

Área: ANA

Quantificação de terpinen-4-ol em óleo essencial por espectroscopia de ressonância magnética nuclear

Beatriz Burigo (PG), Gabriel T. Coelho (IC), Iêda Maria Begnini (PQ), Martinho Rau (PQ).***bburigo@furb.br; mr.au@furb.br***Departamento de Química, Universidade Regional de Blumenau (FURB, Blumenau, Santa Catarina – 89030-903).**Palavras Chave: Curvas analíticas, Cromatografia em fase gasosa, Melaleuca alternifolia, Método analítico.*

Highlights

Quantification of terpinen-4-ol in essential oil by nuclear magnetic resonance spectroscopy.

The NMR technique enabled rapid quantification of terpinen-4-ol in just 10 min, while GC-FID required 67 min. External standard quantification showed 30.8% terpinen-4-ol by NMR and 26.2% by GC-FID, highlighting NMR as a suitable method for quantification.

Resumo/Abstract

O óleo essencial das folhas de *Melaleuca alternifolia* é amplamente utilizado devido às suas propriedades antimicrobianas, atribuídas principalmente ao terpinen-4-ol. Este composto é um dos constituintes majoritários no óleo, podendo atingir teores de até 50 % (fração mássica). O terpinen-4-ol é um terpeno oxigenado que possui função álcool e uma ligação dupla entre carbonos, o que contribui para sua detecção por espectroscopia de ressonância magnética nuclear (NMR). Para a quantificação de constituintes majoritários, a técnica de NMR torna-se atrativa, por ser rápida e seletiva para determinados hidrogênios do terpinen-4-ol. Neste trabalho, investigou-se a identificação e a quantificação de terpinen-4-ol por curva analítica (3,6 a 14,5 mg mL⁻¹, em 0,500 mL de CDCl₃) de espectroscopia de NMR de ¹H (espectrômetro Bruker, 300 MHz, utilizando tetrametilsilano como padrão interno) e comparadas com as análises cromatográficas GC-FID (quantificação relativa dos picos cromatográficos e por curva analítica externa, na faixa de 0,5 a 20 mg mL⁻¹). As análises foram realizadas com amostras de óleo essencial de *M. alternifolia* provenientes de uma fonte comercial e extraídas no laboratório Central Laboratorial de Análise Instrumental Multiusuários (CLAIMS) da FURB. A análise por GC-FID identificou 30 compostos no óleo essencial, sendo o terpinen-4-ol o componente majoritário. A preparação de amostra para NMR demorou cerca de 8 minutos e análise de NMR demorou cerca de 2 min, totalizando 10 minutos no total, enquanto a análise cromatográfica demorou cerca de 67 min. No espectrograma de NMR de ¹H, foi identificado que o sinal em 5,32 ppm correspondeu ao hidrogênio vinílico do composto. Os demais hidrogênios da molécula absorvem fora da região de interesse, geralmente entre 0,9 ppm a 2,2 ppm. Este sinal não apresentou sobreposição com outros sinais de hidrogênio no espectrograma do óleo essencial. Na quantificação do terpinen-4-ol por área relativa dos picos cromatográficos por GC-FID, foi determinado o teor de 48,5 %, enquanto para a quantificação por padronização externa por GC-FID e por espectroscopia de NMR, foram obtidos os teores de 26,2 % e 30,8 %, respectivamente. A diferença entre os teores de área relativa e por padronização externa pode estar relacionados com as diferentes sensibilidades analíticas dos compostos quando analisados por GC-FID. Os teores obtidos por padronização externa das duas técnicas analíticas demonstrou que a técnica de NMR pode ser indicada para a quantificação de compostos majoritários em óleos essenciais, desde que apresentem sinais analíticos sem sobreposição com os demais componentes das amostras.

Agradecimentos/Acknowledgments

