204 RetIndex:1466

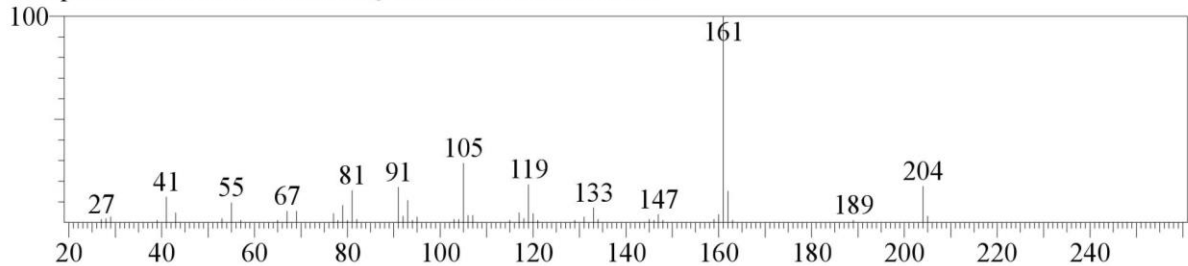
CompName:Muurola-4(14),5-diene <cis->



Hit#:2 Entry:100172 Library:WILEY7.LIB

SI:91 Formula:C15 H24 CAS:54324-03-7 MolWeight:204 RetIndex:0

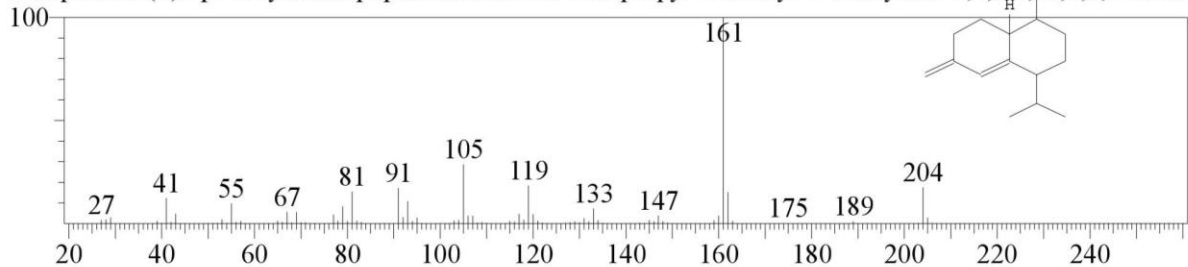
CompName:EPI-BICYCLOSESQUIPHELLANDRENE \$\$



Hit#:3 Entry:46729 Library:NIST11.lib

SI:91 Formula:C15H24 CAS:54274-73-6 MolWeight:204 RetIndex:1435

CompName:(+)-epi-Bicyclossequiphellandrene \$\$ 1-Isopropyl-4-methyl-7-methylene-1,2,3,4,4a,5,6,7-octah

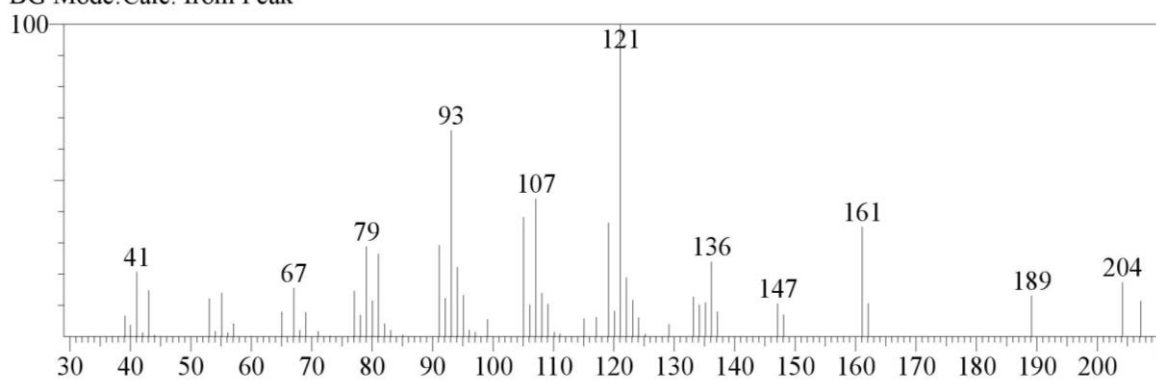


<< Target >>

Line#:35 R.Time:26.530(Scan#:4507) MassPeaks:63

RawMode:Averaged 26.525-26.535(4506-4508) BasePeak:121.10(18918)

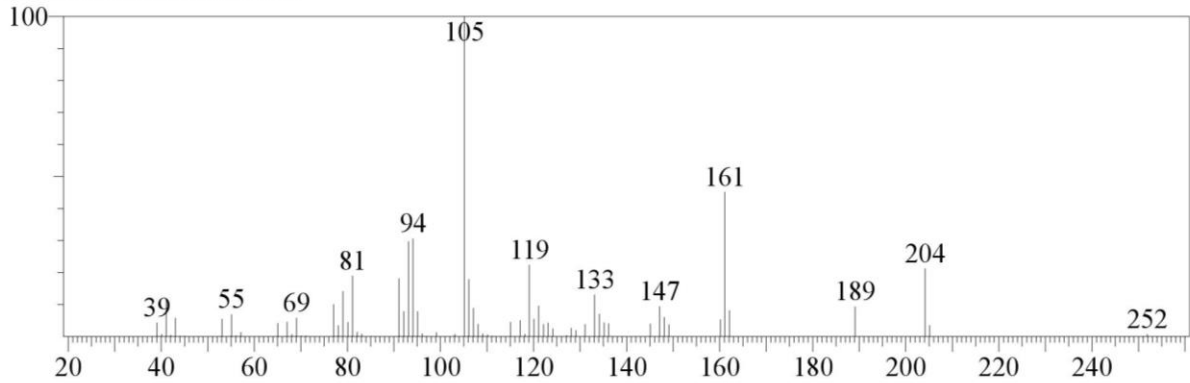
BG Mode:Calc. from Peak



No hit compound

<< Target >>

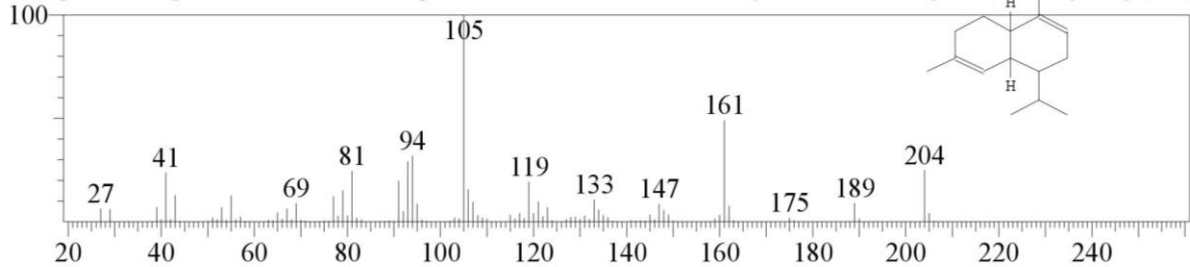
Line#:36 R.Time:26.685(Scan#:4538) MassPeaks:69
 RawMode:Averaged 26.680-26.690(4537-4539) BasePeak:105.10(44456)
 BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:46658 Library:NIST11.lib

