



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
CENTRO DE CIÊNCIAS DA SAÚDE  
CURSO DE GRADUAÇÃO EM FARMÁCIA

Natália Koehler

COMPARAÇÃO DO PERFIL QUÍMICO DE PROVÁVEIS QUIMIOTIPOS DE *Lippia alba* (Mill.) N. E. BROWN, UTILIZANDO CROMATOGRAFIA A GÁS ACOPLADA A DETECTOR DE MASSAS (CG-EM)

FLORIANÓPOLIS

2023

Natália Koehler

COMPARAÇÃO DO PERFIL QUÍMICO DE PROVÁVEIS QUIMIOTIPOS DE *Lippia alba* (Mill.) N. E. BROWN, UTILIZANDO CROMATOGRAFIA A GÁS ACOPLADA A DETECTOR DE MASSAS (CG-EM)

Trabalho de Conclusão de Curso submetido ao curso de Farmácia do Centro de Ciências da Saúde da Universidade Federal de Santa Catarina como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharel em Farmácia.

Orientadora: Prof.(a) Dr.(a) Maique Weber Biavatti  
Coorientador(a):  
Dr.(a) Amanda Ellen de Athayde

FLORIANÓPOLIS

2023

Koehler, Natália

COMPARAÇÃO DO PERFIL QUÍMICO DE PROVÁVEIS QUIMIOTIPOS DE *Lippia alba* (Mill.) N. E. BROWN, UTILIZANDO CROMATOGRAFIA A GÁS ACOPLADA A DETECTOR DE MASSAS (CG-EM) / Natália Koehler ; orientador, Maique Weber Biavatti, coorientador, Amanda E. de Athayde, 2023.

63 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Ciências da Saúde, Graduação em Farmácia, Florianópolis, 2023.

Inclui referências.

1. Farmácia. 2. *Lippia alba*. I. Weber Biavatti, Maique . II. E. de Athayde, Amanda. III. Universidade Federal de Santa Catarina. Graduação em Farmácia. IV. Título.

Natália Koehler

COMPARAÇÃO DO PERFIL QUÍMICO DE PROVÁVEIS QUIMIOTIPOS DE *Lippia alba* (Mill.) N. E. BROWN, UTILIZANDO CROMATOGRAFIA A GÁS ACOPLADA A DETECTOR DE MASSAS (CG-EM)

Este Trabalho de Conclusão de Curso foi julgado adequado para obtenção do título de Bacharel e aprovado em sua forma final pelo Curso de Farmácia.

Florianópolis, 29 de Junho de 2023.

Coordenação do Curso

**Banca examinadora**

Prof.(a) Dr.(a) Maique Weber Biavatti  
Orientador(a)

Prof.(a), Dr.(a) Luiz Pollo

Universidade Federal de Santa Catarina

Dr.(a) César P. Simionato

Universidade Federal de Santa Catarina

Florianópolis, 2023.

Aos meus pais, Carlos e Iraci, e minha irmã Camila.

## **AGRADECIMENTOS**

A orientadora, Professora Dra. Maique Weber Biavatti e Orientadora Amanda E. de Athayde por todos os aprendizados e paciência em todo o processo.

Aos integrantes da banca avaliadora, pelo interesse em minha pesquisa e disponibilidade. À todos que ajudaram para que fosse possível realizar este trabalho. À Universidade Federal de Santa Catarina e ao Curso de Farmácia pela oportunidade de adquirir conhecimento.

Aos colegas, amigos, professores nesta jornada.

Aos familiares e, principalmente, agradeço aos meus pais, Carlos e Iraci, minha irmã Camila, por todo amor, cumplicidade, suporte, ajuda, educação e por me apoiarem para ser possível a conclusão deste curso.

Obrigada a todos!

## RESUMO

*Lippia alba*, também conhecida como *Melissa*, *Salva* e *Sana-lo-todo*, é uma espécie vegetal pertencente à família Verbenaceae. É nativa da América Central e Sul. Suas folhas são aromáticas e são usadas em infusão (chás) de ervas por possuir uma variedade de usos medicinais tradicionais, como digestiva, em cólicas, diarreia, indigestão, náuseas e vômitos, calmante e ansiolítica. Indicada também para enxaqueca e como cicatrizante, além de gripes e resfriados. Este estudo teve como objetivo comparar o perfil químico dos extratos obtidos das folhas de diferentes indivíduos de *Lippia alba* (Mill.) N. E. Brown com características sensoriais diferentes. O material vegetal foi colhido no Horto Didático de Plantas Medicinais da Universidade Federal de Santa Catarina e no Porto da Lagoa no município de Florianópolis - Santa Catarina. Estas folhas foram submetidas aos seguintes processos extrativos: lavagem foliar, infusão com posterior fracionamento em fase sólida (SPE-C<sub>18</sub>) e headspace. Estes foram caracterizados quimicamente por cromatografia a gás acoplada a detector de massas com injeção líquida (infusão e a lavagem foliar) e injetor tipo *headspace*, utilizando biblioteca NIST e literatura para identificação dos compostos. Os resultados sugerem a variabilidade química dos espécimes de *L. alba*. Pode-se verificar que os indivíduos conhecidos popularmente como "Salva" coletados no Porto da Lagoa e no Horto apresentaram mesmo quimiotipo, com presença de linalol e beta-copaeno e na infusão linalol. Para os indivíduos conhecidos como "Melissa" e coletados nas mesmas localidades observou-se quimiotipo com a presença de citral e carveol, e na infusão também citral. Na "*Sana-lo-todo*" como quimiotipo diferente, com presença de carvona majoritária.

**Palavras-chave:** *Lippia alba*.; Cromatografia a Gás; Verbenaceae.

## ABSTRACT

*Lippia alba*, also known as Melissa, Salva, and Sana-lo-todo, is a plant species belonging to the Verbenaceae family. It is native to Central and South America. Its leaves are aromatic and are used in herbal infusions (teas) due to their variety of traditional medicinal uses, such as aiding digestion, relieving colic, diarrhea, indigestion, nausea, and vomiting, as well as providing calming and anxiolytic effects. It is also indicated for migraines and as a healing agent, in addition to treating colds and flu. This study aimed to compare the chemical profile of extracts obtained from the leaves of different individuals of *Lippia alba* (Mill.) N. E. Brown with different sensory characteristics. The plant material was collected from the Didactic Medicinal Plant Garden at the Federal University of Santa Catarina and from Porto da Lagoa in the municipality of Florianópolis - Santa Catarina. These leaves were subjected to the following extraction processes: leaf washing, infusion with subsequent solid-phase fractionation (SPE-C18), and headspace analysis. They were chemically characterized using gas chromatography coupled with mass spectrometry with liquid injection (infusion and leaf washing) and headspace injector, using the NIST library and literature for compound identification. The results suggest chemical variability among the specimens of *L. alba*. It was observed that the individuals popularly known as "Salva" collected from Porto da Lagoa and the garden exhibited the same chemotype, with the presence of linalol and beta-caryophyllene, and in the infusion, linalol was present. For the individuals known as "Melissa" and collected from the same locations, a chemotype with the presence of citral and carveol was observed, and in the infusion, citral was also present. In the case of "Sana-lo-todo," a different chemotype was identified, with the predominant presence of carvone.

**Keywords:** *Lippia alba*.; GC-MS.; Verbenaceae.



## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Tricomas glandulares de <i>Lippia alba</i> .....	19
Figura 2 - Procedimento extrativo pela técnica de lavagem foliar .....	21
Figura 3 - Dia da coleta do material vegetal .....	24
Figura 4 - Voucher ilustrativo de <i>L. alba</i> (subtipo melissa) .....	25
Figura 5 - Lavagem foliar .....	26
Figura 6 - Extração fase sólida utilizando fase reversa C-18 .....	27
Figura 7 - Cromatogramas comparativos obtidos por HS das folhas secas .....	30
Figura 8 - Cromatogramas das amostras obtidas por infusão (chá) .....	32
Figura 9 - Cromatograma da folha Melissa Horto obtida por HS .....	33
Figura 10 - Espectro de massas do composto em Tr 15,63 min, Citral .....	34
Figura 11 - Espectro de massas do composto em Tr 14,40 min, Carveol .....	35
Figura 12 - Estrutura química do composto Citral (1) .....	35
Figura 13 - Cromatograma da infusão de Melissa Horto obtida por CG-EM .....	36
Figura 14 - Espectro de massas do composto em Tr 5,81 min, Carveol .....	36
Figura 15 - Estrutura química do composto Carveol (2) .....	37
Figura 16 - Cromatograma da folha Melissa Porto Lagoa obtido por HS .....	37
Figura 17 - Espectro de massas do composto em Tr 15,63 min, Citral .....	38
Figura 18 - Espectro de massas do composto em Tr 14,4 min, Carveol .....	39
Figura 19 - Cromatograma da infusão Melissa Porto Lagoa obtido por CG-EM .....	39
Figura 20 - Espectro de massas do composto em Tr 5,79 min, Citral .....	40
Figura 21 - Cromatograma da folha Salva Horto obtida por HS .....	40
Figura 22 - Espectro de massas do composto em Tr 24,03 min, beta-copaeno (B-copaene) .....	41
Figura 23 - Espectro de massas do composto em Tr 8,59 min, Linalol .....	42
Figura 24 - Cromatograma da infusão Salva Horto obtida por CG-EM .....	43
Figura 25 - Espectro de massas do composto em Tr 3,42 min, Linalol .....	43
Figura 26 - Estrutura química do composto Linalol .....	44
Figura 27 - Cromatograma folha Salva Porto obtido por HS .....	44
Figura 28 - Espectro de massas do composto em Tr 24,03 min, beta-copaeno (B-copaene) .....	45
Figura 29 - Espectro de massas do composto em Tr 8,59 min, Linalol .....	46
Figura 30 - Estrutura química do composto Beta-copaeno (4) .....	46

Figura 31 - Cromatograma infusão Salva Porto obtido por CG-EM .....	47
Figura 32 - Espectro de massas do composto em Tr 3,42 min, Linalol .....	47
Figura 33 - Cromatograma folha Sana-lo-Todo obtido por HS .....	48
Figura 34 - Espectro de massas do composto em Tr 14,64 min, Carvona .....	49
Figura 35 - Espectro de massas do composto em Tr 6,55 min, Limoneno .....	50
Figura 36 - Cromatograma infusão Sana-lo-Todo obtido por CG-EM .....	50
Figura 37 - Espectro de massas do composto em Tr 5,5 min, Carvona .....	51
Figura 38 - Estrutura química do composto Carvona (5) .....	52

## LISTA DE QUADROS

Quadro 1 - Classificação dos Sete Quimiotipos .....	18
Quadro 2 - Comparação achados anatômicos e químicos segundo Jezler <i>et al.</i> (2012).....	20
Quadro 3 - Resultado da composição das amostras .....	53

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CG	Cromatógrafo a gás
EM	Espectrômetro de massas
SPE	Extração em fase sólida
CG-EM	Cromatografia a Gás Acoplada à Espectrometria de Massas
<i>NIST</i>	<i>National Institute of Standards and Technology</i>
<i>HS</i>	<i>HeadSpace</i>

## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO</b> .....	<b>16</b>
1.1 QUÍMIOTIPOS .....	16
<b>2 OBJETIVOS</b> .....	<b>22</b>
2.1 OBJETIVO GERAL .....	22
<b>2.1.1 Objetivos Específicos</b> .....	<b>22</b>
<b>3 JUSTIFICATIVA</b> .....	<b>23</b>
<b>4 MATERIAIS E MÉTODOS</b> .....	<b>24</b>
4.1 MATERIAL VEGETAL .....	24
<b>4.1.1 Coleta e identificação das espécies</b> .....	<b>24</b>
4.2 PROCESSO EXTRATIVO PARA <i>LIPPIA ALBA</i> .....	25
<b>4.2.1 LAVAGEM FOLIAR</b> .....	<b>25</b>
<b>4.2.2 INFUSÃO (CHÁ)</b> .....	<b>26</b>
4.3 CARACTERIZAÇÃO DOS EXTRATOS POR CROMATOGRAFIA A GÁS (CG-EM) .....	27
4.4 <i>HEADSPACE</i> .....	28
<b>5 RESULTADOS E DISCUSSÃO</b> .....	<b>29</b>
5.1 COLETA E IDENTIFICAÇÃO DA ESPÉCIE .....	29
5.2 LAVAGEM FOLIAR E ANÁLISE NO CG .....	29
5.3 ANÁLISE FOLHA <i>HEADSPACE</i> .....	29
5.4 INFUSÃO CHÁ .....	31
5.5 ANÁLISE HS E INFUSÃO CHÁ .....	33
<b>6 CONCLUSÃO</b> .....	<b>53</b>
<b>REFERÊNCIAS</b> .....	<b>55</b>
<b>ANEXO A - DADOS HEADSPACE</b> .....	<b>60</b>

## 1 INTRODUÇÃO

A espécie *Lippia alba* (Mill.) N. E. Brown pertencente à família Verbenaceae, é um arbusto aromático, sendo que no Brasil, os nomes mais comuns são: cidreira, carmelitana, chá-de-tabuleiro, cidrila, alecrim-selvagem, cidreira-brava, falsa-melissa, erva-cidreira, salva-do-brasil, alecrim-do-campo e *Sana-lo-todo* (Colombia) (LORENZI; MATOS, 2002).

*Lippia alba* é um subarbusto nativo, de morfologia variável, podendo atingir até um metro e meio de altura. Seus ramos são finos, longos, esbranquiçados, arqueados e quebradiços. As folhas são inteiras, opostas, de bordos serrados e ápice agudo, de 3-6 cm de comprimento. Suas flores são azul-arroxeadas, reunidas em inflorescências axilares capituliformes de eixo curto e tamanho variável e os frutos são drupas globosas de cor róseo-arroxeadas (LORENZI; MATOS, 2002).

Seu aroma está relacionado aos constituintes predominantes no óleo essencial, os quais podem variar qualitativamente e quantitativamente, em função de diversos fatores, tais como: estações do ano, época de floração, idade da planta, quantidade de água circulante, fatores geográficos e climáticos (CORRÊA, 1992; MATOS, 1998; TAVARES *et al.*, 2005).

Em estudo da fração volátil de *L. alba* coletada no Brasil (região central e norte) e também no estado do Paraná, Alonso (2002) descreve a presença dos componentes majoritários encontrados  $\gamma$ -terpineno (47,71%), cimeno (8,65%),  $\beta$ -cariofileno (7,23%), mirceno (1,32%), geraniol (0,69%), nerol (0,39%).

### 1.1 QUÍMIOTIPOS

Os químiotipos são definidos segundo Simões e Spitzer (2003) como plantas com o mesmo fenótipo ou botanicamente idênticas, mas com variações na composição química, em função de uma variabilidade genética e segundo Castro *et al.* (2004) as expressões químiotipos, raça química e “chemodeme” são sinônimas. A determinação dos químiotipos de uma planta tem relação com a concentração química majoritária de uma determinada substância química (SIMÕES; SPITZER, 2003), mas não foi identificado na literatura o padrão de referência ou de relação quantitativa que permita estabelecer os químiotipos (JANNUZZI, 2005).

A composição química do óleo essencial de *L. alba* é altamente variável, indicando a existência de um grande número de quimiotipos. Atti *et al.* (2002) relataram três tipos principais de quimiotipos com diferentes atividades farmacológicas, dependendo da maior relação de citral-mirceno, citral-limoneno e carvona-limoneno.

Tavares *et al.* (2005) encontraram três outros quimiotipos do óleo essencial de *L. alba* de acordo com diferentes regiões do Brasil. Os quimiotipos são provenientes do estado do Rio de Janeiro (citral), do estado do Ceará (carvona), e do estado de São Paulo (linalol). Lopes *et al.* (2011) avaliaram a composição do óleo essencial de quimiotipos brasileiros de *L. alba* e encontraram seis componentes principais: citral, geraniol, trans- $\gamma$ -cariofileno, carvona, limoneno e biciclosesquifelandreno. Mesa–Arango *et al.* (2009) identificaram vários quimiotipos em diferentes regiões da Colômbia, como citral e carvona. No entanto Stashenko *et al.* (2003) identificaram os quimiotipos carvona e limoneno na Colômbia e Lorenzo *et al.* (2001) encontraram o quimiotipo linalol no Uruguai.

Hennebelle *et al.* (2006) compararam a composição química do óleo essencial de *L. alba* coletado em diferentes territórios franceses e sugeriram outros critérios para a classificação dos quimiotipos. Com base nesses critérios, o óleo essencial de *L. alba* seria constituído por sete quimiotipos apresentados no Quadro 1. Os óleos que possuem citral, linalol e  $\gamma$ -cariofileno como seus principais componentes pertencem ao quimiotipo I. Os óleos incluídos no quimiotipo II têm a tagetenona como principal constituinte. Aqueles que possuem limoneno em grandes quantidades e com quantidade variável de carvona ou cetonas monoterpênicas em vez de carvona estão incluídos no quimiotipo III. Os demais quimiotipos são caracterizados por possuírem componentes principais específicos em sua composição, como quimiotipo IV: mirceno, V:  $\gamma$ -terpineno, VI: cânfora-1,8-cineol e VII: estragol.

Apesar de vários autores terem proposto uma classificação única para os quimiotipos do óleo essencial de *L. alba*, isso não é possível na prática devido aos diversos fatores que podem afetar a composição dos constituintes do óleo. (LINDE *et al.*, 2016)

Quadro 1 - Classificação dos Sete Quimiotipos

Quimiotipo	Componentes majoritários (marcadores)
Quimiotipo I	Citral, linalol e $\gamma$ -cariofileno
Quimiotipo II	tagetenona
Quimiotipo III	Limoneno em grandes quantidades e com quantidade variável de carvona ou cetonas monoterpênicas em vez de carvona
Quimiotipo IV	mirceno
Quimiotipo V	$\gamma$ -terpineno
Quimiotipo VI	cânfora-1,8-cineol
Quimiotipo VII	estragol

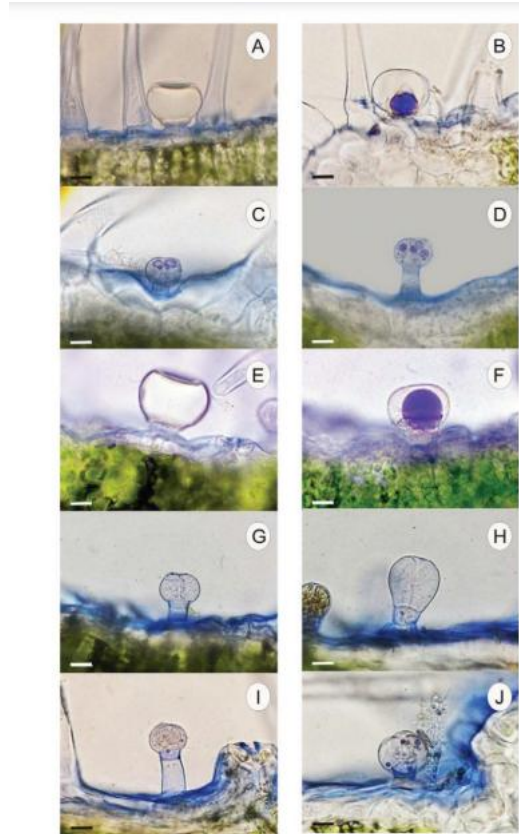
Fonte: Hennebelle *et al.* (2006)

No caso da *Lippia*, o óleo essencial está localizado em estruturas formadas pelo crescimento diferenciado de células da epiderme, que em sua forma mais complexa podem ser denominadas de tricomas glandulares. Essas estruturas podem ser constituídas por uma base ou pedicelo não-glandular, uni ou multicelular em cuja extremidade encontra-se uma cabeça uni ou multicelular onde se localiza o óleo ou substâncias químicas (CASTRO; GAVILANES, 2000). Na Figura 1 são apresentados os tricomas glandulares de *L. alba*.

