



## **DESENVOLVIMENTO E CARACTERIZAÇÃO QUÍMICA DE FRAGRÂNCIAS A PARTIR DE ÓLEOS ESSENCIAIS E FLAVORIZANTE SINTÉTICO**

*Development and characterization of fragrances from  
essential oils from brazilian biodiversity and synthetic  
flavoring*

Ricardo Costa de Moraes Júnior<sup>1</sup>; André Luís Morais Ruela<sup>2</sup>; Angélica Ferraz Gomes<sup>1\*</sup>;  
Juliano Geraldo Amaral<sup>1</sup>; Mateus Freire Leite<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Campus Anísio Teixeira, Instituto Multidisciplinar em Saúde, Universidade Federal da Bahia (UFBA),  
Vitória da Conquista, BA, Brasil.*

<sup>2</sup>*Departamento de Farmácia, Escola de Farmácia, Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP), Ouro  
Preto, MG, Brasil.*

<sup>3</sup>*Departamento de Alimentos e Medicamentos, Faculdade de Ciências Farmacêutica, Universidade  
Federal de Alfenas (Unifal-MG).*

*\*Corresponding author. E-mail address: [licaferraz@yahoo.com.br](mailto:licaferraz@yahoo.com.br).*

### **RESUMO**

Os perfumistas elaboram composições de fragrância a partir de matérias-primas odoríferas. Os perfumes recebem classificações conforme a concentração da fragrância nas suas formulações, como *parfums* (entre 15 e 30% de fragrância); *eau de parfums* (8 a 15% de fragrância); *eau de toilettes* (4 a 15% de fragrância) e os *eau de colognes* (3 a 5% de fragrância). O presente trabalho teve como objetivo desenvolver e caracterizar uma fragrância, e incorporá-la em um produto cosmético para uso em perfumaria. O desenvolvimento da fragrância foi baseado em 21 combinações de compostos aromáticos obtidos comercialmente ou preparados por hidrodestilação em Clevenger, incluindo ou não um aromatizante sintético. A



fragrância selecionada continha uma mistura dos óleos essenciais (*Pogostemon cablin*, *Amyris balsamifera*, *Citrus limon* e *Baccharis dracunculifolia*) combinados a essência sintética de maracujá. A formulação de perfume definida consistiu em 7% da fragrância selecionada, etanol como veículo, propilenoglicol como umectante, triclosan como conservante e galaxolide como fixador. A técnica cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas permitiu a caracterização química do perfume. A determinação do índice de retenção e comparação com a literatura e banco de dados da biblioteca *Wiley* permitiu a identificação das substâncias voláteis na formulação. Os principais constituintes voláteis determinados no perfume foram valerianol (12,5%), limoneno (6,7%) e  $\beta$ -cariofileno (6,7%). Foi possível demonstrar o potencial de fontes naturais, especialmente aquelas oriundos da biodiversidade brasileira, para produção de compostos aromáticos a partir destes resultados.

**Palavras-chave:** Cosméticos. Perfumes. Aromatizantes. Cromatografia gasosa. Espectrometria de massa.

## **ABSTRACT**

The perfumers have designed fragrance compositions from odorous raw materials. The perfumes are classified according to the concentration of the fragrance in their formulations, such as *parfums* (between 15 and 30% fragrance); *eau de parfums* (8 to 15% fragrance); *eau de toilettes* (4 to 15% fragrance), and *eau de colognes* (3 to 5% fragrance). The present work aimed to develop and characterize a fragrance and to incorporate it in a cosmetic product for use in perfumery. The development of the fragrance was based on 21 combinations of aromatic compounds commercially purchased or prepared by hydrodistillation in Clevenger, including or not a synthetic flavoring. The selected fragrance contained a mixture of essential oils (*Pogostemon cablin*, *Amyris balsamifera*, *Citrus limon*, and *Baccharis dracunculifolia*) mixed with a synthetic essence of passion fruit. The defined perfume formulation consisted of 7% of the selected fragrance, ethanol as a vehicle, propylene glycol as a humectant, triclosan as a preservative, and galaxolid as a fixative. The gas chromatography



technique coupled with mass spectrometry allowed the chemical characterization of the perfume. The determination of the retention index and comparison with the literature and database of the Wiley library allowed the identification of volatile substances in the formulation. The main volatile constituents determined in the perfume were valerianol (12.5%), limonene (6.7%), and  $\beta$ -karyophyllene (6.7%). It was possible to demonstrate the potential of natural sources, especially those from Brazilian biodiversity, for the production of aromatic compounds from these results.