SI:96 Formula:C15H24 CAS:10208-80-7 MolWeight:204 RetIndex:1440

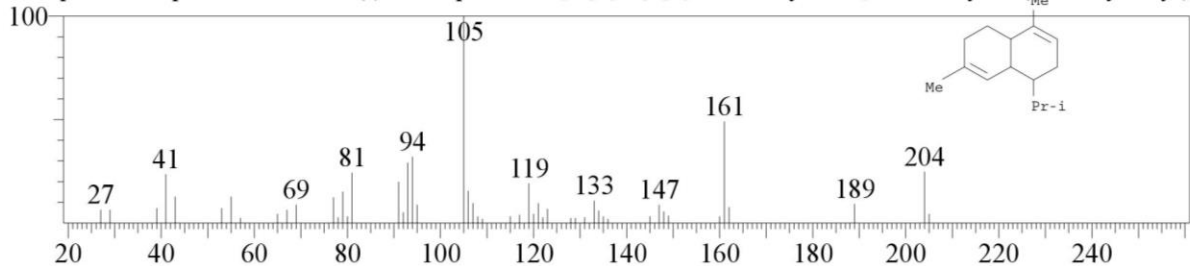
CompName:.alpha.-Muurolene \$\$ Naphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (



Hit#:2 Entry:100213 Library:WILEY7.LIB

SI:96 Formula:C15 H24 CAS:10208-80-7 MolWeight:204 RetIndex:0

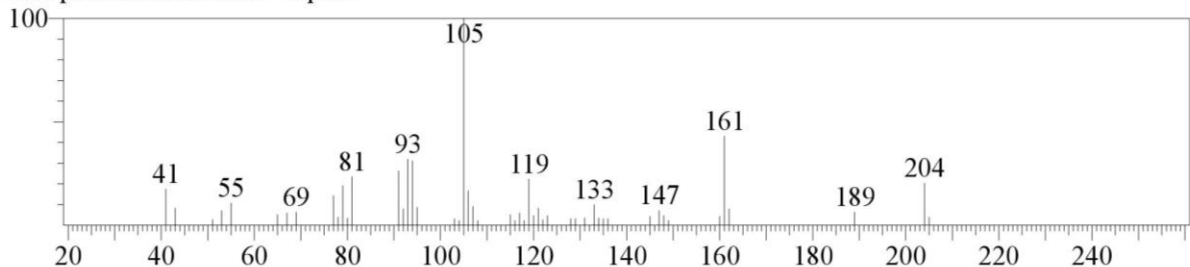
CompName:.alpha.-Muurolene-(-) \$\$ Naphthalene, 1,2,4a,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)



Hit#:3 Entry:1052 Library:FFNSC1.3.lib

SI:95 Formula:C15 H24 CAS:10208-80-7 MolWeight:204 RetIndex:1497

CompName:Muurolene <alpha->

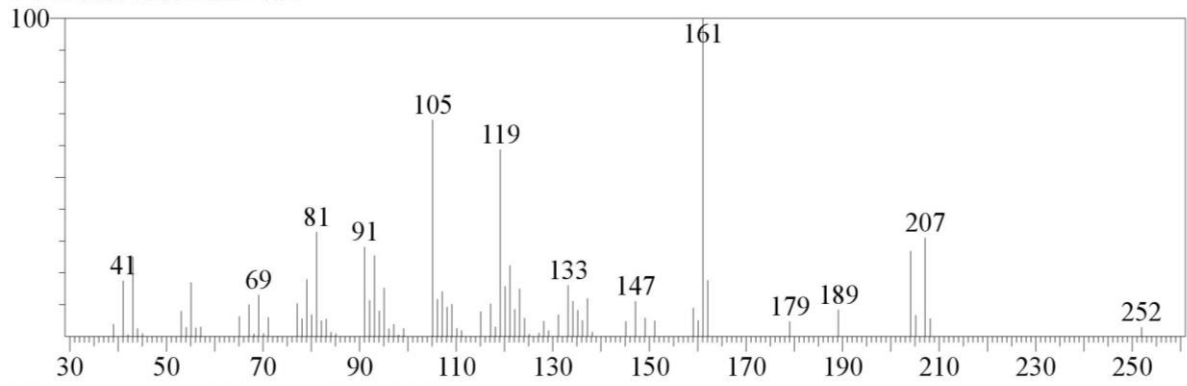


<< Target >>

Line#:37 R.Time:27.340(Scan#:4669) MassPeaks:79

RawMode:Averaged 27.335-27.345(4668-4670) BasePeak:161.10(23130)

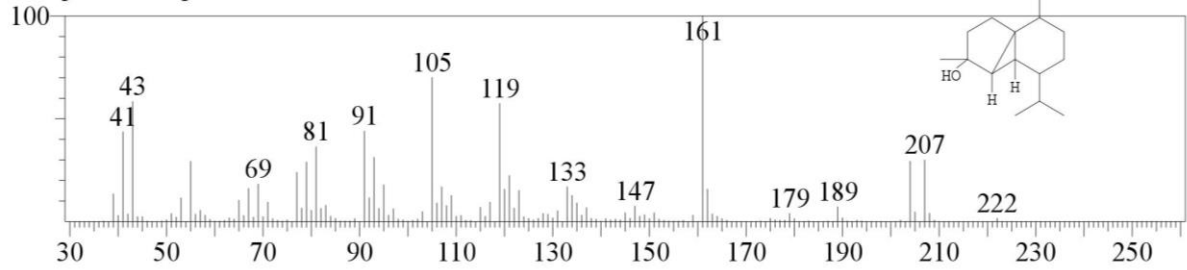
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:59446 Library:NIST11.lib