Em *L. alba* foram identificados tricomas do tipo subséssil, que possuem as células intermediárias mais curtas que as células da cabeça (TAVARES, 2003). Os tricomas glandulares são mais numerosos na face abaxial da folha e são recobertos pelos tricomas tectores (CASTRO, 2001).



Figura 1 - Tricomas glandulares de *Lippia alba*



**Figura 2.** Tricomas secretores dos morfotipos de *Lippia alba* mostrando: A e B (tipo I), C (tipo II) e D (tipo III) tricomas de cidreira; e E e F (tipo I), G (tipo II), H (tipo IV), I (tipo V) e J (tipo VI) tricomas de melissa. As áreas de cor azul indicam as localizações das gotículas de óleo essencial de acordo com o ensaio do reagente NADI (barras = 10  $\mu$ m).

Fonte: JEZLER *et al.* (2012)

Assim, segundo Jezler *et al.* (2012) no estudo comparativo realizado é destacado as diferenças entre dois morfotipos de *L. alba* importantes na medicina tradicional brasileira. Apesar de suas semelhanças anatômicas, as variantes cidreira e melissa diferem quanto ao tamanho da planta, área foliar, número de camadas no parênquima paliçádico e tipos de tricomas (Figura 1). Esses dois morfotipos também constituem quimiotipos diferentes, pois a cidreira produz um óleo essencial que contém principalmente citral, enquanto o óleo de melissa é rico em citral, limoneno e carvona (Quadro 2).

Quadro 2 - Comparação achados anatômicos e químicos segundo Jezler *et al.* (2012)

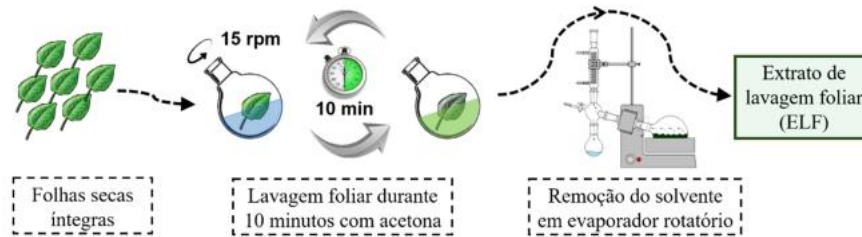
<b>Morfotipo</b>	<b>Cidreira</b>	<b>Melissa</b>
Área foliar (cm <sup>2</sup> )	17,31±4,21	7,32±2,01
Altura	1,80m, caules e ramos eretos	1,60m, caules e ramos prostrados
Tipos de tricomas glandulares	Grande cabeça secretora unicelular, colarinho presente, haste curta	Grande cabeça secretora unicelular, colarinho presente, haste curta
Tipos de tricomas glandulares	Cabeça secretora bicelular, colarinho presente, haste unicelular curta	Cabeça secretora bicelular, colarinho presente, haste unicelular curta
Tipos de tricomas glandulares	Cabeça secretora bicelular pequena, colarinho presente, pedúnculo longo	Cabeça secretora bicelular em forma de bulbo, haste curta
Tipos de tricomas glandulares		Cabeça secretora unicelular, colarinho presente, haste longa
Tipos de tricomas glandulares		Grande cabeça secretora tricelular, colarinho presente, haste curta
Número camadas parênquima paliçádico	bisseriado	unisseriado
Tipo Tricoma	Tricomas tectores simples	Tricomas tectores simples
Quantidade de óleo essencial	0,34% de peso seco	0,46% de peso seco
Quimiotipos	Citral	Citral-limoneno-carvona

Fonte: JEZLER *et al.* (2012).

Ao realizar a lavagem foliar de forma adequada, é possível liberar e coletar esses compostos diretamente das folhas, evitando a necessidade de técnicas mais complexas e dispendiosas, como a extração por solventes ou destilação. A lavagem foliar permite que os tricomas sejam removidos das folhas e que os compostos presentes neles sejam solubilizados.

Nesse âmbito, a técnica de lavagem foliar apresentada na Figura 2 tem se mostrado um método eficaz para a extração do conteúdo dos tricomas glandulares das folhas de espécies vegetais (SILVA, 2019).

Figura 2 - Procedimento extrativo pela técnica de lavagem foliar



Fonte: Silva (2019).

Considerando os diferentes quimiotipos previamente descritos para a espécie *Lippia alba*, o presente trabalho de conclusão de curso teve como objetivo comparar o perfil químico do óleo essencial de quatro espécimes de *L. alba* que possuem referenciais olfativos distintos, coletados no Horto Didático de Plantas Medicinais do Hospital Universitário HU/CCS (HORTO- HU/CCS), da Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC, Florianópolis, Brasil, 27°35'50.3"S 48°31'01.3"O). e no Porto da Lagoa, município de Florianópolis - SC, utilizando as técnicas de lavagem foliar, infusão das folhas com posterior caracterização por cromatografia a gás acoplada a espectrometria de massas (CG-EM) e *headspace*.

## 2 OBJETIVOS

### 2.1 OBJETIVO GERAL

Comparar o perfil químico dos extratos obtidos das folhas de *Lippia alba* (Mill.) N. E. Brown por lavagem foliar e infusão (chá) por cromatografia a gás acoplada a espectrômetro de massas (CG-EM) e *headspace* (HS).

#### 2.1.1 Objetivos Específicos

- a) Realizar a coleta de diferentes espécimes de *Lippia alba*, com referenciais olfativos distintos
- b) Confirmar a identificação botânica dos indivíduos coletados,
- c) Obter extrato das folhas por lavagem foliar;
- d) Obter extrato das folhas por infusão (conforme uso popular) com posterior extração em fase sólida reversa (SPE-C18);
- e) Caracterizar quimicamente as folhas secas por cromatografia a gás utilizando injeção líquida e *headspace*;
- f) Comparar o perfil químico observado com a literatura;

### 3 JUSTIFICATIVA

Dentre as plantas medicinais brasileiras, a espécie *Lippia alba* é muito utilizada na medicina popular, motivo porque deve ser estudada nos aspectos: fitoquímicos (na identificação de quimiotipos), farmacológicos e clínicos e também na indústria de cosméticos, com objetivo de obter informações de eficácia e segurança de uso para a comunidade e também no âmbito da pesquisa científica (LORENZI; MATOS, 2002).

*L. alba* é uma planta pouco estudada quanto à variabilidade química dos seus óleos essenciais, possíveis quimiotipos. Essa diversificação de componentes do óleo essencial dá origem a várias utilizações na medicina popular e na fitoterapia. Suas folhas possuem diferenças em aromas, propriedades antifúngicas e propriedades antibacterianas, contra bactérias Gram positivas, que causam infecções respiratórias (ALEA *et al.*, 1996; MATOS, 1996; SOARES, 2001; PESSINI *et al.*, 2003).

Dentre os componentes do óleo essencial da *L. alba*, o linalol tem se destacado pelo seu rendimento expressivo e sua ampla utilização pela indústria de aromatizantes, cosméticos e perfumes (EHLERT, 2003), além de ações inseticidas, anti-inflamatórias e anti-sépticas (SIMÕES; SPITZER, 2003).

Portanto, devido aos diferentes quimiotipos descritos na literatura (previamente discutidos na introdução) para *L. alba*, por sua constante utilização na medicina popular e pelo relato de utilização desta espécie pela comunidade que utiliza a estrutura do Horto de plantas medicinais da UFSC (comunidade em geral, pacientes do ambulatório do hospital universitário, funcionários e alunos da universidade) observadas pelo médico César Paulo Simionato (médico clínico geral, acupunturista, Professor e fundador do Horto de plantas medicinais da UFSC), faz-se desta a justificativa esta pesquisa.

## 4 MATERIAIS E MÉTODOS

### 4.1 MATERIAL VEGETAL

Foi feita a coleta do material vegetal para identificação das espécies.

#### 4.1.1 Coleta e identificação das espécies

O material vegetal foi coletado no Horto Didático de Plantas Medicinais do Hospital Universitário HU/CCS (HORTO- HU/CCS), da Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC, Florianópolis, Brasil, 27°35'50.3"S 48°31'01.3"O). (Figura 3) e no Porto da Lagoa da Conceição no dia 24 de Novembro de 2022. Para este estudo foram coletadas somente as folhas de cada um dos indivíduos, manejadas com cuidado a fim de evitar rasuras, sendo secas à temperatura ambiente e ao abrigo de luz.

Figura 3 - Dia da coleta do material vegetal



Fonte: o autor.

Ainda, feito o depósito de exsicata (Figura 4) no Herbário Flor da UFSC, no Departamento de Botânica do Centro de Ciências Biológicas,

no Campus Universitário Reitor João David Ferreira Lima, localizado no bairro Trindade de Florianópolis, SC / Brasil, e a identidade botânica foi confirmada com auxílio da especialista Juliana de Paula Souza Curadora da seção de Plantas do Herbário.

Figura 4 - Voucher ilustrativo de *L. alba* (subtipo melissa)



Fonte: o autor.

## 4.2 PROCESSO EXTRATIVO PARA *LIPPIA ALBA*

### 4.2.1 LAVAGEM FOLIAR

A técnica de extração por lavagem foliar (Figura 5) vem sendo utilizada para a extração do conteúdo glandular (tricomas glandulares) de espécies vegetais. Esta técnica permite que o solvente orgânico entre em contato com a superfície da folha e conseqüentemente em contato com os tricomas glandulares, assim o solvente orgânico é passível de extrair as substâncias que se encontram dentro destes tricomas. Para esta técnica podem ser empregadas diferentes condições extrativas, como diferentes líquidos extratores e tempos de extração. De tal modo, a partir de

revisão de literatura optou-se por utilizar o método desenvolvido e padronizado por Silva (2019) para ser utilizado no presente estudo.

Para o preparo dos extratos de lavagem foliar utilizou-se as folhas secas e íntegras de *L. alba* usando acetona com as proporções de 1:50 (m/v), respectivamente para droga vegetal e solvente, durante 10 minutos.

Figura 5 - Lavagem foliar.



Fonte: o autor.

A extração ocorreu em sistema rotativo adaptado de evaporador rotatório em temperatura ambiente. Posteriormente o extrato foi filtrado e seco em evaporador rotatório sob pressão reduzida e temperatura ambiente (SILVA, 2019).

#### **4.2.2 INFUSÃO (CHÁ)**

O chá (infusão) foi preparado conforme uso popular (1 colher (sopa) de folhas picadas para 1 xícara de água, jogar a água quente sobre as folhas picadas, tampar, repousar por 10 minutos, coar e servir) relatado pelo médico clínico geral César P. Simionato que atende a comunidade do ambulatório do Hospital Universitário da UFSC e as demandas do Horto medicinal da mesma universidade.

Para avaliar a composição química do chá, este extrato aquoso foi adsorvido em cartucho de Extração em Fase Sólida (SPE) (Figura 6) utilizando fase reversa C-18.



O propósito principal da SPE é isolar e pré-concentrar compostos de interesse, removendo interferentes e componentes indesejados da amostra. Durante a passagem da amostra pelo cartucho SPE, os compostos alvo interagem com o material adsorvente sólido, enquanto outros componentes da amostra passam pelo cartucho sem serem retidos. Em seguida, os compostos de interesse são eluídos do cartucho com um solvente adequado, resultando em uma fração concentrada e purificada que pode ser posteriormente analisada.

Figura 6 - Extração fase sólida utilizando fase reversa C-18



Fonte: O autor.

Como eluente foi utilizado acetonitrila, a fim de extrair os componentes orgânicos do chá para posterior análise por Cromatografia a Gás (CG). Assim, foi feita a lavagem com acetonitrila antes no cartucho e após a passagem da amostra.

#### 4.3 CARACTERIZAÇÃO DOS EXTRATOS POR CROMATOGRAFIA A GÁS (CG-EM)

Os extratos obtidos (lavagem foliar e infusão) foram analisados através da técnica de Cromatografia a gás acoplada a espectrometria de massas (CG-EM). Utilizado um cromatógrafo a gás Perkin-Elmer Clarus 680 com coluna capilar de sílica apolar Elite 5mS (coluna com 5% de difenil-polisiloxano e 95% de dimetil-polisiloxano e dimensões de 30 m x 0.25 mm, espessura de 0.25  $\mu$ m) acoplado a um espectrômetro de massas Perkin-Elmer Clarus SQ8. As condições analíticas foram desenvolvidas a partir do método proposto pela literatura Adams (2007). A identificação dos compostos foi realizada com o auxílio da biblioteca NIST-MS (2011).

#### 4.4 HEADSPACE

Para avaliar os compostos orgânicos voláteis presentes nas folhas coletadas, foi utilizado *HeadSpace* que consiste em um sistema para a preparação de amostras para cromatografia a gás (GC) que extrai as substâncias voláteis das amostras e os injeta automaticamente no CG-MS.

Para a caracterização dos compostos voláteis e consequente comparação dos mesmos, as folhas frescas de *Lippia alba* foram coletadas em triplicata e analisadas de forma independente.

As amostras foram avaliadas utilizando amostrador tipo *Headspace* 40/110 Trap sampler Perkin-Elmer sob as condições: temp. forno 120 °C por 10', 30 psi de pressão por 2', temp. da agulha de 120 °C. O aquecimento da amostra gerou uma pressão, o qual foi injetado diretamente para a coluna capilar do CG. Foram utilizados vials para *headspace* com septo de PTFE (politetrafluoroetileno).

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 5.1 COLETA E IDENTIFICAÇÃO DA ESPÉCIE

O material vegetal foi coletado e feito o depósito de exsicata no Herbário Flor da UFSC e a identidade botânica foi confirmada com auxílio da especialista Juliana de Paula Souza Curadora da seção de Plantas do Herbário. Ela entrou em contato com o especialista em *L. alba*, Dr. Pedro Cardoso, que confirmou a identidade dos espécimes. Esta espécie por ser muito variável e não só morfologicamente, há relatos sobre a existência de vários citotipos (variações na estrutura e número de cromossomos nas células da planta). Isto pode ocorrer como resultado de rearranjos cromossômicos que ocorrem naturalmente nas populações da planta. Essas alterações podem influenciar as características químicas da planta, por exemplo, podendo ter implicações nas propriedades medicinais e aromáticas.

Assim, a química e os cromossomos dessa espécie amplamente distribuída podem ser diferentes, mas as diferenças podem não se expressar na morfologia.

### 5.2 LAVAGEM FOLIAR E ANÁLISE NO CG

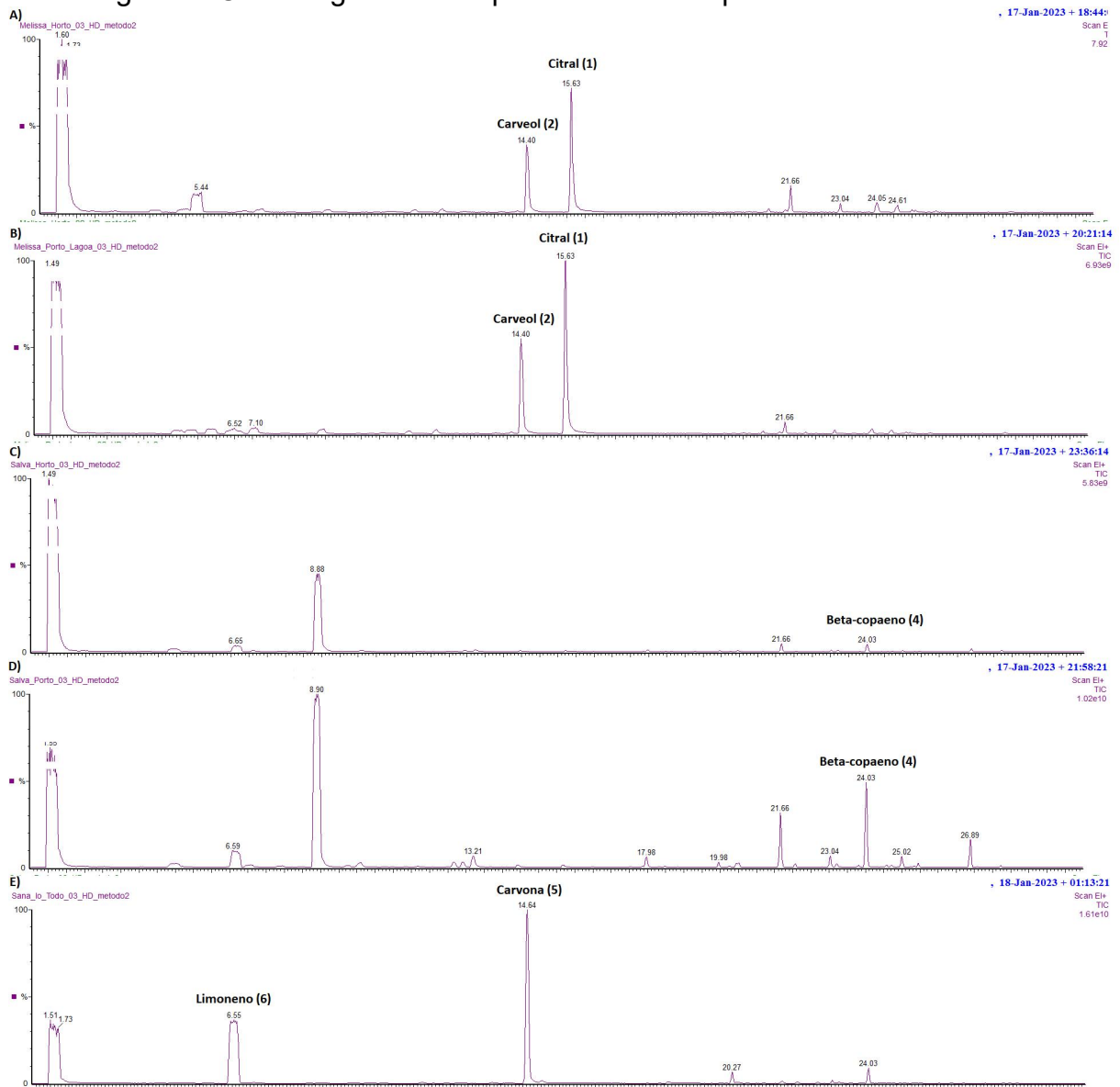
Inicialmente foi utilizada a metodologia extrativa de lavagem foliar porém não demonstrou ser eficiente provavelmente pela baixa concentração dos compostos devido a característica dos analitos extraídos. Assim, nas amostras analisadas não foi observado presença de sinais nos cromatogramas optou-se por realizar a análise química por *headspace*.