**Keywords:** Cosmetics. Perfume. Flavorings. Gas chromatography. Mass spectrometry.

## INTRODUÇÃO

A inovação envolvendo um novo produto, processo ou sistema é uma estratégia de diferenciação e competitividade ao considerar um número cada vez maior de empresas e negócios. Tal questão é ampla no setor farmacêutico, ao se considerar que o mesmo incorpora inovações tanto na área de medicamentos quanto na cosmetologia (FACCIO, 2020). Nesse contexto, o setor de aromas e fragrâncias em suas diversas aplicações representa uma fonte de desenvolvimento contínuo e de constante inovação, sendo um mercado multibilionário, do qual o Brasil se apresenta como personagem de destaque (JUGREET *et al.*, 2020; LEE; TRINH, 2020; MATTOS; SPEZIALI, 2017; SERRA, 2015).

Uma fragrância é definida com uma composição de matérias-primas odoríferas de fontes naturais ou sintéticas, elaboradas por um processo criativo de um perfumista (DEANS; RITCHIE, 1987; HOMER *et al.*, 2000; TAYLOR *et al.*, 2009). As propriedades olfativas das fragrâncias incorporadas em formulações de perfumes proporcionam importantes informações sensoriais, influenciando o modo como os seres humanos interpretam informações baseadas na visão como, por exemplo, a percepção facial (ABRAMSON; CHICAS-MOSIER, 2016). Os perfumes são designados de acordo com a sua concentração de fragrância, podendo ser classificados em *parfum* (entre 15 e 30% de fragrância, incluindo 74-77% de etanol e 1-3% de água);



*eau de parfum* (8 a 15% de fragrância, incluindo 75-80% de etanol e 9-13% de água); *eau de toilette* (4 a 15% de fragrância, incluindo 72-81% de etanol e 10-18% de água) ou *eau de cologne* (3 a 5% de fragrância, incluindo 58-77% de etanol e 20-40% de água) (TEIXEIRA; RODRÍGUEZ; RODRIGUES, A. E., 2010).

Historicamente, a perfumaria se correlaciona com a própria história humana. Há mais de 4000 anos, os mesopotâmios usavam o incenso como uma forma de perfume em rituais dedicados à deuses e ancestrais. No século XVI, a perfumaria foi associada à moda, como um comércio explorado junto a venda de artigos de couro. Nos séculos XIX e XX, houve o estabelecimento das casas de perfumes como empresas e também o aperfeiçoamento dos processos de extração de substâncias aromáticas termossensíveis (SCHILLING *et al.*, 2010).

Com o avanço da química moderna no século XX, a produção de perfumes passou também a ser explorada por intermédio de componentes sintéticos. Entretanto, as fontes naturais de fragrâncias ainda são interessantes para a indústria da perfumaria, devido à grande variedade de substâncias existentes com potencial pouco explorado. Compostos aromáticos aparecem na natureza como comunicação natural em espécies vegetais, na forma de sinais químicos para reprodução, ou mesmo para a proteção da planta, como regulação da temperatura (BAŞER; DEMIRCI, 2011; JUGREET *et al.*, 2020). Dentre as substâncias isoladas de fontes naturais destacam-se aquelas provenientes de óleos essenciais extraídos de plantas, pertencentes às classes fitoquímicas terpenoides, fenilpropanoides e aldeídos. Sendo assim, os óleos essenciais são misturas complexas de substâncias voláteis, líquidas a temperatura ambiente. Além das plantas, outros organismos vivos, como animais e microrganismos, podem produzir óleos essenciais (BAŞER; DEMIRCI, 2011). Desta forma, este trabalho objetivou o desenvolvimento de uma fragrância a partir de fontes naturais e/ou sintéticas, realizando sua caracterização química por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas.