SI:91 Formula:C₁₅H₂₆O CAS:0-00-0 MolWeight:222 RetIndex:1484

CompName:4-epi-cubedol

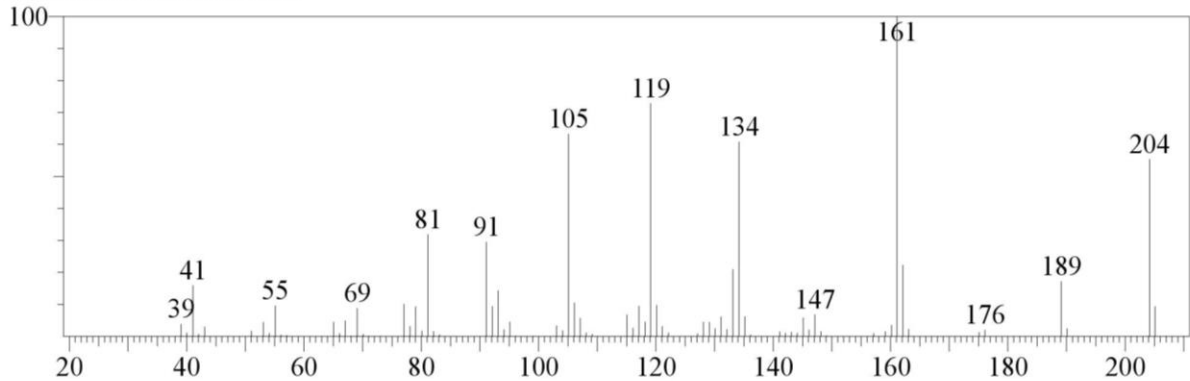


<< Target >>

Line#:38 R.Time:27.465(Scan#:4694) MassPeaks:82

RawMode:Averaged 27.460-27.470(4693-4695) BasePeak:161.10(114005)

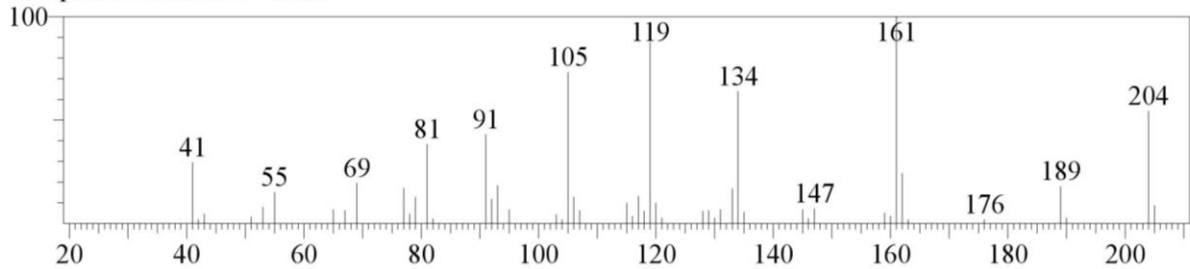
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:838 Library:FFNSC1.3.lib

SI:94 Formula:C15 H24 CAS:16729-01-4 MolWeight:204 RetIndex:1518

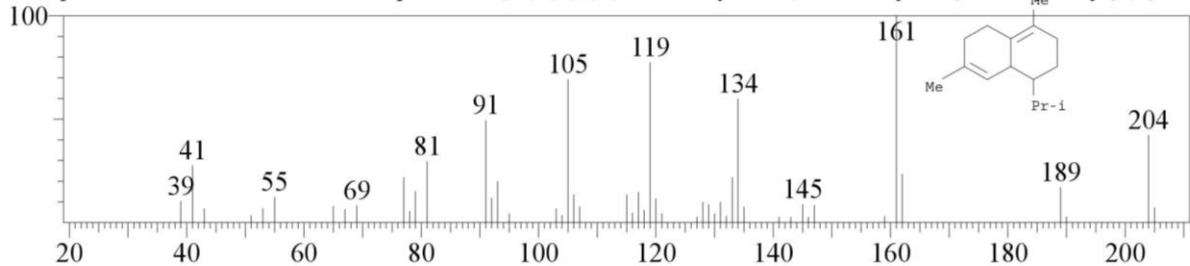
CompName:Cadinene <delta->



Hit#:2 Entry:100891 Library:WILEY7.LIB

SI:93 Formula:C15 H24 CAS:483-76-1 MolWeight:204 RetIndex:0

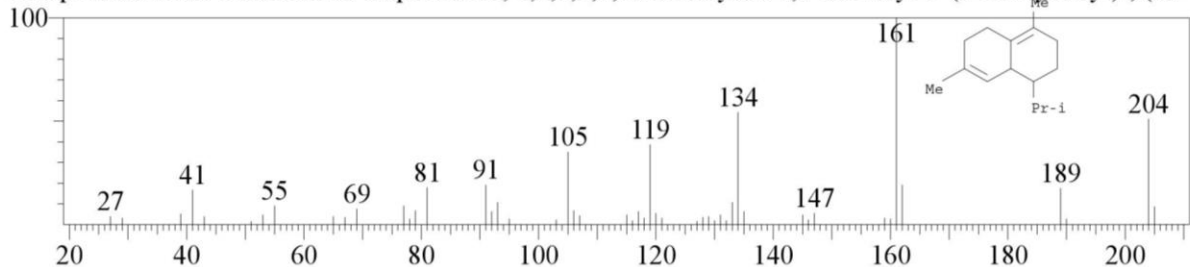
CompName:.delta.-Cadinene \$\$ Naphthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1S-



Hit#:3 Entry:100886 Library:WILEY7.LIB

SI:93 Formula:C15 H24 CAS:483-76-1 MolWeight:204 RetIndex:0

CompName:.delta.-Cadinene \$\$ Naphthalene, 1,2,3,5,6,8a-hexahydro-4,7-dimethyl-1-(1-methylethyl)-, (1S-