### 5.3 ANÁLISE FOLHA HEADSPACE

As folhas das cinco amostras coletadas foram inseridas em vials de *headspace* e analisadas por CG-EM (Figura 7). O método analítico utilizando amostrador tipo *Headspace* conectado diretamente à coluna do cromatógrafo a gás tem sido empregado para a análise de amostras voláteis, incluindo material vegetal fresco ou seco. Esta técnica não necessita de uso de solventes orgânicos, contribuindo para a redução nos rejeitos ambientais, contudo, é um método que

demanda grande consumo de gás de arraste, aumentando o seu custo (FRANKENBERGER, 2022).

Figura 7- Cromatogramas comparativos obtidos por HS das folhas secas.



Fonte: dados da pesquisa, 2023. Nota: cromatograma A- amostra Melissa Horto, cromatograma B- amostra Melissa Porto, cromatograma C- amostra Salva Horto, cromatograma D- amostra Salva Porto, cromatograma E- amostra Sana-lo-todo

As análises das amostras das folhas *Melissa* Horto, *Melissa* Porto, *Salva* Horto, *Salva* Porto e *Sana-lo-Todo* (Figura 7) foram realizados por *headspace* e permitiu a identificação dos componentes por meio da comparação de seus tempos

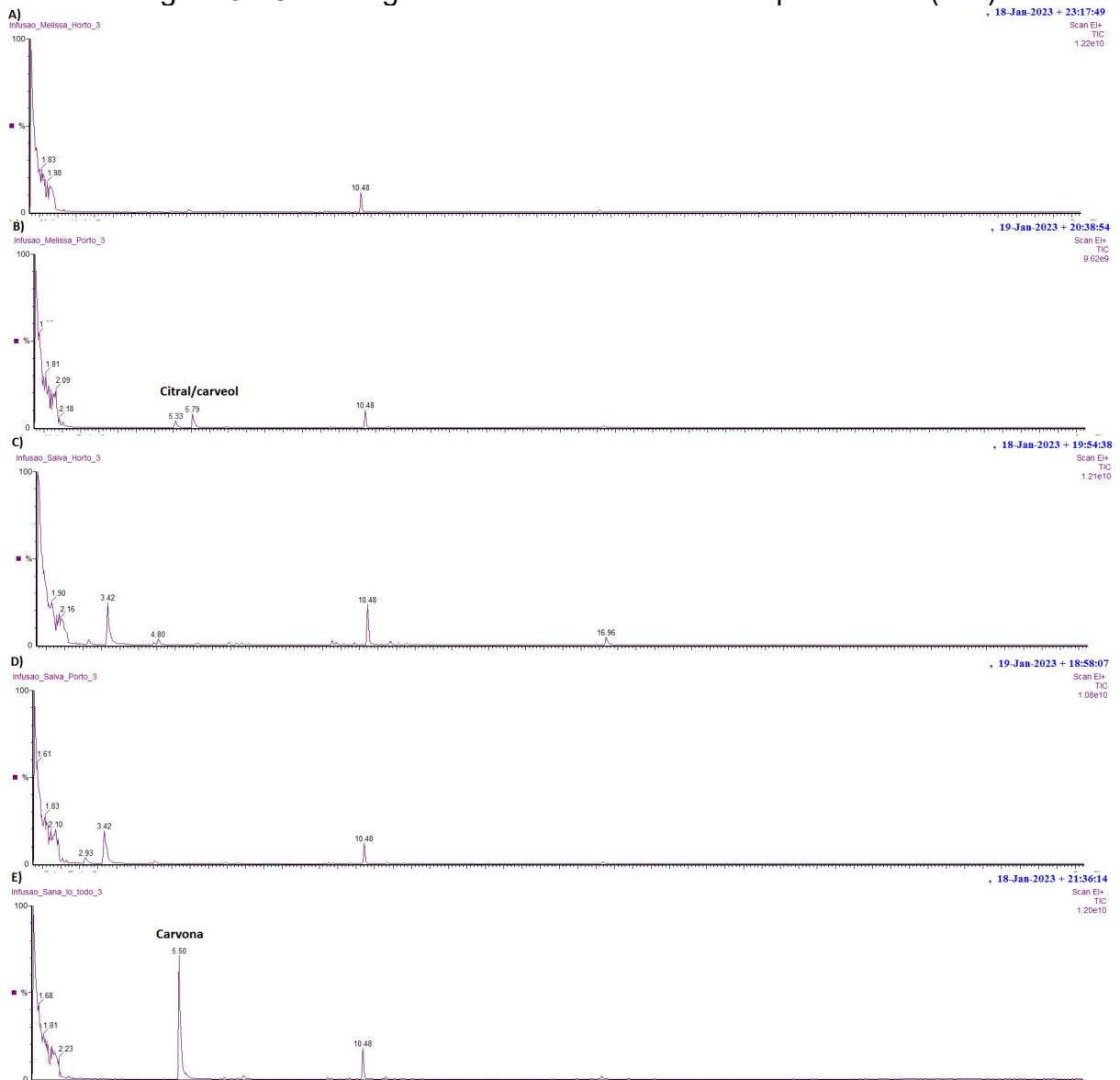
de retenção e perfil de fragmentação com dados disponíveis na biblioteca NIST. Foi realizado em triplicata as análises das amostras e utilizado o terceiro cromatograma obtido.

#### 5.4 INFUSÃO CHÁ

As análises dos quimiotipos presentes nos espécimes de *L. alba* foi realizada por CG-EM com comparação com a biblioteca NIST e literatura especializada e foi feita a extração em fase sólida devido as amostras aquosas não serem facilmente analisadas em CG.

Abaixo estão apresentados os cromatogramas das amostras obtidas por infusão (Figura 8).

Figura 8 - Cromatogramas das amostras obtidas por infusão (chá).



Fonte: dados da pesquisa, 2023. Nota: cromatograma A- amostra Melissa Horto, cromatograma B- amostra Melissa Porto, cromatograma C- amostra Salva Horto, cromatograma D- amostra Salva Porto, cromatograma E- amostra Sana-lo-todo

A partir dos cromatogramas apresentados na Figura 8 foi possível observar que em todos apareceu o contaminante *butylated hydroxytoluene* (BHT, antioxidante) (Tr 10.48 min.) conservante do solvente (acetonitrila). Isso pode ser devido a evaporação dos compostos no preparo da infusão (chá) e a maior concentração deste solvente.

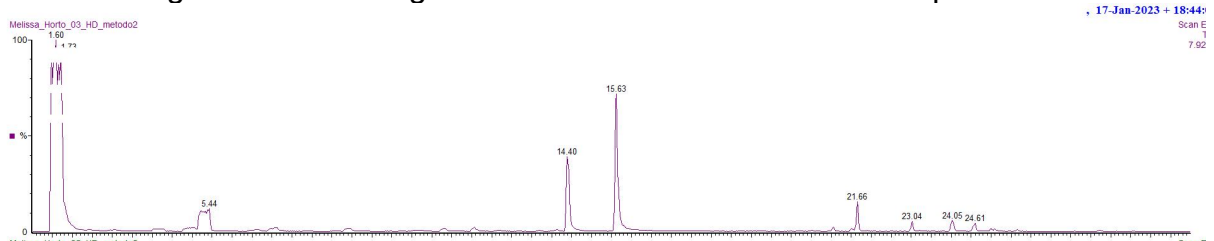
As infusões podem ser analisadas para a identificação dos seus compostos voláteis através da técnica em cromatografia a gás acoplada à espectrometro de

massas (CG-EM). Assim, os compostos são identificados através do respectivo espectro de massas, o qual pode ser comparado a uma biblioteca espectral onde os fragmentos são comparados aos espectros previamente identificados, sendo que o espectro representa como uma impressão digital de cada composto (FRANKENBERGER, 2022).

## 5.5 ANÁLISE HS E INFUSÃO CHÁ

Análise dos cromatogramas individuais.

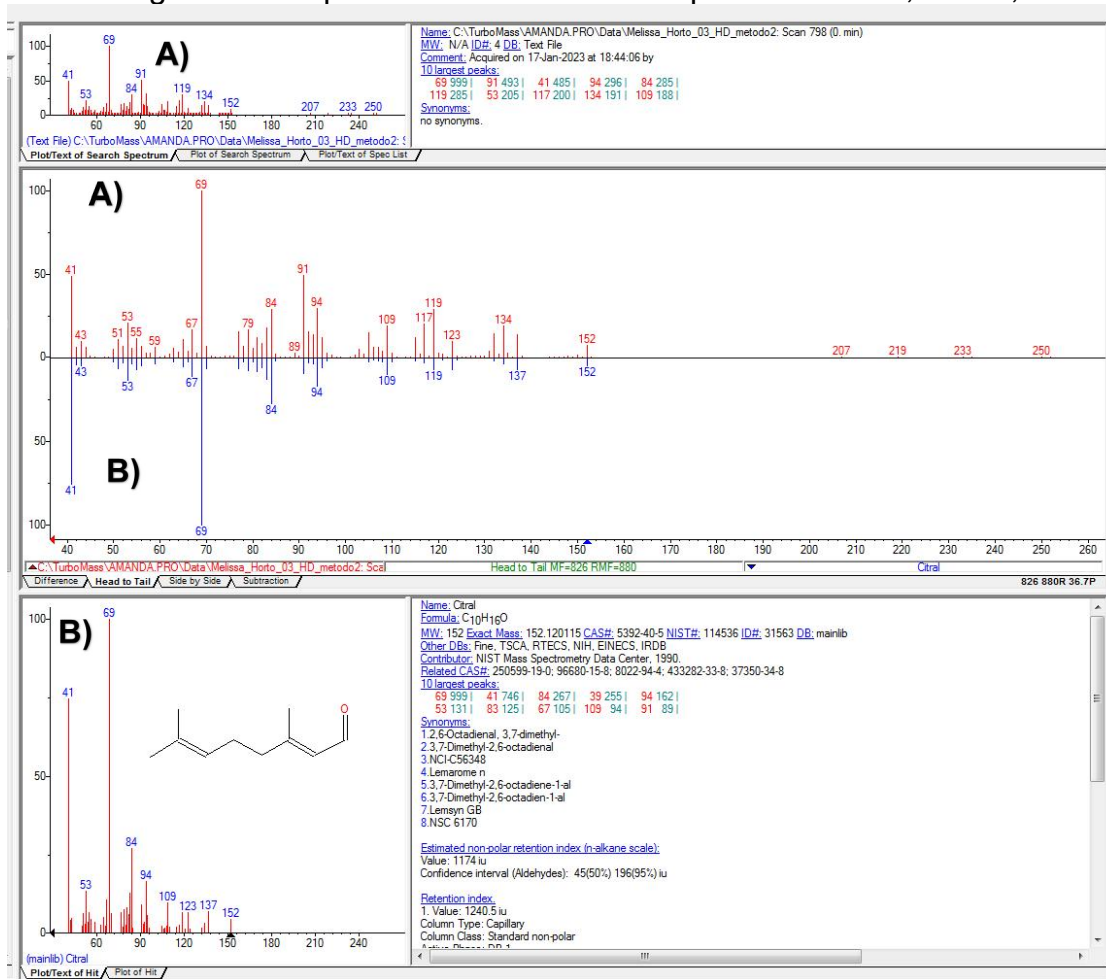
Figura 9 - Cromatograma da folha Melissa Horto obtida por HS



Fonte: dados da pesquisa, 2023.

O cromatograma obtido (Figura 9) a partir da folha revelou a presença do composto mais intenso com retenção de 15.63 minutos identificada como Citral (Figura 12) e em 14.4 minutos o Carveol através da comparação com dados fornecidos pela biblioteca NIST em comparação com o respectivo espectro de massa coletado (figura 10).

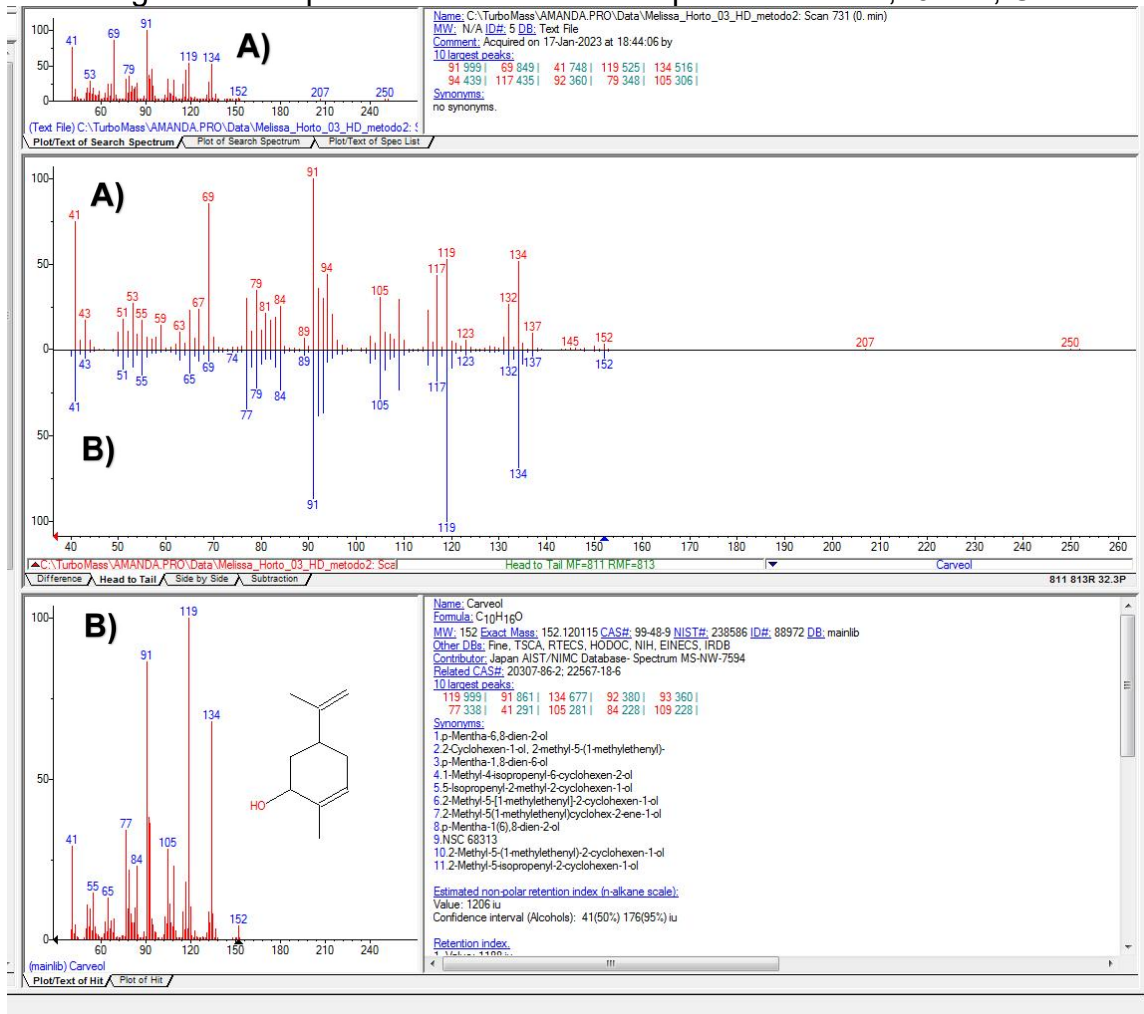
Figura 10 - Espectro de massas do composto em Tr 15,63 min, Citral



**A)** Espectro de massas do composto identificado; **B)** Espectro de massas e identificação da biblioteca NIST.



Figura 11 - Espectro de massas do composto em Tr 14,40 min, Carveol



**A)** Espectro de massas do composto identificado; **B)** Espectro de massas e identificação da biblioteca NIST.

O Citral um terpenoide, composto químico presente que apresenta aroma cítrico e é amplamente utilizado na indústria de alimentos como saborizante natural, além de possuir propriedades medicinais como as propriedades quimiopreventivas, bem documentadas por (López et al., 2011). dos terpenóides de *L. alba*, como carvona, geraniol, limoneno, citral e álcool perfílico.