## **METODOLOGIA**

### **Matéria-prima vegetal**

As matérias-primas utilizadas neste trabalho foram óleos essenciais de diferentes espécies vegetais. Realizou-se cadastro no Sistema Nacional de Gestão do Patrimônio Genético e do Conhecimento Tradicional Associado, sob número SisGen: A1E96AA. Os óleos essenciais de lavandim (*Lavandula hybrida*) e sálvia-esclaráia (*Salvia sclarea*) foram produzidos pela BioEssencia<sup>®</sup>. Lemongrass (*Cymbopogon citratus*) e Field Rosemary (*Baccharis dracunculifolia*) foram produzidos, respectivamente, pelas empresas Samia<sup>®</sup> e Lazlo<sup>®</sup>. Os óleos essenciais de limão siciliano (*Citrus limon*), zimbro (*Juniperus communis*), patchouli (*Pogostemon cablin*) e sândalo amyris (*Amiris balsamifera*) foram produzidos pela Oficina de ervas<sup>®</sup>. O flavorizante sintético de maracujá foi produzido pela Proquimios<sup>®</sup>.

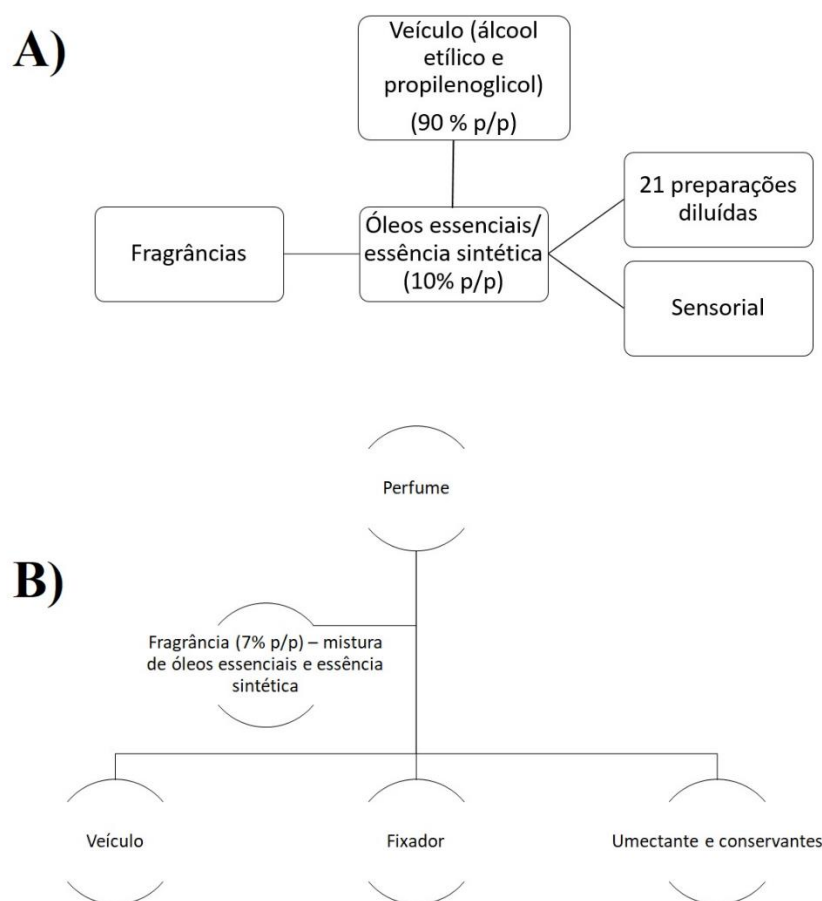
Os óleos de rizoma de tiririca (*Cyperus rotundus*) e de laranja doce (*Citrus sinensis*) foram obtidos pelo método do arraste de vapor. Para isso, 100 g de material vegetal dessas espécies foram adicionados a um frasco de fundo plano juntamente com 600 mL de água purificada. A extração do óleo foi feita em aparelho de Clevenger. Todos os óleos essenciais foram armazenados sob refrigeração para assegurar a estabilidade química.