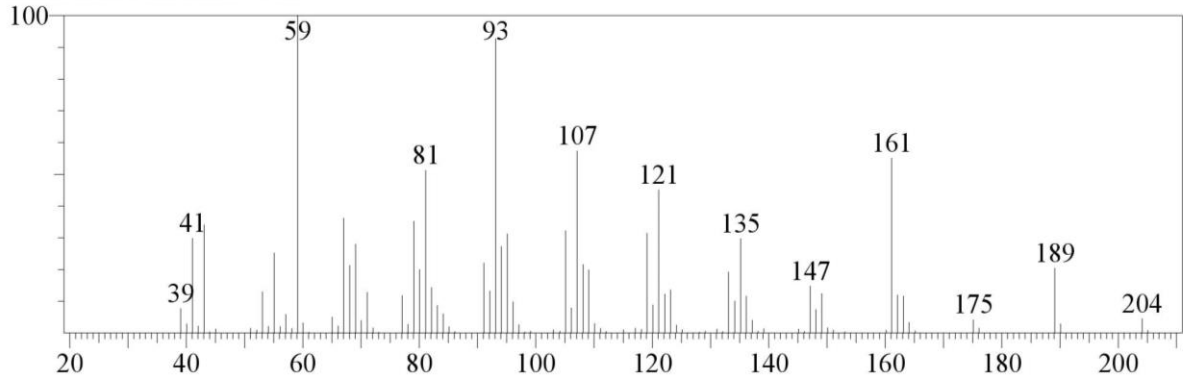


<< Target >>

Line#:39 R.Time:28.685(Scan#:4938) MassPeaks:99

RawMode:Averaged 28.680-28.690(4937-4939) BasePeak:59.10(210974)

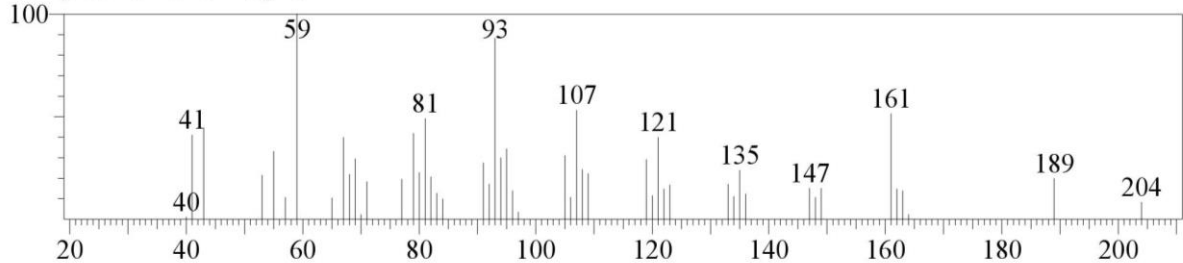
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:1051 Library:FFNSC1.3.lib

SI:95 Formula:C15 H26 O CAS:19078-36-5 MolWeight:222 RetIndex:1546

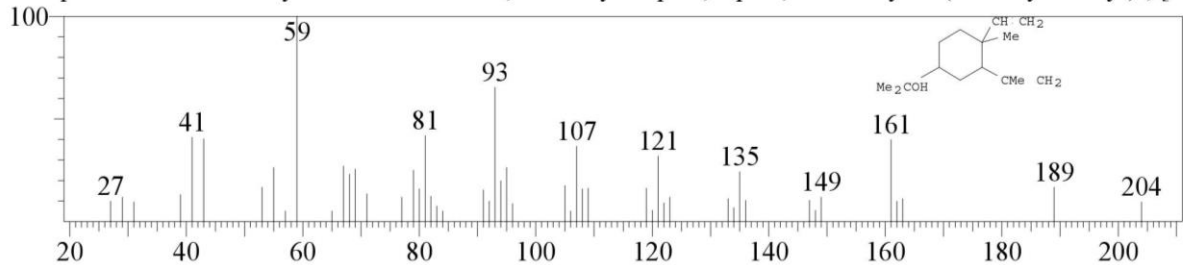
CompName:Elemol <alpha->



Hit#:2 Entry:123949 Library:WILEY7.LIB

SI:93 Formula:C15 H26 O CAS:639-99-6 MolWeight:222 RetIndex:0

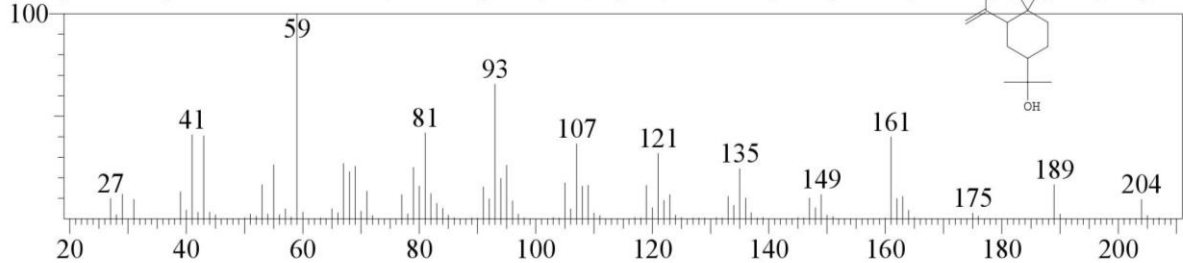
CompName:Elemol \$\$ Cyclohexanemethanol, 4-ethenyl-.alpha.,.alpha.,4-trimethyl-3-(1-methylethenyl)-, [1



Hit#:3 Entry:59376 Library:NIST11.lib

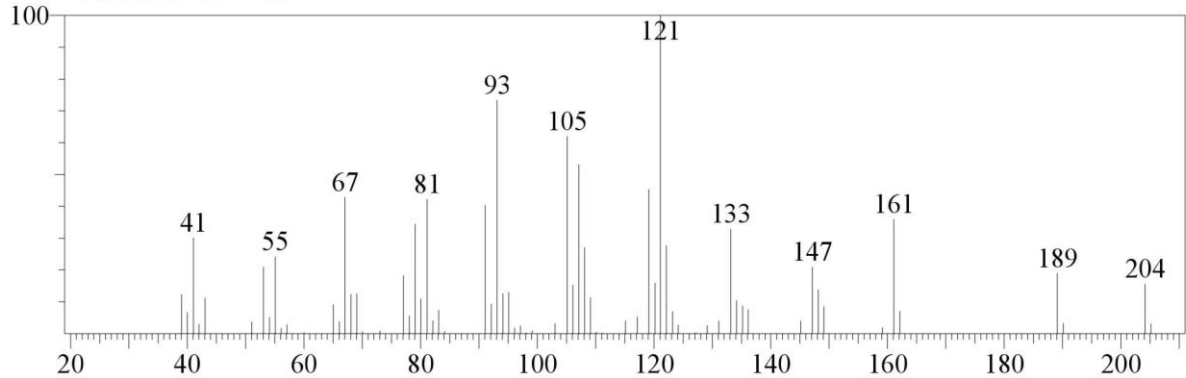
SI:93 Formula:C15H26O CAS:639-99-6 MolWeight:222 RetIndex:1522

CompName:Cyclohexanemethanol, 4-ethenyl-.alpha.,.alpha.,4-trimethyl-3-(1-methylethenyl)-, [1R-(1.alpha.