Figura 12 - Estrutura química do composto Citral (1)

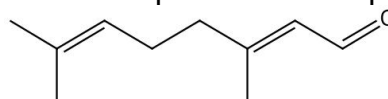
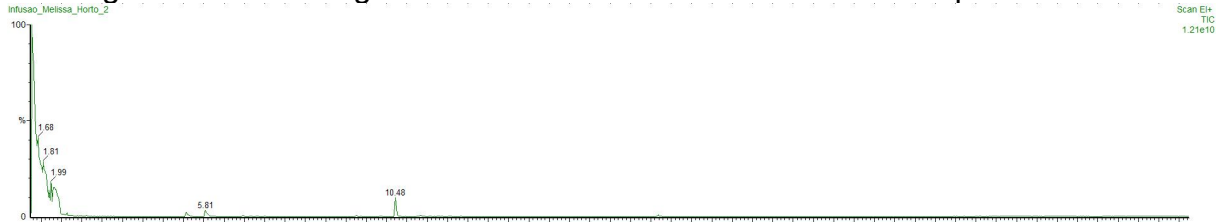


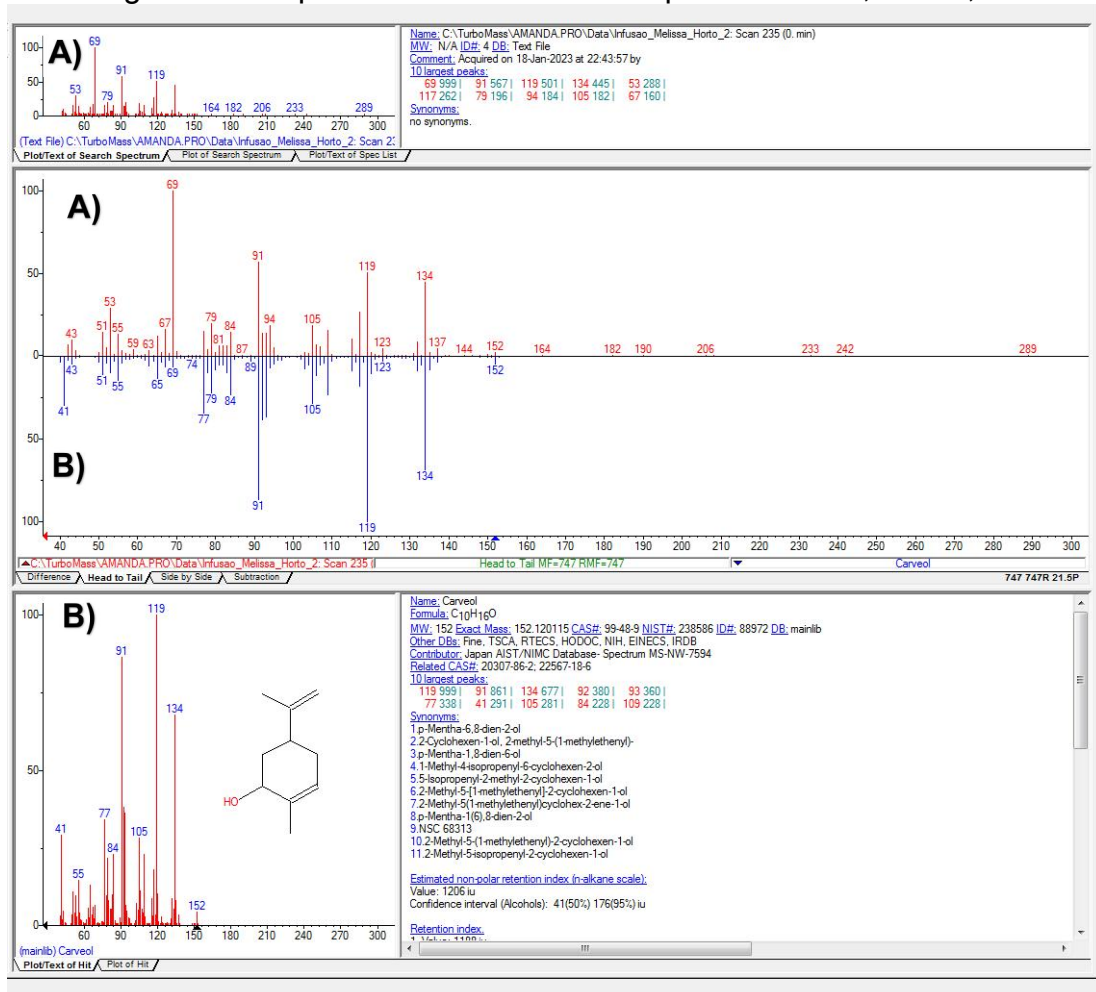
Figura 13- Cromatograma da infusão de Melissa Horto obtida por CG-EM



Fonte: dados da pesquisa, 2023.

Já no cromatograma (Figura 13) obtido a partir da infusão de chá revelou a presença do composto com retenção de 5.81 minutos identificada como Carveol (Figura 15) através da comparação com dados fornecidos pela biblioteca NIST em comparação com o respectivo espectro de massa coletado (Figura 14).

Figura 14 - Espectro de massas do composto em Tr 5,81 min, Carveol



**A)** Espectro de massas do composto identificado; **B)** Espectro de massas e identificação da biblioteca NIST.

O carveol é um monoterprenoide encontrado em várias plantas, incluindo algumas espécies de hortelã e alecrim. É um composto que possui um aroma fresco e pode apresentar propriedades terapêuticas e aromáticas.

As análises mostram a presença do composto volátil Citral e Carveol e na infusão Carveol.

Assim, a partir dos cromatogramas apresentados foi possível observar a presença de Carveol na análise de HS e da infusão.

Figura 15 - Estrutura química do composto Carveol (2)

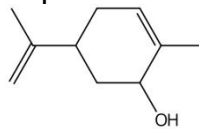
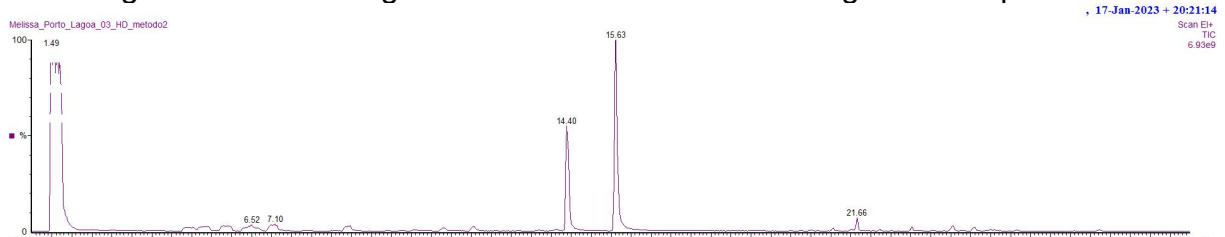


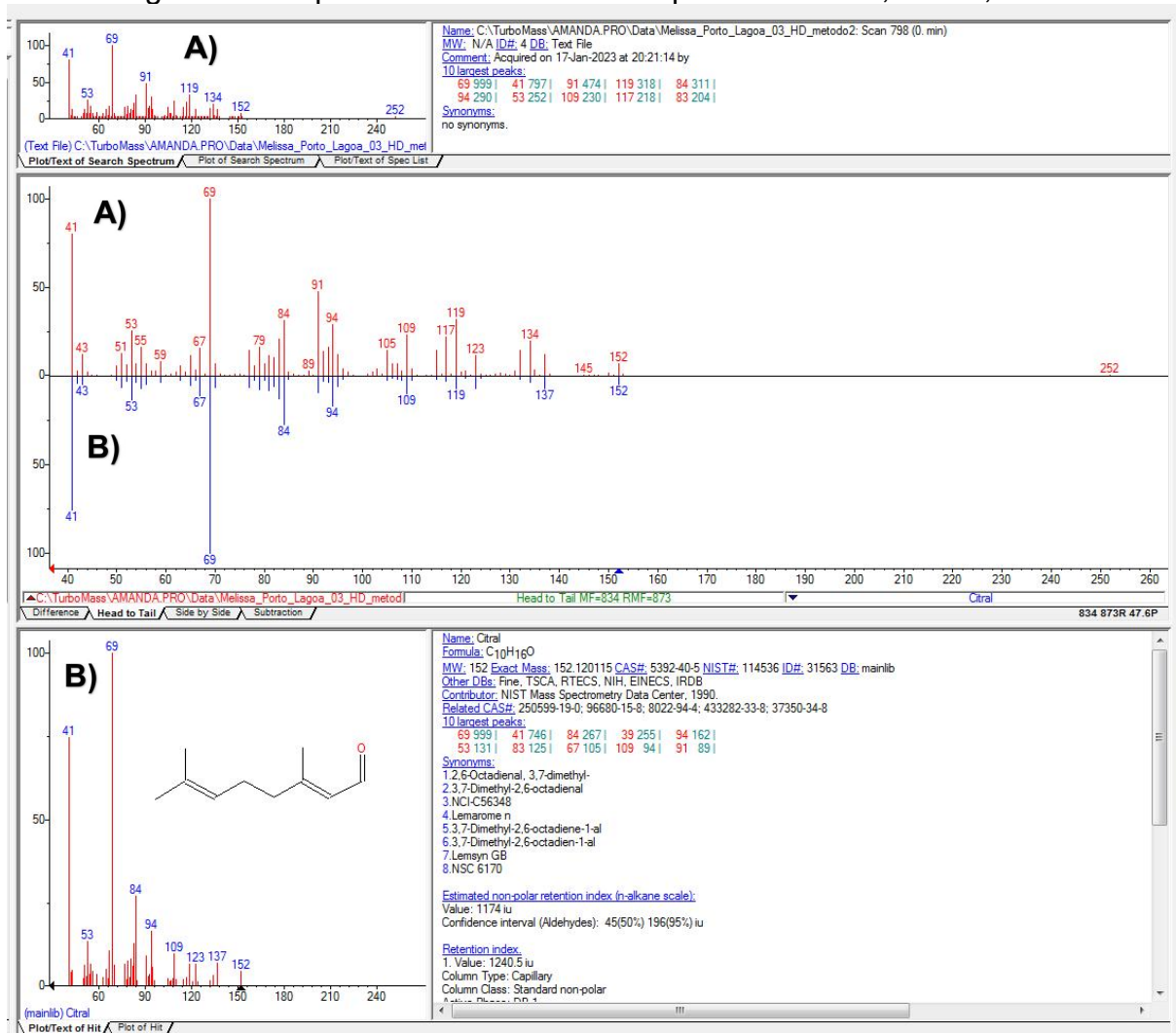
Figura 16 - Cromatograma da folha Melissa Porto Lagoa obtido por HS



Fonte: dados da pesquisa, 2023.

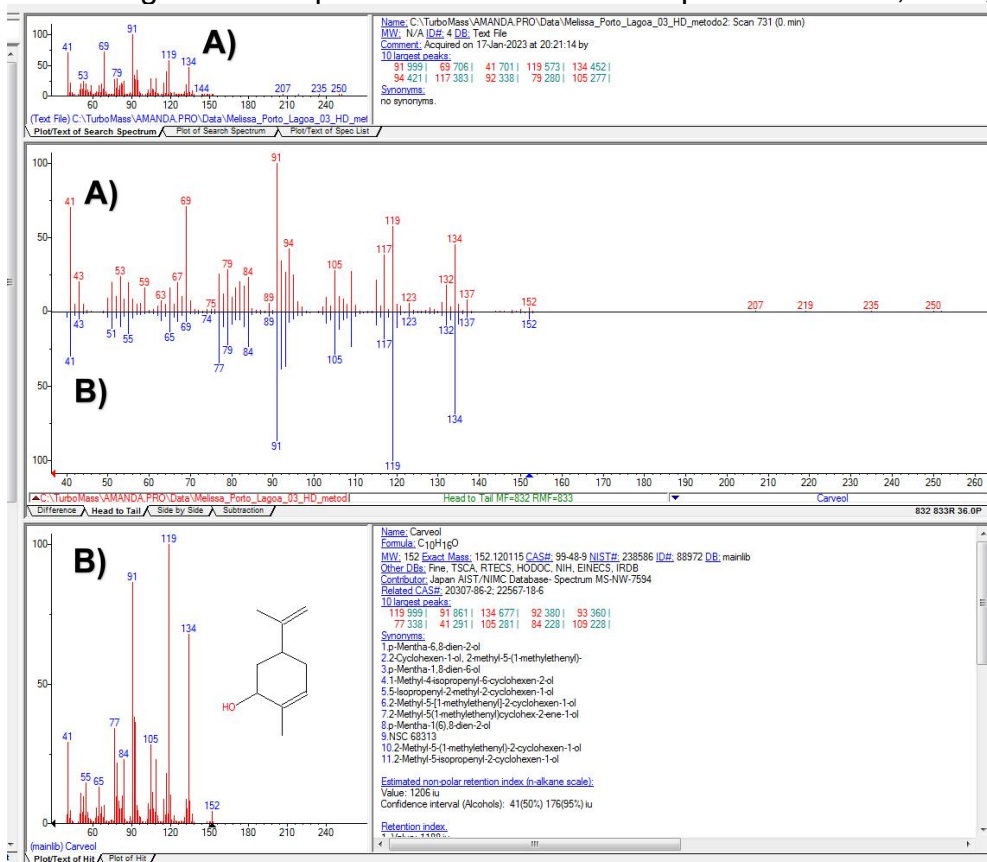
O cromatograma (Figura 16) obtido a partir da folha revelou a presença do composto com retenção de 15.63 minutos identificada como Citral e em 14.4 minutos o Carveol através da comparação com dados fornecidos pela biblioteca NIST em comparação com o respectivo espectro de massa coletado.

Figura 17 - Espectro de massas do composto em Tr 15,63 min, Citral



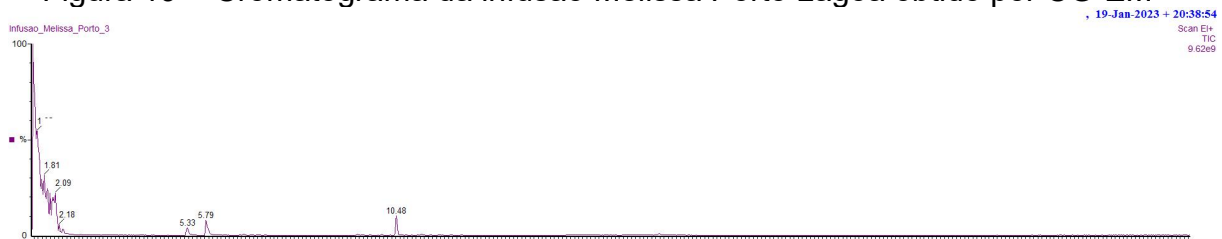
**A)** Espectro de massas do composto identificado; **B)** Espectro de massas e identificação da biblioteca NIST.

Figura 18 - Espectro de massas do composto em Tr 14,4 min, Carveol



**A)** Espectro de massas do composto identificado; **B)** Espectro de massas e identificação da biblioteca NIST.

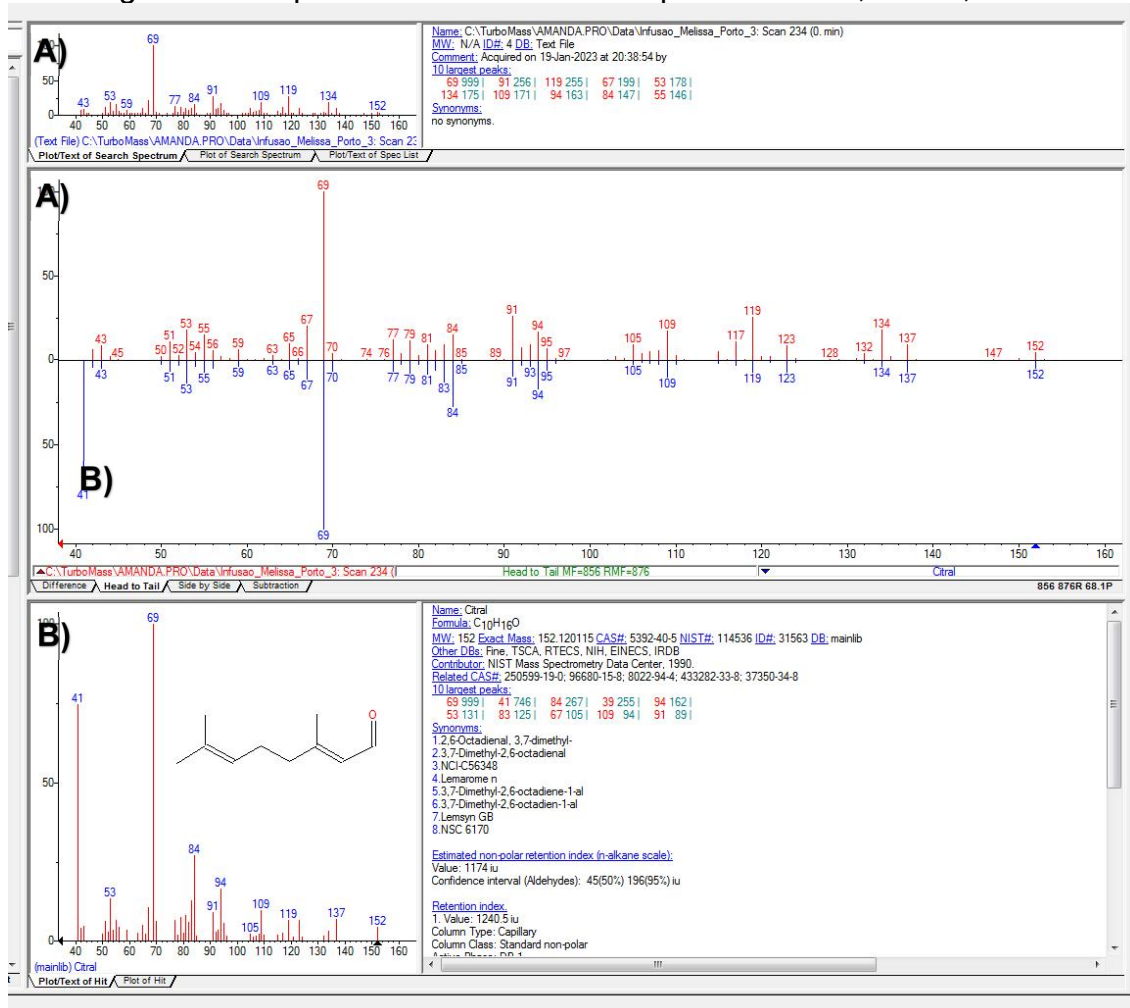
Figura 19 - Cromatograma da infusão Melissa Porto Lagoa obtido por CG-EM



Fonte: dados da pesquisa, 2023.

Já no cromatograma (Figura 19) obtido a partir da infusão de chá revelou a presença do composto com retenção de 5.79 minutos identificada como Citral através da comparação com dados fornecidos pela biblioteca NIST em comparação com o respectivo espectro de massa coletado.

Figura 20 - Espectro de massas do composto em Tr 5,79 min, Citral



**A)** Espectro de massas do composto identificado; **B)** Espectro de massas e identificação da biblioteca NIST.

A partir dos cromatogramas apresentados foi possível observar a presença de Citral na análise de HS e da infusão.