### **Seleção da fragrância e formulação do perfume**

Inicialmente, foi preparado o veículo constituído por 95% de etanol absoluto e 5% de propilenoglicol. Posteriormente, soluções neste veículo foram preparadas contendo 10% de cada um dos óleos essenciais de origem natural (adquiridos comercialmente ou preparados por hidrodestilação), bem como solução contendo 10% do flavorizante sintético (essência de maracujá) (Figura 1a). Essas soluções

foram armazenadas sob refrigeração por três dias e foram posteriormente usadas para avaliação das características sensoriais de cada uma das matérias-primas em isolado. A avaliação sensorial foi realizada pelos próprios pesquisadores.

*Figura 1 – Seleção da fragrância (Figura 1a) e formulação do perfume (Figura 1b).*



Após a análise preliminar dos componentes aromáticos, realizada de modo separado, as soluções alcólicas preparadas foram combinadas em 21 misturas com diferentes proporções. Estas misturas foram denominadas como formulações de F1 a F21, buscando uma composição mais agradável aos sentidos dos pesquisadores (Tabela 1).



Por fim, a formulação do perfume foi definida com base na mistura da fragrância selecionada (mistura de óleos essenciais e essência sintética, 7% p/p), com o veículo composto de álcool etílico, acrescentando o triclosano (conservante microbiológico), galoxide (fixador) e propilenoglicol (umectante), totalizando 93% p/p (Figura 1b). Após a mistura, a preparação foi mantida ao abrigo da luz sob refrigeração por 30 dias. Finalmente, a formulação resfriada (0 a 5 °C) foi filtrada e envasada.

### **Análise por cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massa (CG-EM)**

Os componentes da fragrância foram identificados por CG-EM de acordo com uma metodologia adaptada (KLOPELL, FERNANDO CANANILEMOS *et al.*, 2007) . A identificação foi feita pela determinação das taxas de retenção, comparadas com dados da literatura (ADAMS, 2007) e bancos de dados da biblioteca *Wiley*. A análise cromatográfica foi realizada usando um cromatógrafo Shimadzu® QP2010 acoplado a um espectrômetro de massa. Foi usada a coluna DB-5MS (5% fenil, 95% metilpolisiloxano) com dimensões de 30 m × 0,25 mm × 0,25 mm. O gás de arraste foi hélio, com fluxo de 1mL/min, pressão de 57,5 kPa. O forno foi programado em uma rampa de temperatura, variando de 60 a 230 °C com uma taxa de aquecimento de 3 °C/min. Os espectros foram obtidos por impacto de elétrons a 70 eV.

### **Caracterização físico-química**

O pH da formulação da fragrância selecionada foi determinado usando pHmetro Tecnopon®, modelo MPA-210, previamente calibrado com soluções tampão padrão de pH 4,0 e 7,0. A relação massa-volume do produto foi determinada por picnometria, em que densidade relativa foi analisada usando a densidade da água purificada como referência. Todas as análises foram realizadas em triplicata.