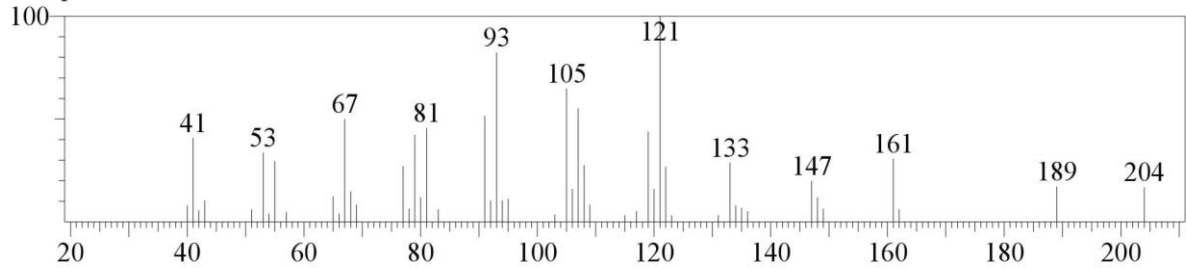


<< Target >>

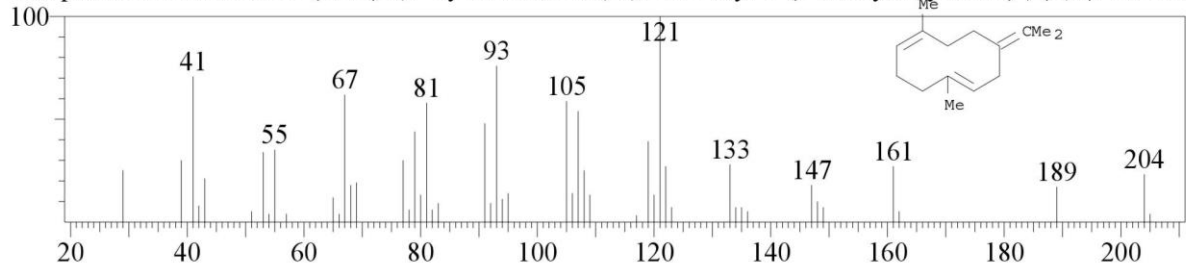
Line#:40 R.Time:28.985(Scan#:4998) MassPeaks:70
 RawMode:Averaged 28.980-28.990(4997-4999) BasePeak:121.10(34557)
 BG Mode:Calc. from Peak



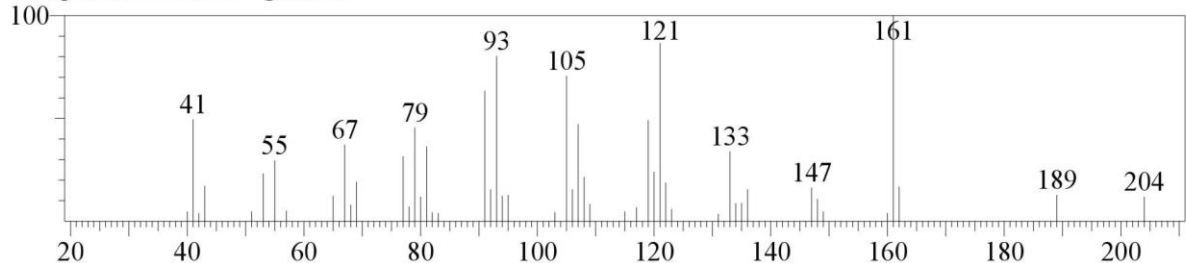
Hit#:1 Entry:1080 Library:FFNSC1.3.lib
 SI:95 Formula:C15 H24 CAS:15423-57-1 MolWeight:204 RetIndex:1557
 CompName:Germacrene B



Hit#:2 Entry:100751 Library:WILEY7.LIB
 SI:93 Formula:C15 H24 CAS:15423-57-1 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:Germacrene B (CAS) 1,5-Cyclodecadiene, 1,5-dimethyl-8-(1-methylethylidene)-, (E,E)- \$\$ Ger



Hit#:3 Entry:1589 Library:FFNSC1.3.lib
 SI:91 Formula:C15 H24 CAS:29873-99-2 MolWeight:204 RetIndex:1432
 CompName:Elemene <gamma->

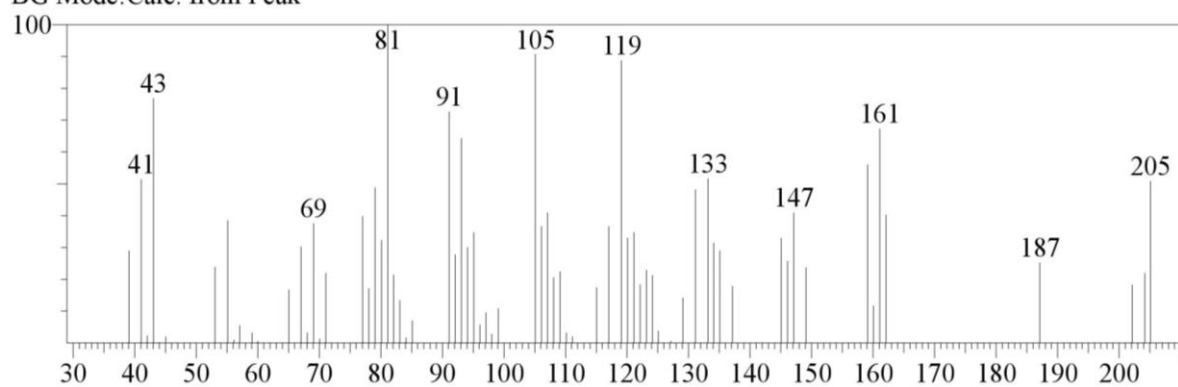


<< Target >>

Line#:41 R.Time:29.710(Scan#:5143) MassPeaks:71

RawMode:Averaged 29.705-29.715(5142-5144) BasePeak:81.10(6005)