Figura 21- Cromatograma da folha Salva Horto obtida por HS

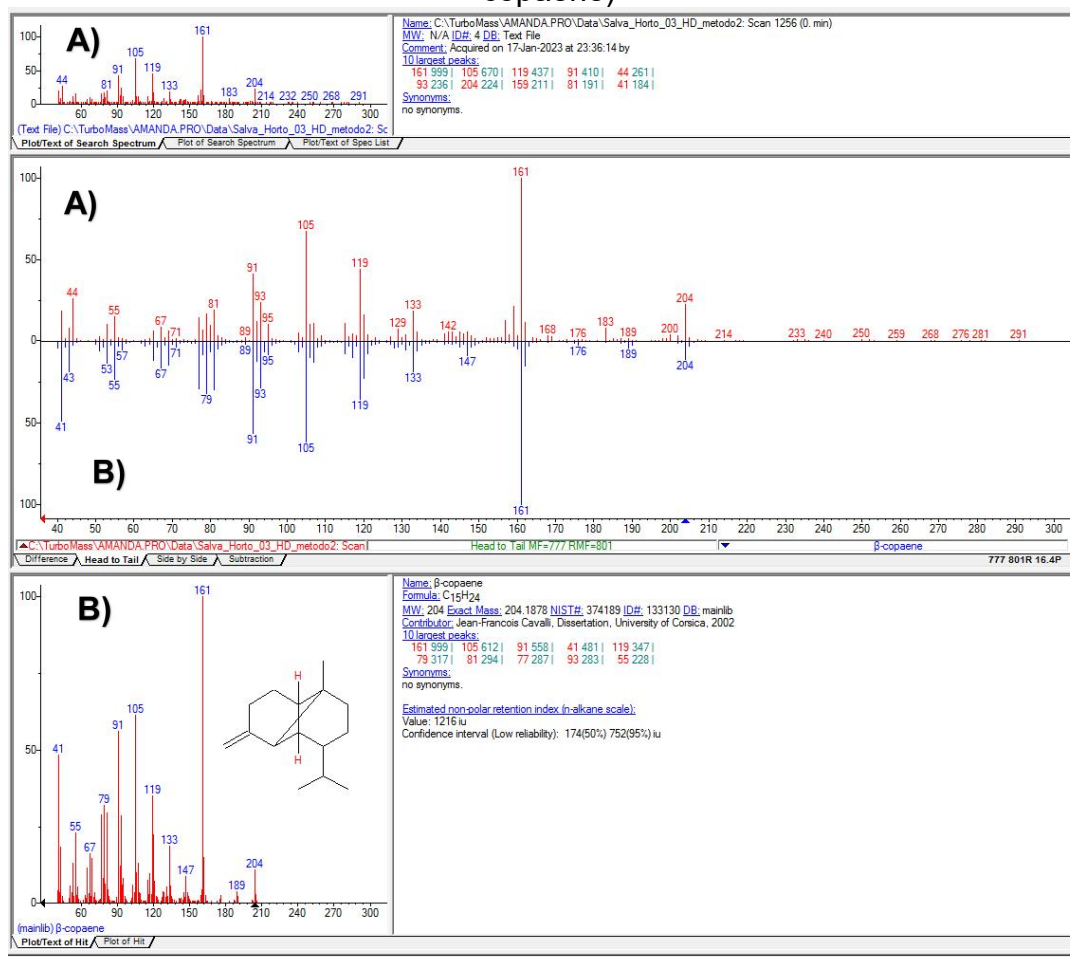


Fonte: dados da pesquisa, 2023.

O cromatograma obtido (Figura 21) a partir da folha revelou a presença do composto com retenção de 24.03 minutos identificada como beta-copaeno (B-copaene) através da comparação com dados fornecidos pela biblioteca NIST em comparação com o respectivo espectro de massa coletado.

Foi pensando que em 8.88 minutos o composto indentificado era o Geraniol, porém o sinal estava saturado e foi refeito o experimento utilizando o *Split* de 1:250 para reduzir a intensidade do sinal e poder determinar a identidade com mais clareza. Desta forma, foi determinado que o pico (em 8.59 minutos) é o linalol.

Figura 22 - Espectro de massas do composto em Tr 24,03 min, beta-copaeno (B-copaene)

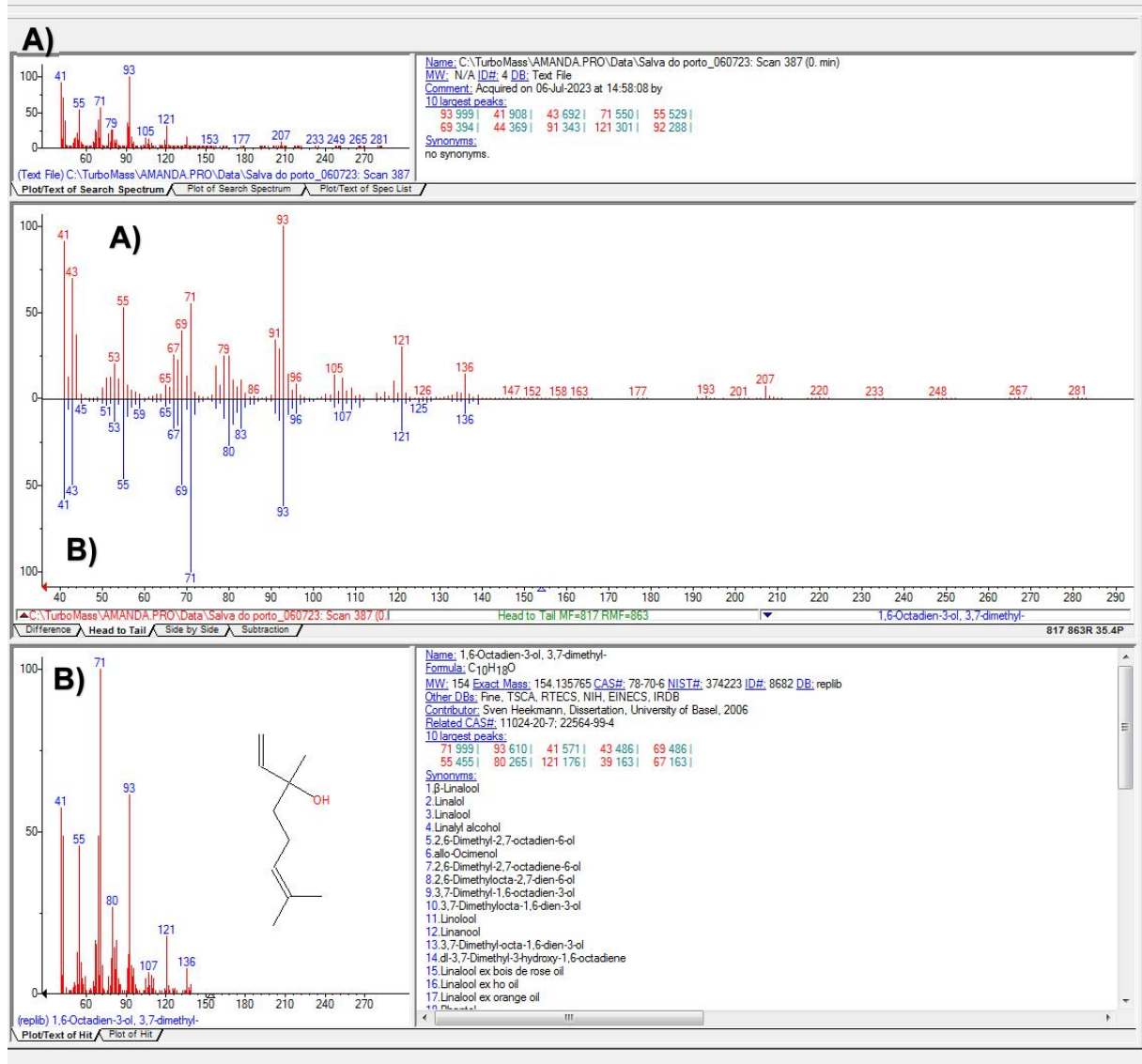


**A)** Espectro de massas do composto identificado; **B)** Espectro de massas e identificação da biblioteca NIST.

O beta-copaeno (B-copaene) é um sesquiterpenoide que pode ser encontrado no óleo essencial da *Lippia alba*. Essa substância é responsável por contribuir com as características aromáticas do óleo essencial, apresentando um aroma amadeirado e

terroso. É importante ressaltar que a presença e a concentração de B-copaeno no óleo essencial da *Lippia alba* podem variar de acordo com fatores como a região de cultivo, as condições de colheita e a técnica de extração utilizada.

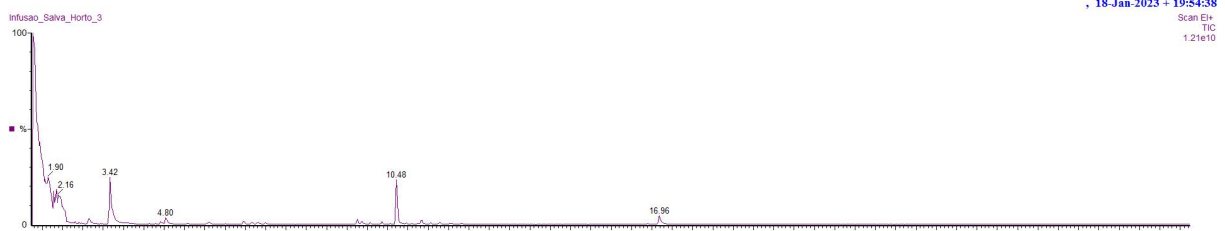
Figura 23 - Espectro de massas do composto em Tr 8,59 min, Linalol.



**A)** Espectro de massas do composto identificado; **B)** Espectro de massas e identificação da biblioteca NIST.



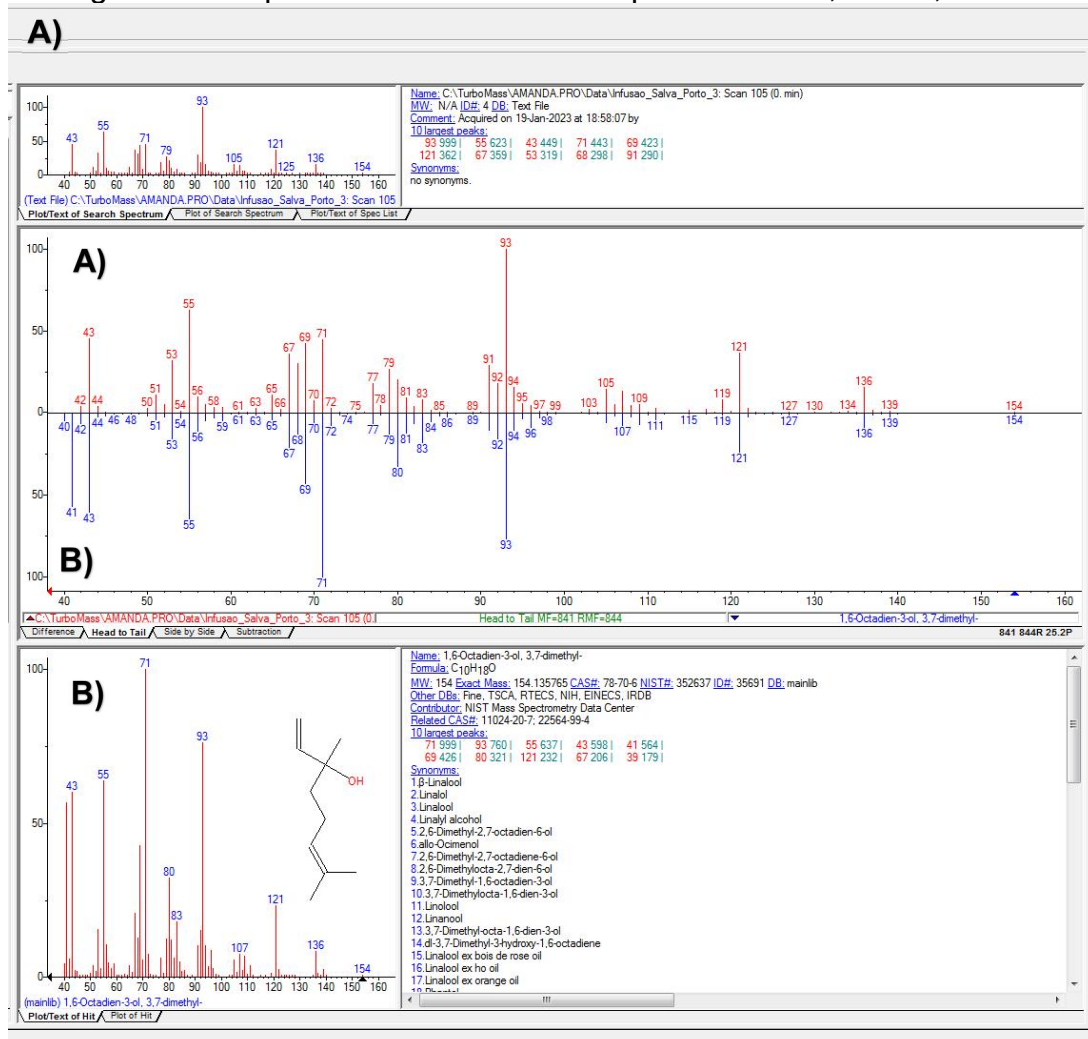
Figura 24 - Cromatograma da infusão Salva Horto obtida por CG-EM



Fonte: dados da pesquisa, 2023.

Já no cromatograma (Figura 24) obtido a partir da infusão de chá revelou a presença do composto com retenção de 3.42 minutos identificada como Linalol através da comparação com dados fornecidos pela biblioteca NIST em comparação com o respectivo espectro de massa coletado.

Figura 25 - Espectro de massas do composto em Tr 3,42 min, Linalol



**A)** Espectro de massas do composto identificado; **B)** Espectro de massas e identificação da biblioteca NIST.

As análises mostram a presença do composto volátil beta-copaeno e Linalol e na infusão Linalol.

Assim, a partir dos cromatogramas apresentados foi possível observar a presença de Linalol na análise de HS e da infusão.

Figura 26 - Estrutura química do composto Linalol

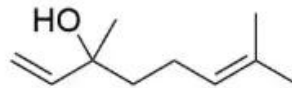
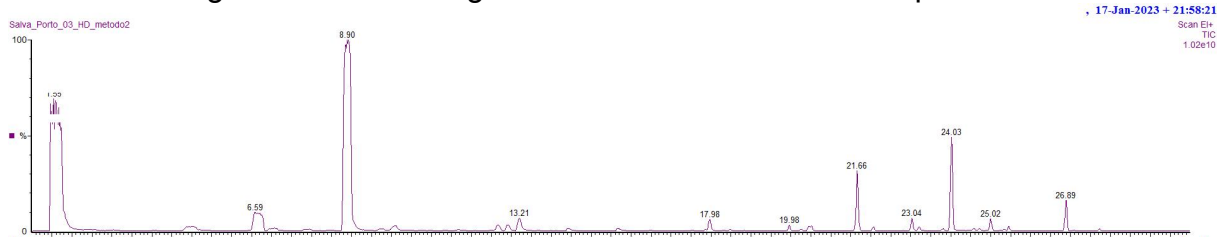


Figura 27 - Cromatograma folha Salva Porto obtido por HS

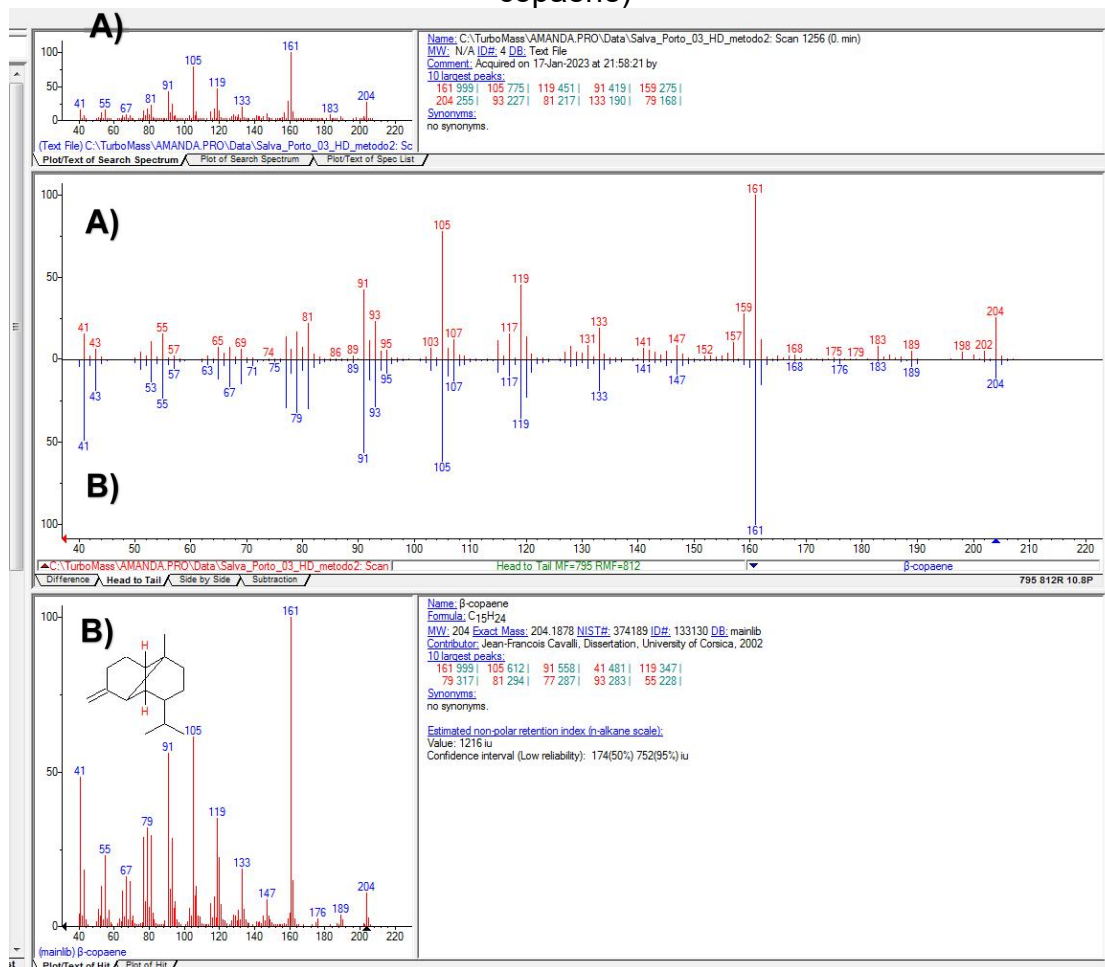


Fonte: dados da pesquisa, 2023.

O cromatograma (Figura 27) obtido a partir da folha revelou a presença do composto com retenção de 24.03 minutos identificada como beta-copaeno (B-copaene) (Figura 30) através da comparação com dados fornecidos pela biblioteca NIST em comparação com o respectivo espectro de massa coletado.