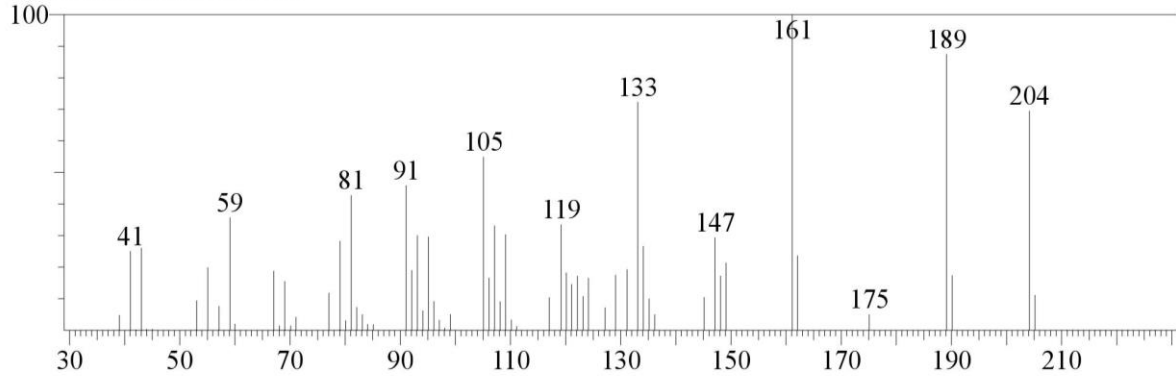
BG Mode:Calc. from Peak



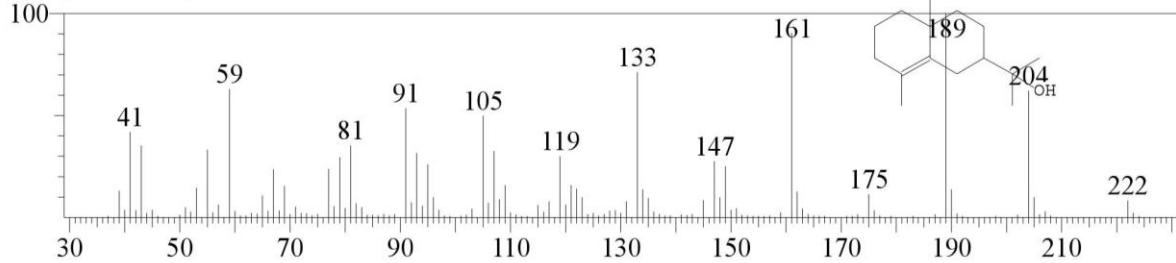
No hit compound

<< Target >>

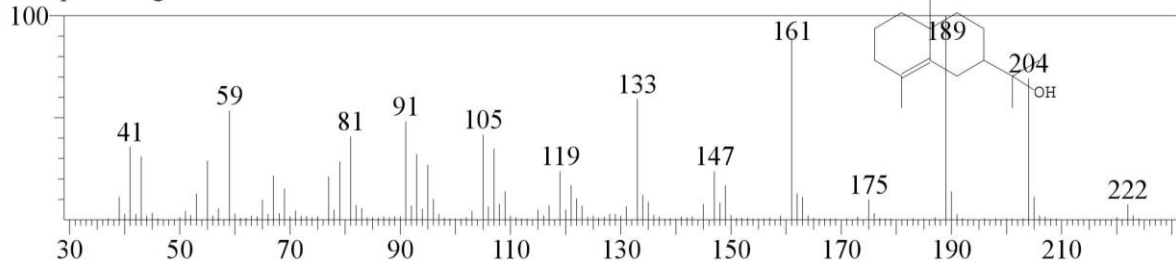
Line#:42 R.Time:31.425(Scan#:5486) MassPeaks:65
 RawMode:Averaged 31.420-31.430(5485-5487) BasePeak:161.10(6664)
 BG Mode:Calc. from Peak



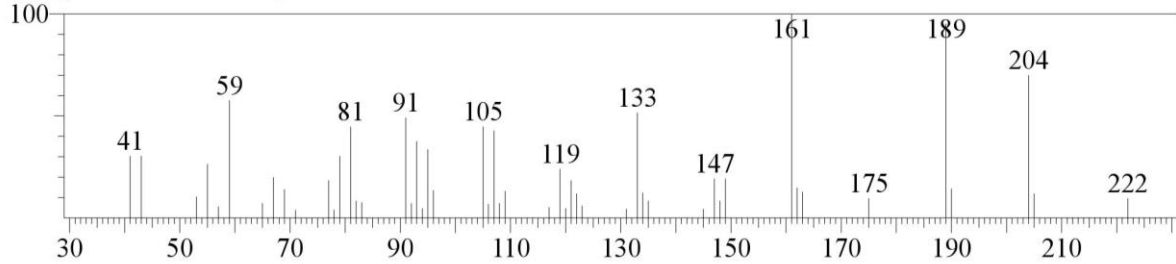
Hit#:1 Entry:59451 Library:NIST11.lib
 SI:91 Formula:C₁₅H₂₆O CAS:0-00-0 MolWeight:222 RetIndex:1626
 CompName:8-epi-gama.-eudesmol



Hit#:2 Entry:59452 Library:NIST11.lib
 SI:90 Formula:C₁₅H₂₆O CAS:0-00-0 MolWeight:222 RetIndex:1626
 CompName:gama.-eudesmol



Hit#:3 Entry:1099 Library:FFNSC1.3.lib
 SI:90 Formula:C₁₅H₂₆O CAS:1209-71-8 MolWeight:222 RetIndex:1632
 CompName:Eudesmol <gamma->

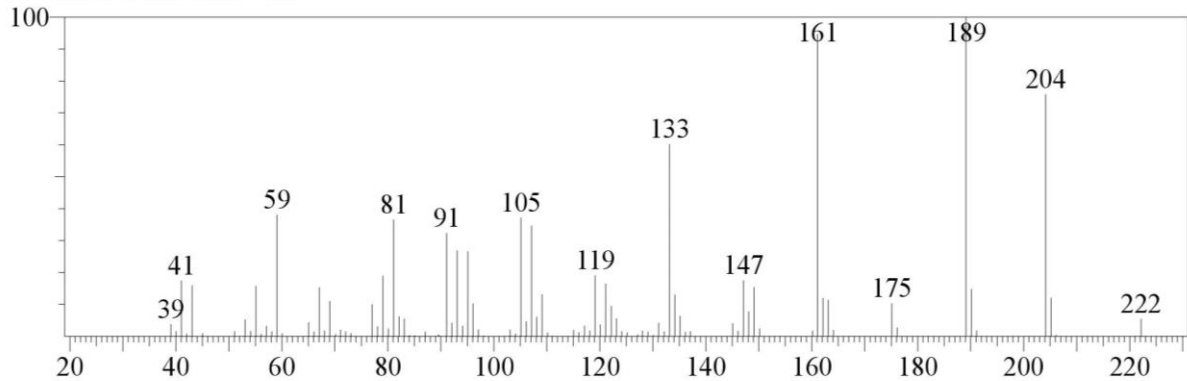


<< Target >>

Line#:43 R.Time:31.835(Scan#:5568) MassPeaks:95

RawMode:Averaged 31.830-31.840(5567-5569) BasePeak:189.10(81084)

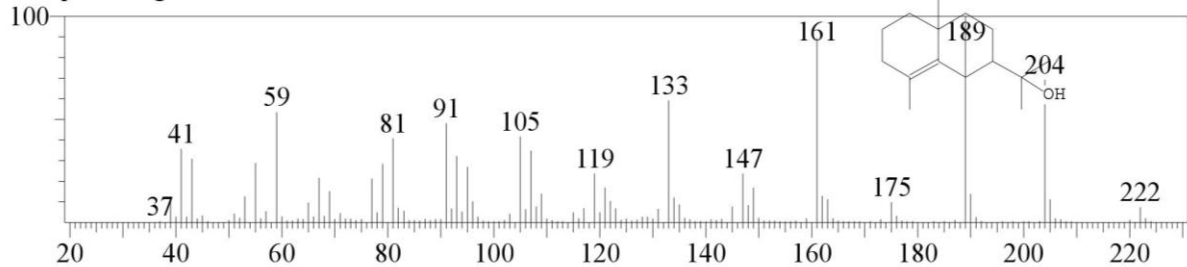
BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:59452 Library:NIST11.lib

SI:95 Formula:C15H26O CAS:0-00-0 MolWeight:222 RetIndex:1626

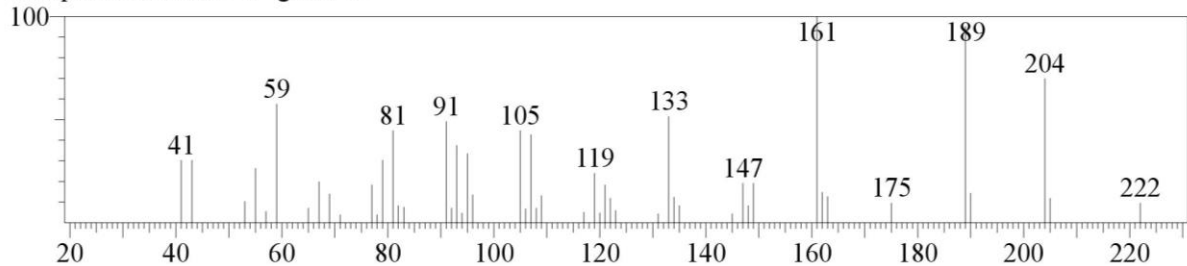
CompName:.gama.-eudesmol



Hit#:2 Entry:1099 Library:FFNSC1.3.lib

SI:94 Formula:C15 H26 O CAS:1209-71-8 MolWeight:222 RetIndex:1632

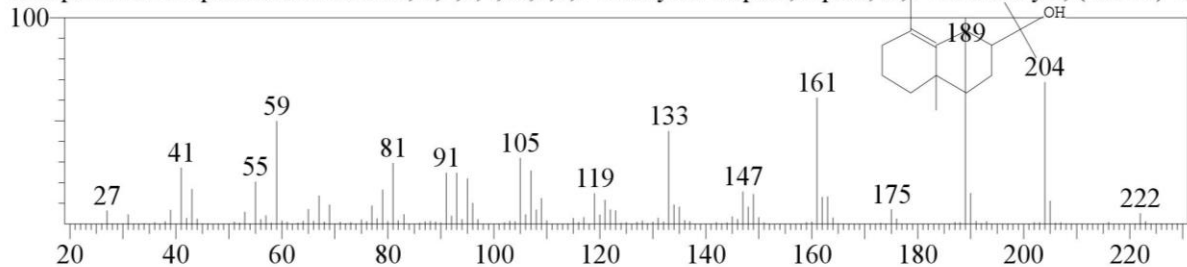
CompName:Eudesmol <gama->



Hit#:3 Entry:59454 Library:NIST11.lib

SI:94 Formula:C15H26O CAS:1209-71-8 MolWeight:222 RetIndex:1626

CompName:2-Naphthalenemethanol, 1,2,3,4,4a,5,6,7-octahydro-.alpha.,.alpha.,4a,8-tetramethyl-, (2R-cis)- 8

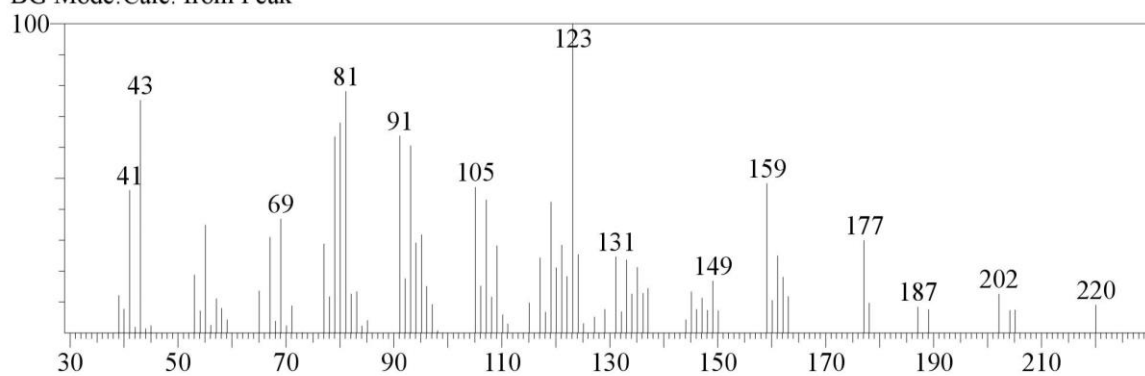


<< Target >>

Line#:44 R.Time:32.085(Scan#:5618) MassPeaks:85

RawMode:Averaged 32.080-32.090(5617-5619) BasePeak:123.15(16339)