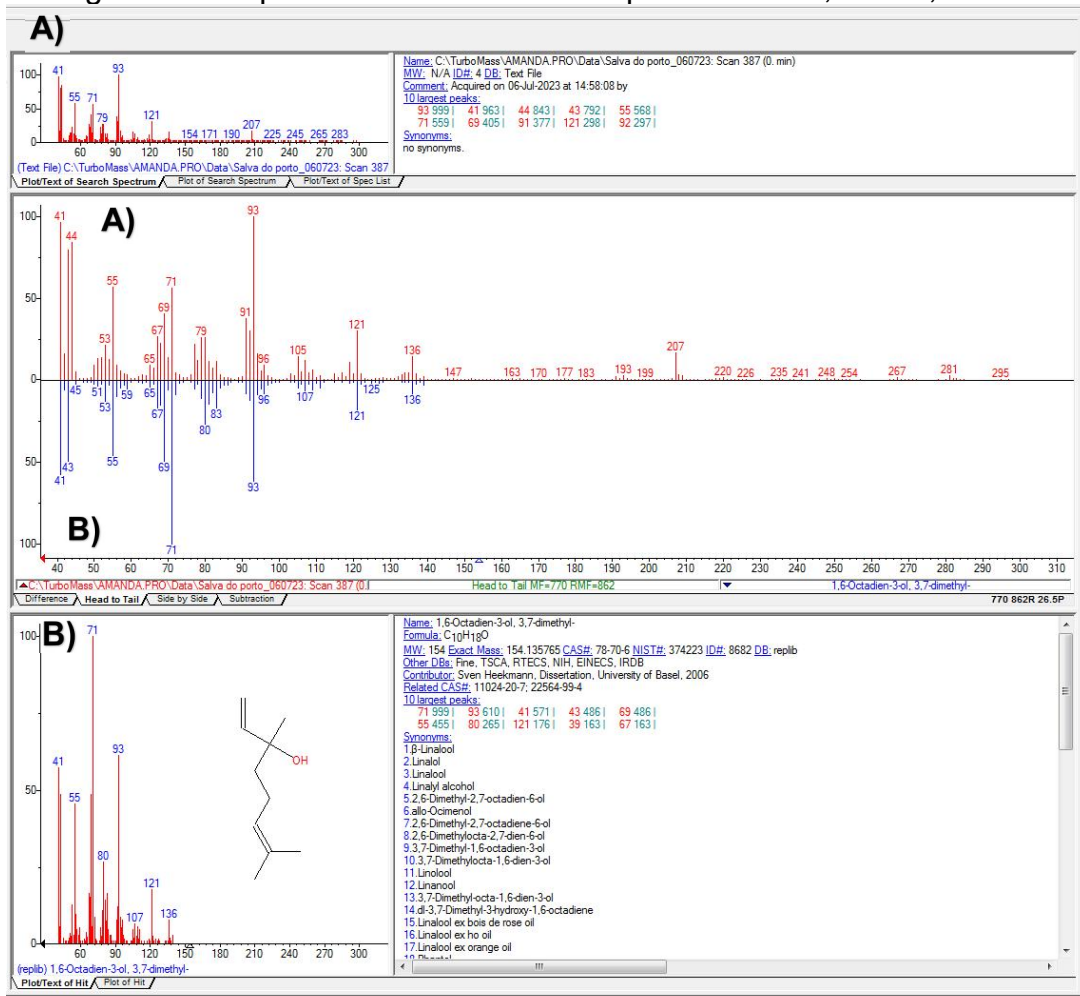
Foi pensando que em 8.9 minutos o composto indetificado era o Geraniol, porém o sinal estava saturado e foi refeito o experimento utilizando o *Split* de 1:250 para reduzir a intensidade do sinal e poder determinar a identidade com mais clareza. Desta forma, foi determinado que o pico (em 8.59 minutos) é o Linalol.

Figura 28 - Espectro de massas do composto em Tr 24,03 min, beta-copaeno (B-copaene)



**A)** Espectro de massas do composto identificado; **B)** Espectro de massas e identificação da biblioteca NIST.

Figura 29 - Espectro de massas do composto em Tr 8,59 min, Linalol



**A)** Espectro de massas do composto identificado; **B)** Espectro de massas e identificação da biblioteca NIST.

Figura 30 - Estrutura química do composto Beta-copaeno (4)

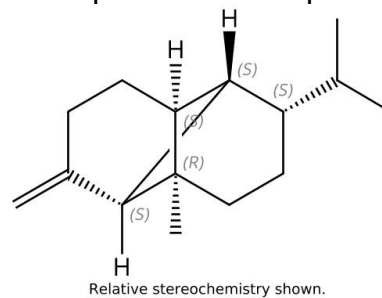
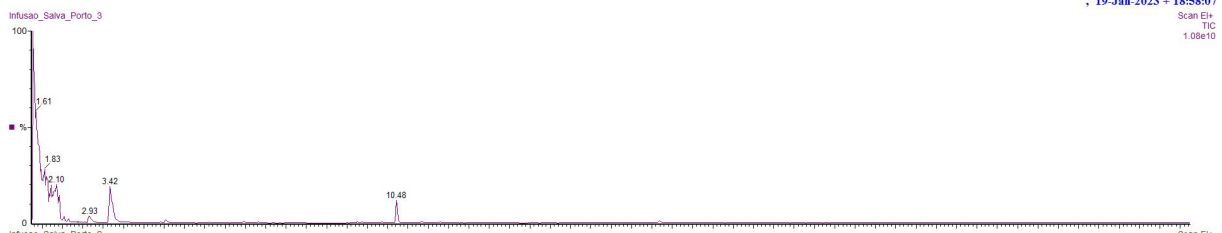


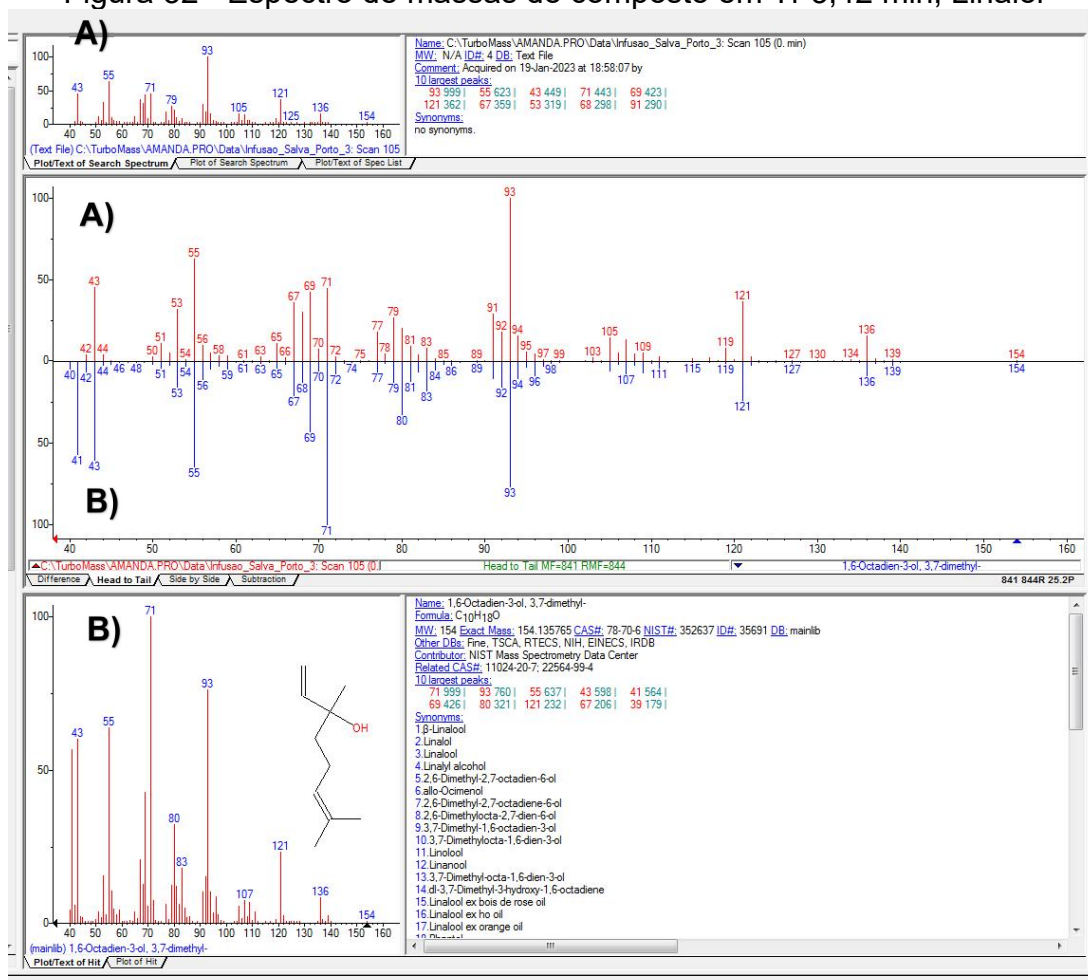
Figura 31 - Cromatograma infusão Salva Porto obtido por CG-EM



Fonte: dados da pesquisa, 2023.

Já no cromatograma obtido (Figura 31) a partir da infusão de chá revelou a presença do composto com retenção de 3.42 minutos identificada como Linalol através da comparação com dados fornecidos pela biblioteca NIST em comparação com o respectivo espectro de massa coletado.

Figura 32 - Espectro de massas do composto em Tr 3,42 min, Linalol

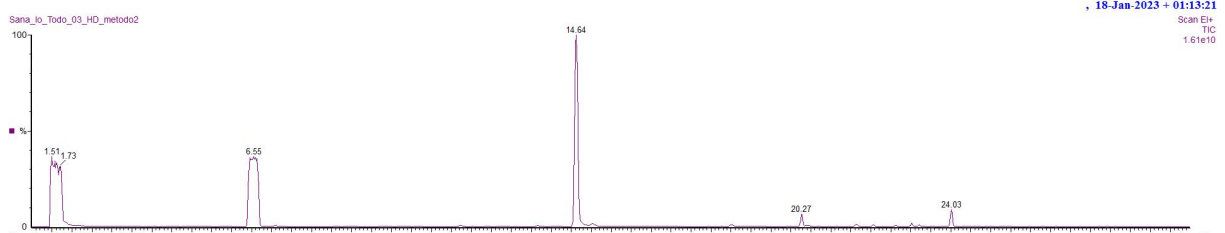


**A)** Espectro de massas do composto identificado; **B)** Espectro de massas e identificação da biblioteca NIST.

As análises mostram a presença do composto volátil beta-copaeno e Linalol e na infusão Linalol.

Assim, a partir dos cromatogramas apresentados foi possível observar a presença de Linalol na análise de HS e da infusão.

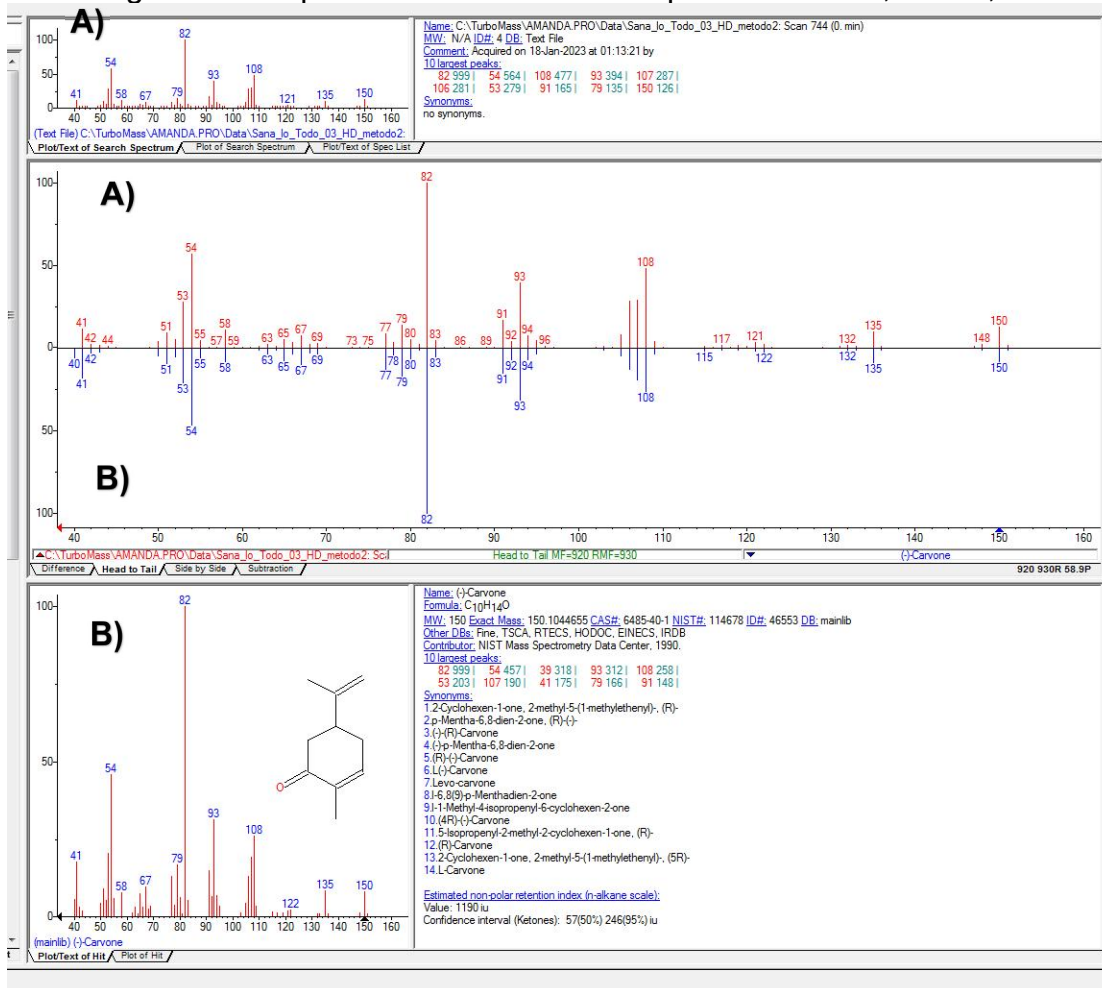
Figura 33 - Cromatograma folha Sana-lo-Todo obtido por HS



Fonte: dados da pesquisa, 2023.

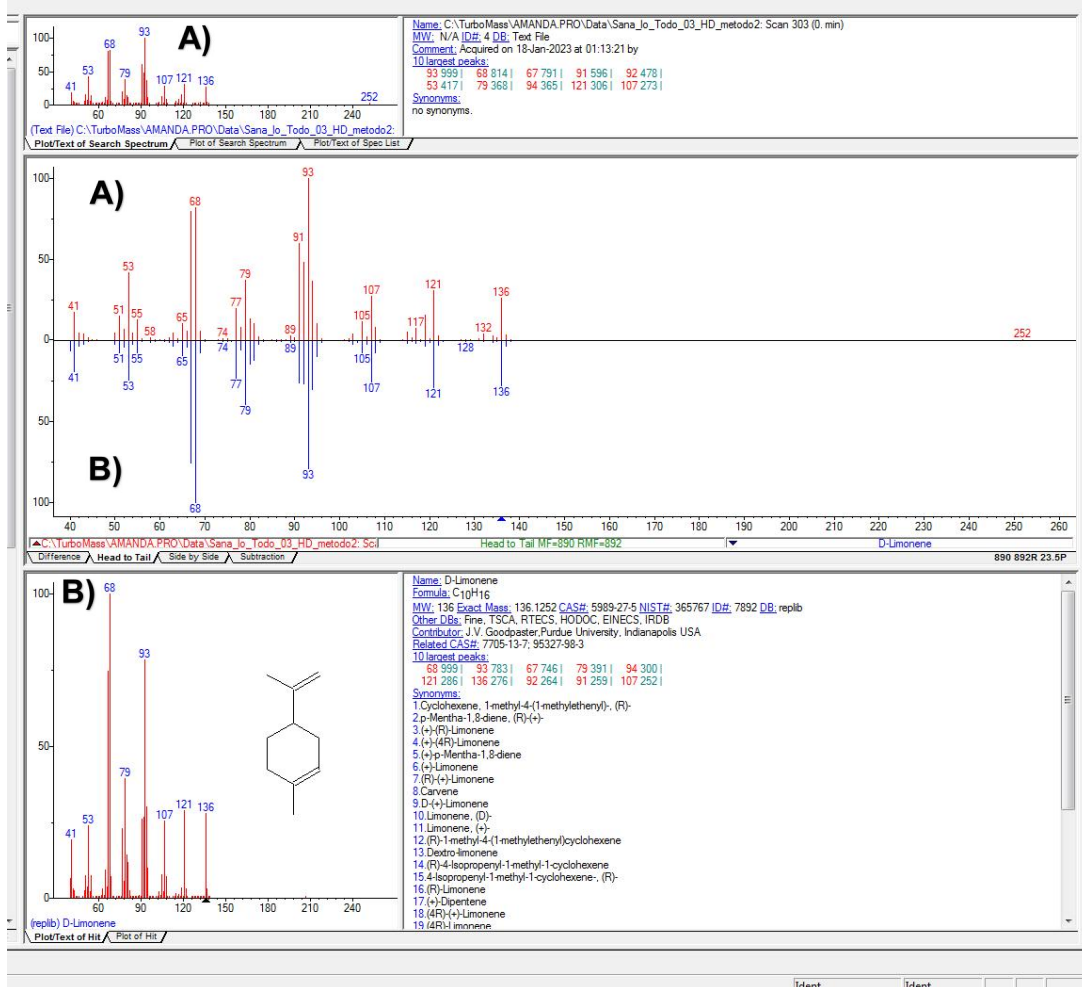
O cromatograma obtido (Figura 33) a partir da folha revelou a presença do composto com retenção de 14.64 minutos identificada como Carvona e 6.55 minutos Limoneno através da comparação com dados fornecidos pela biblioteca NIST em comparação com o respectivo espectro de massa coletado.

Figura 34 - Espectro de massas do composto em Tr 14,64 min, Carvona



**A)** Espectro de massas do composto identificado; **B)** Espectro de massas e identificação da biblioteca NIST.

Figura 35 - Espectro de massas do composto em Tr 6,55 min, Limoneno



**A)** Espectro de massas do composto identificado; **B)** Espectro de massas e identificação da biblioteca NIST.

Figura 36 - Cromatograma infusão Sana-lo-Todo obtido por CG-EM



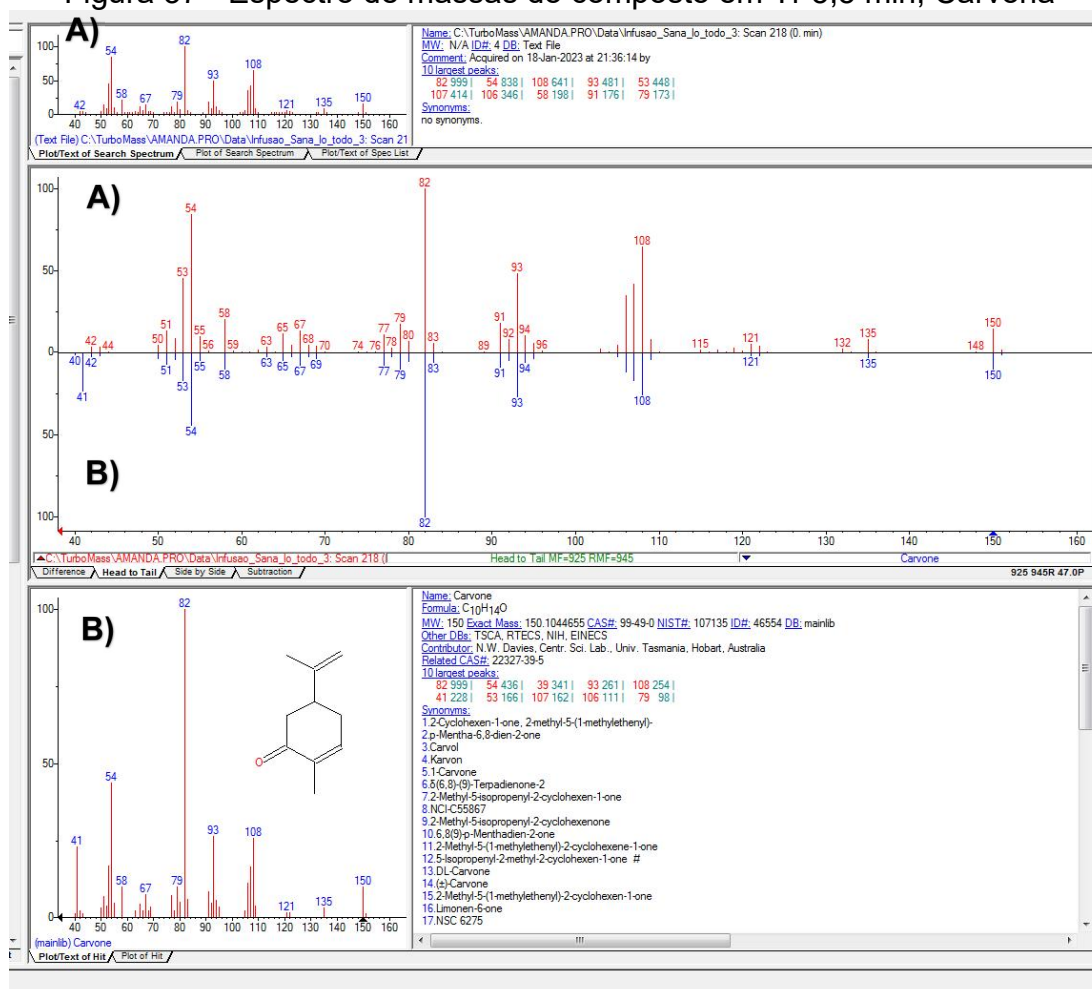
Fonte: dados da pesquisa, 2023.

Já no cromatograma (Figura 36) obtido a partir da infusão de chá revelou a presença do composto com retenção de 5.50 minutos identificada como Carvona



(Figura 38) através da comparação com dados fornecidos pela biblioteca NIST em comparação com o respectivo espectro de massa coletado.

Figura 37 - Espectro de massas do composto em Tr 5,5 min, Carvona

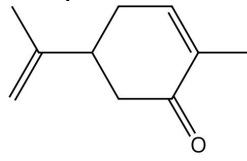


**A)** Espectro de massas do composto identificado; **B)** Espectro de massas e identificação da biblioteca NIST.

A carvona presente na *Lippia alba* apresenta propriedades terapêuticas significativas e potenciais aplicações em diferentes setores. Por exemplo, na indústria de alimentos, a carvona é utilizada como aroma natural e agente flavorizante em produtos como balas, bebidas e alimentos processados. Já na de cosméticos, a carvona pode ser empregada em perfumes, loções e produtos de higiene pessoal devido ao seu aroma característico.

As análises mostram a presença do composto volátil no HS e na infusão Carvona, tendo diferenças no tempo de retenção mas há presença nos dois cromatogramas.

Figura 38 - Estrutura química do composto Carvona (5)



## 6 CONCLUSÃO

Neste estudo foi realizada uma análise através dos materiais vegetais que foi possível caracterizar os diferentes quimiotipos das espécimes de *Lippia alba*, de cada folha pelo *headspace* e a a infusão pelo CG.

Na amostra de Melissa do Horto e Melissa Porto foi observado na análise de *headspace* os compostos majoritários foram o citral e carveol, na infusão o carveol e citral respectivamente.

Na Salva do Horto e Porto na análise de HS os compostos majoritários foram o beta-copaeno e o Linalol e na infusão o Linalol.

Na Sana-lo-todo na análise pelo HS e infusão o composto majoritário foi a a carvona. De acordo com dados presentes no anexo A. Abaixo (quadro 3) com os resultados da composição das amostras analisadas.

Quadro 3 - Resultado da composição das amostras

<b>Amostra</b>	<b>Composto identificado</b>
<i>Melissa Horto</i>	<i>Citral / Carveol</i>
<i>Infusao Melissa horto</i>	<i>Carveol</i>
<i>Melissa porto</i>	<i>Citral / Carveol</i>
<i>Infusao Melissa porto</i>	<i>Citral</i>
<i>Salva horto</i>	<i>Beta-copaeno / Linalol</i>
<i>Infusao salva horto</i>	<i>Linalol</i>
<i>Salva porto</i>	<i>Beta-copaeno / Linalol</i>
<i>Infusao salva porto</i>	<i>Linalol</i>
<i>Sana-lo-todo</i>	<i>Carvona / limoneno</i>
<i>Infusao sana-lo-todo</i>	<i>Carvona</i>

Fonte: dados da pesquisa, 2023.

Na forma de preparo pelo *headspace* a folha seca foi colocada dentro de um vial e na infusão a amostra foi preparada conforme uso popular descrito no item métodos.

Assim, conforme os resultados comparando na literatura é possível observar a presença de compostos já descritos mas não se encaixando nas classificações previstas, ressaltando a variabilidade dos quimiotipos. Também destacando que a

Melissa do Horto e Porto com mesmo quimiotipo e a Salva do Horto e Porto também. Na *Sana-lo-todo* o composto majoritário a carvona.

Além disso, na infusão é observado a presença dos mesmos compostos identificados no *headspace* tendo importância a indicação do quimiotipo de acordo com os sintomas, como a *Melissa* mas indicados para problemas de insônia e ansiedade e a *Salva* para problemas respiratórios, por exemplo.

## REFERÊNCIAS

- ADAMS, R. P. **Identification of essential oil components by gas chromatography/mass spectroscopy**. 4 th ed. Allured Pub. Corp, 2007.
- AGRA, M. F.; BARBOSA FILHO, J. M. Levantamento da flora medicinal da Paraíba e triagem fitoquímica. **Rev. Bras. Farm.**, Rio de Janeiro, v. 71, n. 3, p. 72–76, jul./set. 1990.
- ALEA, J.A.P.; ORTEGA, L.A.G.; ROSADO PEREZ, A.; JORGE, M.R.& BALUJA, R. Composición y propiedades antibacterianas del aceite esencial de *Lippia alba* (Mill.) n. e. Brown. **Rev.Cubana Farm**, ene-abr.1996, v.30, n.1, p.0-0. Disponível na internet: . ISSN 0034-7515. Acesso 23 nov. 2005.
- ALONSO, J. **Tratado de Fitofármacos y Nutraceuticos**. Rosario, Argentina: Corpus Libros, 2004. p. 952-54.
- Atti SL, Pansera MR, Atti SAC, Rossato M, Pauletti GF, Rotal D, Paroul N, Moyna P 2002. Variation in essential oil yield and composition of *Lippia alba* (Mill.) N. E. Br. grown in southern Brazil. **Rev Bras PI Med** 4: 72-74.
- CASTRO, D.M. de. **Efeitos da variação sazonal, colheita selecionada e diferentes temperaturas de secagem sobre a produção de biomassa, rendimento e composição de óleos essenciais de *Lippia alba* (Mill) N.E.Br. ex. Britt e Wilson (Verbenaceae)**. 2001.132 f. Tese (Doutorado em Horticultura) – Faculdade de Ciências Agronômicas, Universidade Estadual Paulista, Botucatu, 2001.
- CASTRO, E.M; GAVILANES, M.L. **Morfo-Anatomia de plantas medicinais**. Textos Acadêmicos. Lavras: UFLA/FAEPE, 2000.
- CASTRO, H.G.de; FERREIRA, F.A.da; SILVA, D.J.H.; MOSQUIM, P.R. **Contribuição ao estudo das plantas medicinais: metabólitos secundários**. 2. ed. Visconde do Rio Branco: s.n, 2004.
- Corrêa CBV 1992. Contribuição ao estudo de *Lippia alba* (Mill.) N. E. Br. ex Britt & Wilson - erva-cidreira. **Rev Bras Farm** 73: 57-64.
- CRAVEIRO, A. A. et al. **Essential oils from Brazilian Verbenaceae. Gênero *Lippia***. J. Nat. Prod., Lloydia, v. 44, n. 5, p. 598–601, jul./aug. 1981.
- CRAVEIRO, A. A. et al. **Óleos essenciais de plantas medicinais aromáticas do Nordeste**. In: SIMPÓSIO DE PLANTAS MEDICINAIS DO BRASIL, VII, 1982, Belo Horizonte. Resumos... Belo Horizonte: Comissão organizadora do SPMB, 1982. 562p. p. 105.
- CRAVEIRO, A. A. et al. **Óleos essenciais de plantas medicinais do nordeste**. Fortaleza: EDUFC, 1981.

DA SILVA, LAYZON ANTONIO LEMOS. **Lactonas sesquiterpênicas em espécies selecionadas de Vernoniaceae (Asteraceae): semissíntese e avaliação do potencial biológico (in vitro)**. Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Ciências da Saúde, Programa de Pós-Graduação em Farmácia, Florianópolis, 2019.

DI STASI, L. C. et al. Plantas Medicinais na Amazônia. São Paulo: UNESP, 1989.  
EHLERT, P.A.D. **Épocas de plantio, idade e horário de colheita na produção e qualidade do óleo essencial de quimiotipo limoneno-carvona de Lippia alba (Mill.) N. E. Br. Botucatu, SP: 2003** 107 f. Tese (Doutorado) – Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, São Paulo. 2003.

FRANKENBERGER, LARISSA. **Obtenção e caracterização de óleos essenciais de Dysphania ambrosioides L.(AMARANTHACEAE), Cola nitida (Vent.) Schott & Endl. (MALVACEAE) e Mentha pulegium (LAMIACEAE) para avaliação de atividade repelente e inseticida**. Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Ciências da Saúde, Programa de Pós-Graduação em Farmácia, Florianópolis, 2022.

FRIGHETTO, N. et al. **Lippia alba Mill N. E. Br. (Verbenaceae) as a source of Linalol. J. Essent. Oil Res.**, Carol Stream, v. 10, n. 5, p. 578–580, sept./oct. 1998.  
GOMES, E. C. et al. **Constituintes do óleo essencial de Lippia alba (Mill.) N. E. Br. (Verbenaceae). Rev. Bras. Farm., Rio de Janeiro**, v. 74, n. 2, p. 29–32, abril/jun. 1993.

GOMES, E. C.; MIGUEL, O. G.; MOREIRA, E. A. **Contribuição ao estudo anatômico da folha de Lippia alba (Mill.) N. E. Br.–Verbenaceae**. In: SIMPÓSIO DE PLANTAS MEDICINAIS DO BRASIL, XI, 1990, João Pessoa. Resumos... João Pessoa, 1990. p. 3.15.

GUPTA, M. P. (Ed). 270 **Plantas medicinales iberoamericanas**. 1. ed. CYTED. Santa Fé de Bogotá: Editorial Presencia, 1995. p. 557–567.

HENNEBELLE, T. et al. O óleo essencial de Lippia alba: análise de amostras de departamentos ultramarinos franceses e revisão de trabalhos anteriores. **Química e Biodiversidade**, v.3, n.10, p.1116– 25, 2006.

Horto didático de plantas medicinais do HU/CCS. **Salva / Melissa - Lippia alba (Mill.) N.E. Br. ex Britton & P. Wilson**. Disponível em: <https://hortodidatico.ufsc.br/salvamelissa/>. Acesso em: 15 Nov. 2022.

JANNUZZI, H. **Caracterização de dezesseis acessos de Lippia alba (Mill) N.E Brown, no Distrito Federal. Brasília: Faculdade de Agronomia e Medicina Veterinária, Universidade de Brasília, 2005**, 54 p. Dissertação de Mestrado.

JEZLER, Caroline N.; OLIVEIRA, Ariana R.M.F. de; BATISTA, Ricardo S.; OLIVEIRA, Rosilene A.; SILVA, Delmira da C.; COSTA, Larissa C. do B.. Lippia alba morphotypes cidreira and melissa exhibit significant differences in leaf characteristics and essential oil profile. **Revista Brasileira de Farmacognosia**,

[S.L.], v. 23, n. 2, p. 217-223, mar. 2013. Springer Science and Business Media LLC. <http://dx.doi.org/10.1590/s0102-695x2013005000008>.

KLÜEGER, P. A. et al. **Neuropharmacological evaluation of crude and semipurified extracts from *Lippia alba* WILL. N. E. Br. (Verbenaceae)**. In: INTERNATIONAL JOINT SYMPOSIUM–IOCD/CYTED, 1997, Panamá. Chemistry, biological and pharmacological properties of medicinal plants from the Americas. Panamá, 1997.

LINDE, G.A.; COLAUTO, N.B.; ALBERTÓ, E.; GAZIM, Z.C.. Quimiotipos, Extração, Composição y Aplicaciones del Aceite Esencial de *Lippia alba*. **Revista Brasileira de Plantas Mediciniais**, [S.L.], v. 18, n. 1, p. 191-200, mar. 2016. FapUNIFESP (SciELO). [http://dx.doi.org/10.1590/1983-084x/15\\_037](http://dx.doi.org/10.1590/1983-084x/15_037).

LOPEZ, MA et al. Composição química e propriedades antígenotóxicas dos óleos essenciais de *Lippia alba*. **Genética e Biologia Molecular**, v.34, n.3, p.479–88, 2011.

LORENZI, H; MATOS, F.J.A. **Plantas medicinais no Brasil: Nativas e exóticas cultivadas**. Nova Odessa/SP: Instituto Plantarum, 2002.

Matos FJA 1998. *Farmácias vivas* Fortaleza: EUFC.

MATOS, F. J. A. **Plantas medicinais: Guia de seleção e emprego de plantas usadas em fitoterapia no Nordeste do Brasil**. 2ª ed. Fortaleza: IU, 2000.

MATOS, F.J.A. As ervas cidreiras do Nordeste do Brasil – Estudo de três quimiótipos de *Lippia alba* (Mill.) N.E Brown (Verbenáceas). Parte I – Farmacognosia. **Revista Brasileira de Farmácia**, v.77, n.2 p. 65-67, 1996 a.

MATOS, F.J.A. As ervas cidreiras do Nordeste do Brasil – Estudo de três quimiótipos de *Lippia alba* (Mill.) N.E Brown (Verbenáceas). Parte II – Farmacoquímica. **Revista Brasileira de Farmácia**, v.77, n.4, p.137-141, 1996 b.

MING, L. C. **Cultivo de plantas medicinais: influência da adubação orgânica na produção de biomassa de óleos essenciais em *Lippia alba* (Mill.) N. E. Br.– Verbenaceae**. In: SIMPÓSIO DE PLANTAS MEDICINAIS DO BRASIL, XII, 1992, Curitiba. Resumos... Curitiba: Universidade Federal do Paraná, 1992a. 296 p. p. 210.

MING, L. C. **Rooting of cuttings of *Lippia alba* (Mill.) N. E. Br.–Verbenaceae**. Acta Hort., Wageningen, v. 426, p. 643–646, aug. 1996.

PESSINI, G.L.; HOLETZ, F.B.; SANCHES, N.R.; CORTEZ, D.A.G.; DIAS FILHO, B.P.; NAKAMURA, C.V. Avaliação de atividade antibacteriana e antifúngica de extratos de plantas utilizadas na medicina popular. **Revista Brasileira de Farmacognosia**. v.13 (Sup.l1) p.21-24, 2003.

PLAMED.EXE. Plantas Mediciniais. 1.0. Antônio Amaury Silva Júnior, Álvaro Constâncio. EPAGRI–Promed–Projeto de Plantas Mediciniais. Itajaí: EPAGRI, 1999. 1 CD–ROM, Dbase 5.0.

- RICCIARDI, G.; VEGLIA, J.; RICCIARDI, A.; BANDONI, A. **Examen de los aceites esenciales de especies de *Aloysia* (Verbenaceae) del Nordeste.** Corrientes, v.8, p. 100-102, 1999.
- SANTOS-MENDES, M. M. F. B.; MING, L. C.; MARQUES, M. O. M. **Caracterização fitoquímica do óleo essencial de 8 formas de *Lippia alba*, cultivadas em São Manuel-SP.** SIMPÓSIO DE PLANTAS MEDICINAIS DO BRASIL, XVI, 2000, Recife. Resumos... Recife: Comissão organizadora do XV SPMB, 2000. 227 p. p. 73.
- SILVA, R. M.; FARIAS, M. R. **Investigação químico-farmacológica de *Lippia alba* (Mill.) N. E. Br-Verbenaceae.** In: SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA, VII, 1997, Florianópolis. Resumos... Florianópolis, Universidade Federal de Santa Catarina, 1997.
- SIMÕES, C.M.O., SPITZER, V. **Óleos voláteis.** In: SIMÕES, C.M.O. (Coord.). Farmacognosia da planta ao medicamento; 5.ed. Porto Alegre/Florianópolis: UFRGS/UFSC, p. 467 - 495, 2003.
- SOARES, L.S. **Estudo tecnológico, fotoquímico e biológico de *Lippia alba* (MILLER) N.E. BROWN ex BRITT.&WILS. (Falsa-melissa) Verbenácea.** Florianópolis, SC: 2001, 182 p. Dissertação (Mestrado em Farmácia) – Universidade Federal de Santa Catarina, 2001.
- TAVARES ES, JULIÃO LS, LOPES D, BIZZO HR, LAGE CLS, LEITÃO SG 2005. Análise do óleo essencial de folhas de três quimiotipos de *Lippia alba* (Mill.) N.E.Br. (Verbenaceae) cultivados em condições semelhantes. **Rev Bras Farmacogn** 15: 1-5. 2005
- TAVARES, E.S. **Estudos integrados em *Lippia alba* (Mill.) N.E. Br. – Uma planta de interesse econômica e medicinal.** Rio de Janeiro, RJ: 2003, 162 p. Tese (Doutorado em Biotecnologia vegetal). Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2003a.
- TERBLANCHÉ, F. C.; KORNELIUS, G. **Essential oil constituents of the genus *Lippia* (Verbenaceae)–A literature review.** **J. Essent. Oil Res.**, Carol Stream, v. 8, n. 5, p. 471– 485, sept./oct. 1996.
- TREASE, G. E.; EVANS, W. C. **Pharmacognosy.** 12 ed. London: Baillière Tindall, 1983.
- TUCKER, A. O.; MACIARELLO, M. J. **Volatile leaf oil of the “Licorice Verbena” [*Lippia alba* (Mill.) N. E. Brown ex Britton and P. Wils. var. *carterae* Moldenke] from the North American Herb Trade.** **J. Essent. Oil Res.**, Carol Stream, v. 11, n. 3, p. 314– 316, may/jun. 1999.
- VALE, T. G.; MATOS, F. J. A.; VIANA, G. S. B. **Efeito anticonvulsivante do óleo essencial de *Lippia alba* (Mill.) N. E. Brown e de seus princípios ativos.** SIMPÓSIO DE PLANTAS MEDICINAIS DO BRASIL, XV, 1998, Águas de Lindóia. Resumos... Águas de Lindóia: Comissão organizadora do XV SPMB, 1998. 227 p. p. 87.