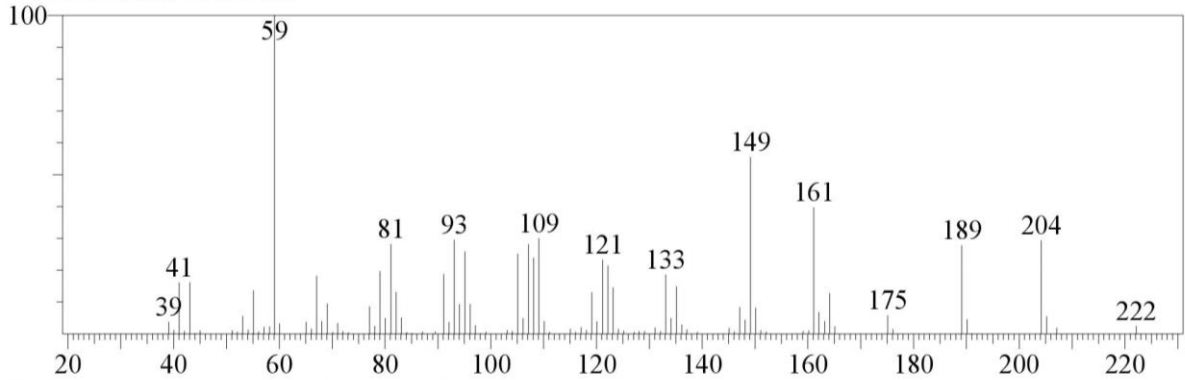
BG Mode:Calc. from Peak



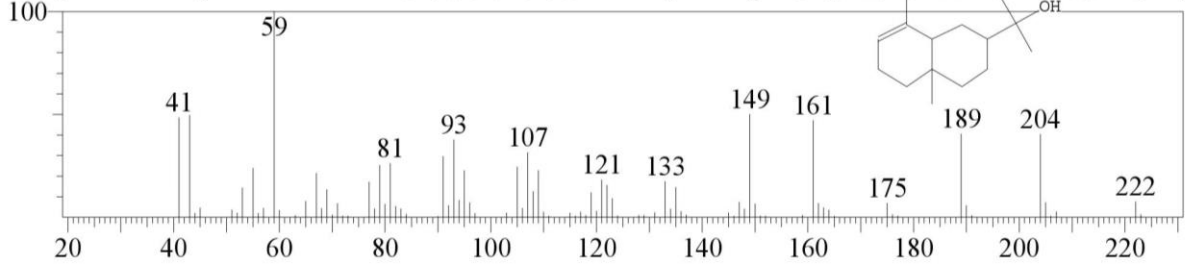
No hit compound

<< Target >>

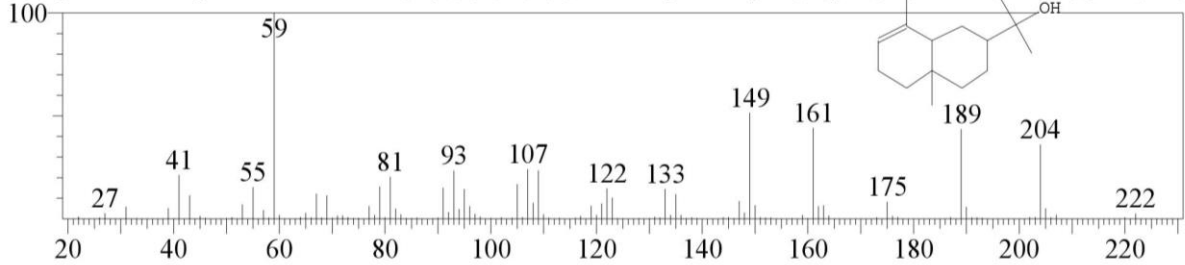
Line#:45 R.Time:32.695(Scan#:5740) MassPeaks:101
 RawMode:Averaged 32.690-32.700(5739-5741) BasePeak:59.10(163083)
 BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:20272 Library:NIST11s.lib
 SI:91 Formula:C15H26O CAS:473-16-5 MolWeight:222 RetIndex:1598
 CompName:2-Naphthalenemethanol, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro- .alpha., .alpha.,4a,8-tetramethyl-, [2R-(2.al



Hit#:2 Entry:59381 Library:NIST11.lib
 SI:90 Formula:C15H26O CAS:473-16-5 MolWeight:222 RetIndex:1598
 CompName:2-Naphthalenemethanol, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro- .alpha., .alpha.,4a,8-tetramethyl-, [2R-(2.al

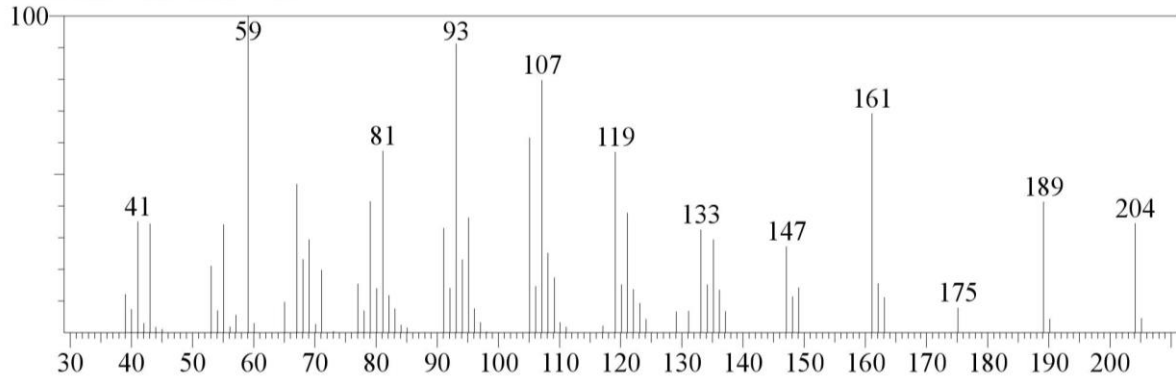


<< Target >>

Line#:46 R.Time:33.345(Scan#:5870) MassPeaks:71

RawMode:Averaged 33.340-33.350(5869-5871) BasePeak:59.10(15871)

BG Mode:Calc. from Peak



Hit#:1 Entry:1051 Library:FFNSC1.3.lib

SI:91 Formula:C15 H26 O CAS:19078-36-5 MolWeight:222 RetIndex:1546

CompName:Elemol <alpha->