- VELASCO–NEGUERUELA, A. et al. **Volatile constituents of four Lippia species from Córdoba (Argentina)**. J. Essent. Oil Res., Carol Stream, v. 5, n. 5, p. 513–524, sept./oct. 1993.
- VON POSER, G. L. et al. **Implicações taxonômicas de iridóides em Verbenaceae**. Caderno de Farmácia, Porto Alegre, v. 13, n. 2, p. 169–172, 1997.
- ZOGHBI, M. G. B. et al. **Essential oils of Lippia alba (Mill.) N. E. Br growing wild in the Brazilian Amazon**. Flavour Fragr. J., W Sussex, v. 13, n. 1, p. 47–48, jan./feb. 1998.

## ANEXO A - DADOS HEADSPACE

Dados obtidos a partir do headspace e infusão CG-EM.

Melissa_horto_01_HD_metodo2						Melissa_horto_02_HD_metodo2						MELISSA_HOR TO_03_HD_ME T0002					
Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z Experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z Experimental	Match	Formula molecular
1.49 - 1.68	Aminoácido (Alanina) p/ico estroiu Se isômeros	890.476		770	C1H7NO2	1.55-1.71	estorou					1.49-1.60-1.73	9E				
						5.33	Beta pineno	1361252	1361676	862	C10H16	5.44	B PINENO	1.361.252	1.361.676	878	C10H16
						14.42	CARVEOL	152120115	1522477	804	C10H16O	14.40	CARVEOL	152120115	1373075	808	C10H16O
						15.63	CITRAL	152120115	1521211	833	C10H16O	15.63	CITRAL	152120115	1342043	827	C10H16O
												21.66	CARYOFLENO	2041878	1343943	884	C15H24
5.33 - 5.36	Beta-Pineno B-Pinene e seus isômeros	1.361.252	1.362.942	867	C10H16	21.68	CARYOPHYLL ENE	2041878	2038052	866	C15H24	23.04	CIS-B-FAMESENE	2041878	2042479	824	C15H24
14.42	Carveol	1.521.201	1.517.413	816	C10H16O	23.04	CIS-B-FAMESENE	2041878	2040582	823	C15H24	24.05	B-COPAENE	2041878	2043112	767	C15H24
15.65	CITRAL	1.521.201	1.521.844	838	C10H16O	24.06	BENZENE-1-(1,5-DIMETHYL-4-HEXENYL)-4-METHYL-	202172151	2021606	797	C15H22	24.61	B-CURCUMENE	2041878	2043744	778	C15H24
21.66	β-cariofileno	2.041.878	2.042.497	899	C15H24												
MELISSA_POR TO_LAGOA_01_HD_METODO 2						MELISSA_POR TO_LAGOA_02_HD_METODO 2						MELISSA_POR TO_LAGOA_03_HD_METODO 2					
Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular
1.48-1.51-1.60-1.73	pentanamine alanine isômeros					1.49-1.55-1.7-1.73	ALANINE ISOMEROS					1.49-1.55-17-173	ALANINE ISOMEROS				
07.10	trans-B-ocimene carene (ISOMER CARENENE?)	1.361.252	1362094	746	C10H16	14.4	CARVEOL	152.120.115	1.520.786	818	C10H16O	14.4	CARVEOL	152.120.115	1.520.786	818	C10H16O
14.40	CARVEOL	152.120.115	1521163	821	C10H16O	15.63	CITRAL (9E)	152120115	1522313	831	C10H16O	15.63	CITRAL (9E)	152120115	1522366	831	C10H16O
15.61	CITRAL	152.120.115	1.521.211	841	C10H16O	21.66	CARYOPHYLL ENE	2041878	1492775	877	C15H24	21.66	CARYOPHYLL ENE	2041878	1492775	877	C15H24
SALVA_PORT O_01_HD_MET 0002						SALVA_PORT O_02_HD_MET 0002						SALVA_PORT O_03_HD_MET 0002					
Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular
1.6-1.73	ALANINE ISOMEROS 9E	750.684.137		727	C3H9NO	1.6-173	ALANINE ISOMEROS 9E	750.684.137		727	C3H9NO	1.6-173	ALANINE ISOMEROS 9E				
6.59	EUCALYPTOL E10	154.135.765	1.541.463	866	C10H18O	6.59	EUCALYPTOL E10	154.135.765	1.541.463	891	C10H18O	6.59	EUCALYPTOL E10				
8.9	1,6-OCTADIEN-3-OL,3,7-DIMETHYL-,2-AMINO BENZOATE	273172878		819	C17H23NO2	8.9	1,6-OCTADIEN-3-OL,3,7-DIMETHYL-,2-AMINO BENZOATE	273172878		825	C17H23NO2	8.9	1,6-OCTADIEN-3-OL,3,7-DIMETHYL-,2-AMINO BENZOATE				
10.09	2,6-DIMETHYL-1,3,5,7-OCTATETRAE NE, E, E-	13410955	1341524	885	C10H14	10.09	2,6-DIMETHYL-1,3,5,7-OCTATETRAE NE, E, E-	13410955	1341524	885	C10H14	10.09	2,6-DIMETHYL-1,3,5,7-OCTATETRAE NE, E, E-				
12.92	2,6-DIMETHYL-1,3,5,7-OCTATETRAE NE E, E-	13410955	1341759	856	C10H14	12.92	2,6-DIMETHYL-1,3,5,7-OCTATETRAE NE E, E-	13410955	1341759	856	C10H14	12.92	2,6-DIMETHYL-1,3,5,7-OCTATETRAE NE E, E-		856		
13.21	2,6-DIMETHYL-1,3,5,7-OCTATETRAE NE, E, E-	13410955	1341381	883	C10H14	13.21	2,6-DIMETHYL-1,3,5,7-OCTATETRAE NE, E, E-	13410955	1341381	883	C10H14	13.21	2,6-DIMETHYL-1,3,5,7-OCTATETRAE NE, E, E-		865		

17.98	3,7-OCTADIENE-2,6-DIOL, 2,6-DIMETHYL-	17013068		821	C10H18O2	17.98	3,7-OCTADIENE-2,6-DIOL, 2,6-DIMETHYL-HOTRIENOL(?)	17013068		826	C10H18O2	17.98					794		
20.53	CYCLOHEXAN E, 1-ETHENYL-1-METHYL-2,4-BIS(1-METHYLETHE NYL)-[1S-(1ALFA,2BETA, 4BETA)]-Y-ELEMENE (7)	2041878	2043744	856	C15H24	20.53	CYCLOHEXAN E, 1-ETHENYL-1-METHYL-2,4-BIS(1-METHYLETHE NYL)-[1S-(1ALFA,2BETA, 4BETA)]-	2041878	2043744	854	C15H24	20.53	CYCLOHEXAN E, 1-ETHENYL-1-METHYL-2,4-BIS(1-METHYLETHE NYL)-[1S-(1ALFA,2BETA, 4BETA)]-	2041878	2043744	851	C15H24		
21.66	CARYOPHYLL ENE	2041878	2041847	905	C15H24	21.66	CARYOPHYLL ENE	2041878	2041847	905	C15H24	21.66	CARYOPHYLL ENE	2041878	2041847	905	C15H24		
23.04	HUMULENE	2.041.878	2.041.679	834	C15H24	23.04	BICYCLO[7.2.0] UNDEC-4-ENE, 4,11,11-TRIMETHYL-8-METHYLENE ISOCARYOPHI LENE(?)	2041878	2.041.214	831	C15H24	23.04	BICYCLO[7.2.0] UNDEC-4-ENE, 4,11,11-TRIMETHYL-8-METHYLENE ISOCARYOPHI LENE(?)	2041878	2.041.214	831	C15H24		
24.03	B-COPAENE	2.041.878	2.042.074	795	C15H24	24.03	B-COPAENE	2041878	2042074	795	C15H24	24.03	B-COPAENE	2041878	2042074	795	C15H24		
25.2	GUAJA-1(10), 11-DIENE	2041878	2041774	843	C15H24	25.02	GUAJA-1(10)11-DIENE	2041878	2041774	843	C15H24	25.02	GUAJA-1(10)11-DIENE	2041878	2041774	843	C15H24		
26.91	Y-ELEMENE	2.041.878	2.042.099	848	C15H24	26.91	Y-ELEMENE	2041878	2042099	848	C15H24	26.91	Y-ELEMENE	2041878	2042099	848	C15H24		
SALVA_HORT O_01_HD_MET ODO2						SALVA_HORT O_02_HD_MET ODO2						SALVA_HORT O_03_HD_MET ODO2							
Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular		
1.6	DL-ALANINE 9E	890476785		673	C3H7NO2	1.49-1.68	DL-ALANINE ISOMEROS(?)	890476785	840886	658	C3H7NO2	1.49-1.6-1.88	BENZEENEETH ANAMINE,3-FLUORO-B,5-DIHYDROXY-N-METHYL	185085207	1870435	739	C8H12FNO2		
6.66	EUCALYPTOL	154135765	1540830	868	C10H18O	6.63	EUCALYPTOL	154135765	842.794	883	C10H18O	6.65	EUCALYPTOL	154135765	842.794	847	C10H18O		
10.11	2,6-DIMETHYL-1,3,5,7-OCTATETRAE NE,E,E-	13410955	1342417	897	C10H14	8.85-8.92	(1R)-2,6,6-TRIMETHYLBIC YCLO[3.1.1] HEPT-2-ENE 3-CARENE(?) ALFA-PINEN(?)	1361252	1362309	853	C10H16	8.88	1,6-OCTADIEN-3-OL,3,7-DIMETHYL-,2-AMINOBENZO ATE	273172878	2515156	831	C17H23NO2		
13.23	2,6-DIMETHYL-1,3,5,7-OCTATETRAE NE,E,E-	13410955	1342043	868	C10H14	13.23	2,6-DIMETHYL-1,3,5,7-OCTATETRAE NE,E,E-	13410955	1340777	855	C10H14	21.66	CARYOPHYLL ENE	2041878	2040582	826	C15H24		
24.03	B-COPAENE	2.041.878	1.331.909	802	C15H24							24.03	B-COPAENE	2041878	2041847	777	C15H24		
SANA_LO_TO DO_01_HD_ME TODO2						SANA_LO_TO DO_02_HD_ME TODO2						SANA_LO_TO DO_03_HD_ME TODO2							
Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular		
1.51	1-PROPANOL-2-AMINO-(+)- 9E	750684137	680548	727	C3H9NO	1.73	BENZEENEETH ANAMINE,3-CLURO-B,5-DIHYDROXY-N-METHYL 9E	185085207	1870435	750	C8H12FNO2	1.51-1.73	2-PROPANAMIN E	59,0734992	55,1797	775	C3H8N		
6.52	D-LIMONENE	1.361.252	1.362.309	870	C10H16	6.55	CYCLOHEXAN E,1-METHYL-5-(1-METHYL-5-(1-METHYLETHE NYL)-LIMONENE(?)	1361252	1362309	887	C10H16	6.55	D-LIMONENE	136,1252	54,9883	890	C10H16		
14.64	10E ESTOROU (-)-CARVONE	1501044655	1362942	931	C10H14O	14.64	(-)-CARVONE	1501044655	1500957	911	C10H14O	14.64	10E (-)-CARVONE	150,1044655	1500957	920	C10H14O		
20.29	(-)-BOURBONENE	2041878	2042479	859	C15H24	20.29	(-)-BOURBONENE	2041878	1471208	861	C15H24	20.27	(-)-BOURBONENE	2041878	1471208	870	C15H24		
24.03	B-COPAENE	2041878	2041214	804	C15H24	24.05	BCOPAENE	204,1878	1473107	803	C15H24	24.03	BCOPAENE	204,1878	1473107	798	C15H24		

INFUSAO_SAL VA_HORTO_1						INFUSAO_SAL VA_HORTO_2						INFUSAO_SAL VA_HORTO_3					
Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular
19-1.98-2.03-2.32	N-92-p40pyrhy) azidine	81,0578494		845	C5H7N	1.87-2.27						1.90-2.16					
10.46	BUTYLATED HYDROXYTOLUENE	220,182715	220,1155	884	C15H24O	3.42	9E 1,8-OCTADIEN-3-OL,7,7-DIMETHYL-					3.42	9E 1,8-OCTADIEN-3-OL,7,7-DIMETHYLGERANIOL				
16.94	5(1H) AZULENONE, 2,4,5,7,8,8A-HEXA-HYDRO-3,8-DIMETHYL-4-(1-METHYLETHYLIDEN...	218,167066		711	C15H22O	10.48						4.8					
						16.96						16.48	BUTYLATED HYDROXYTOLUENE				
						16.96						16.96					
INFUSAO_SAN A_LO_TODO1						INFUSAO_SAN A_LO_TODO2						INFUSAO_SAN A_LO_TODO3					
Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular
1.87-2.03	PROPENE	42,04695	43,3420	770	C3H6	1.85-1.92-2.01-2.14 (?)	DIAZIRINE PROPENE (?)	42,0217981	41,9744	843	CH2N2	1.68-1.81-1.9-1.94-2.23	PROPENE				
5.5	CARVONE	150,1044655	150,0395	864	C10H14O	5.5 10E (?)	CARVONE	150,1044655	150,0768	923	C10H14O	5.5	CARVONE	150,1044655	150,0768	923	C10H14O
10.48	butylated hydroxytoluene	220,182715	220,1155	901	C15H24O	7.24	BICYCLO[3.1.1]HEPT-3-EN-2-ONE 4,6,6-TRIMETHYL-, (1S)-	150,2044655	150,0395	661	C10H14O	10.48	BUTYLATED				
16.96	2,6-DI-TERT-BUTYL-4-(DIMETHYLAMINOMETHYL)PHENOL	263,224915	263,7481	717	C17H29NO	10.48	BUTYLATED HYDROXYTOLUENE	220,182715	220,1539	842	C15H24O						
						16.96	2,5-BIS-(1-METHYL-1-SILACYCLOBUTYL)-P-XYLENE	274,157305		610	C16H26Si2						
						19.94	PREGN-4-ENE-3,20-DIONE, 17,21-DIHYDROXY-, BIS(O-METHYLOXIM E)	404,267508		687	C23H36N2O4						
INFUSAO_MEL ISSA_HORTO_1						INFUSAO_MEL ISSA_HORTO_2						INFUSAO_MEL ISSA_HORTO_3					
Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular
1.83-1.87-1.9-1.96	PROPENE (?)	81,0578494	791,560		C5H7N	1,68-1,81-1,99-2,07	PROPENE	81,0578494	791,560	845	C5H7N	1,83-1,87-1,94-2,05	DIAZINE (?)				
10.48	butylated hydroxytoluene e conservante do solvente	220,182715	220,1155	874	C15H24O	5.81	CARVEOL	152,120115	152,1503	749	C10H16O	10.48	butylated hydroxytoluene	220,182715	220,1155	874	C15H24O
						10.48	PHENOL 2,6-BIS(1,1-DIMETHYLETHYL)-4-METHYL-, METHILCARBAMATE	277,20418	152,5614	861	C17H27NO2	5.81	CARVEOL	152,120115	152,1503	749	C10H16O
INFUSAO_SAL VA_PORTO_1						INFUSAO_SAL VA_PORTO_1						INFUSAO_SAL VA_PORTO_1					

Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular
1.85-1.98	PROPENE (?)	42,04695	42,055	881	C3H6	1.81-1.94-2.01	PROPENE					1.81-1.83-2.10-2.18	DIAZIRINE				
2.89	EUCALYPTOL	154,135765	154,0745	729	C10H18O	2.89	EUCALYPTOL					2.93	EUCALYPTOL				
3.33	MOLYBDENUM					3.41	1,6-OCTADIEN-3-OL,3,7-DIMETHYL					3.42	1,6-OCTADIEN GERANIOL				
3.41	9E 1,6-OCTADIEN-3-OL,7,7-DIMETHYL	154,135765	154,1226	821	C10H18O	4.78	2,6-DIMETHYL-1,3,5,7-OCTATETRAENE,E-					10.48	BUTYLATED HY				
4.65	OCTADECADIY NOIC,ACID, METHYL ESTER	290,22458	290,6376	679	C19H30O2	10.46	butylated hydroxytoluene	220,182715	220,1155	819	C15H24O						
4.78	10,13-OCTADECADIY NOIC,ACID, METHYL ESTER	290,22458	290,6376	701	C19H30O2	16.94	3,5-DI-TERT-BUTYL-4-HYDROXYBENZALDEHYDE										
9.49	METHYL(1-O-RETINYL-2,3,4-TRIACETYL-B-GLUCOPYRANURONATE	602,309097		677	C33H46O10												
10.46	butylated hydroxytoluene	220,182715	220,1155	819	C15H24O												
16.94	S-2-[2-[6-[METHOXY-4-QUINOLYLOXY]ETHYLAMINO]ETHYL THIOSULFATE	358,065714		656	C14H18N2O5S2												
INFUSAO_MEL ISSA_PORTO_1						INFUSAO_MEL ISSA_PORTO_2						INFUSAO_MEL ISSA_PORTO_3					
Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular	Tr(min)	Proposta de substância	exact mass	m/z experimental	Match	Formula molecular
1.63-1.81-19-2.1	PROPENE					1.81-1.92-2.31	PROPENE					1.85-1.81-1.88-2.09-2.18					
10.48	butylated hydroxytoluene	220,182715	220,1155	876	C15H24O	5.31	CARVEOL	152,120115	152,1494	772	C10H16O	5.33	CITRAL/ CARVEOL	152,120115	152,1201	774	C10H16O
						5.79	CITRAL	152,120115	152,1201	853	C10H16O	5.79	CITRAL			853	
						10.48	butylated hydroxytoluene	220,182715	220,1155	870	C15H24O	10.48	BUTYL HYDROXY				