**Tabela 1** - Formulações de fragrância analisadas na etapa de desenvolvimento.

Formulação	Componente (Composição, % v/v)*
<b>F1</b>	1 (27,0%); 2 (19,0%); 3 (27,0%); 4 (13,5%); 7 (13,5%)
<b>F2</b>	1 (31,3%); 2 (21,8%); 3 (31,3%); 4 (7,8%); 7 (7,8%)
<b>F3</b>	1 (33,3%); 2 (20,0%); 3 (40,0%); 4 (6,7%)
<b>F4</b>	1 (36,4%); 2 (18,2%); 3 (43,6%); 4 (1,8%)
<b>F5</b>	1 (38,5%); 2 (19,2%); 3 (38,5%); 4 (3,8%)
<b>F6</b>	1 (40,0%); 2 (12,0%); 3 (40,0%); 5 (8,0%)
<b>F7</b>	1 (37,0%); 2 (29,6%); 3 (29,6%); 4 (1,9%); 5 (1,9%)
<b>F8</b>	1 (37,3%); 2 (29,9%); 3 (29,9%); 4 (1,0%); 5 (1,9%)
<b>F9</b>	1 (35,0%); 2 (28,0%); 3 (17,5%); 4 (1,0%); 5 (1,7%), 8 (16,8%)
<b>F10</b>	1 (35,0%); 2 (28,0%); 3 (17,5%); 4 (0,3%); 5 (1,7%), 8 (17,5%)
<b>F11</b>	1 (38,9%); 2 (31,1%); 3 (19,5%); 8 (9,7%); 9 (0,8%)
<b>F12</b>	2 (84,0%); 5 (2,5%); 7 (3,6%); 8 (4,1%); 10 (5,8%)
<b>F13</b>	2 (88,5%); 5 (2,6%); 7 (3,5%); 8 (4,4%); 10 (1,0%)
<b>F14</b>	1 (27,8%); 6 (1,4%); 7 (13,9%); 10 (1,4%); 11 (55,5%)
<b>F15</b>	1 (35,3%); 6 (1,8%); 7 (17,7%); 10 (1,8%); 11 (43,4%)
<b>F16</b>	2 (68,0%); 7 (5,8%); 8 (19,4%); 10 (6,8%)
<b>F17</b>	2 (38,5%); 7 (19,2%); 9 (1,9%); 10 (1,9%); 11 (38,5%)
<b>F18</b>	2 (35,4%); 7 (22,1%); 8 (1,8%); 9 (3,5%); 10 (1,8%); 11 (35,4%)
<b>F19</b>	2 (35,1%); 7 (21,9%); 8 (2,6%); 9 (3,5%); 10 (1,8%); 11 (35,1%)
<b>F20</b>	2 (35,1%); 5 (1,8%); 7 (26,2%); 10 (1,8%); 11 (35,1%)
<b>F21</b>	2 (43,0%); 5 (1,0%); 7 (27,0%); 8 (3,2%); 9 (4,3%); 11 (2,5%)

\*Composição: 1, *A. balsamifera*; 2, *C. rotundus*; 3, *J. communis*; 4, *C. citratus*; 5, *L. hybrida*; 6, *B. dracunculifolia*; 7, *C. limon*; 8, *C. sinensis*; 9, *S. sclarea*; 10, Flavorizante sintético do tipo essência de maracujá; 11, *P. cablin*.





## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na etapa inicial para definição da mistura de óleos essenciais que iriam compor a fragrância, avaliaram-se individualmente as características odoríferas de cada óleo essencial e de algumas das suas possíveis combinações. As misturas foram realizadas baseando-se no pressuposto de que os óleos utilizados apresentam características sensoriais que permitem classificá-los em grupos odoríferos como amadeirados (*A. balsamifera*), cítricos (*C. limon* e *C. sinensis*) e florais (*L. hybrida*) (CABRAL *et al.*, 2010; CALKIN; JELLINEK, 1994; GONÇALVES *et al.*, 2018; SCHILLING *et al.*, 2010). Posteriormente, as 21 diferentes misturas de óleos essenciais diluídas no veículo foram analisadas (Tabela 1). Não houve sucesso na associação dos óleos *C. rotundus*, *C. citratus* e *J. communis*, sendo o sensorial reprovado unanimemente pelos pesquisadores. A partir de então, buscou-se suavizar o sensorial amadeirado da fragrância com a inclusão dos óleos de *C. limon*, *C. sinensis*, *L. hybrida* e essência sintética de maracujá. Nesta estratégia, o sensorial das fragrâncias atendeu às expectativas dos pesquisadores, e a formulação F15 foi selecionada para o desenvolvimento de um produto cosmético do tipo perfume. A composição da formulação de perfume incluiu a mistura de óleos essenciais e essência sintética denominada como fragrância F15 (7%), fixador (1%), conservante microbiano (1%) e veículo (q.s.p. 100%). A caracterização físico-química, cujo objetivo é fornecer especificações para a análise de controle de qualidade, indicou densidade de  $0,9499 \pm 0,0005$  g/mL e pH de  $7,43 \pm 0,01$ .

CG-EM é uma técnica que permite a caracterização da composição de substâncias voláteis em matrizes complexas, tais como produtos naturais e formulações de fragrâncias (ESPINA *et al.*, 2011; HART *et al.*, 2000; SONWA; KONIG, 2001). Sendo assim, a técnica representa uma ferramenta importante no processo de formulação de um perfume, visto que muitas vezes as matérias-primas utilizadas em perfumaria, sejam elas de origem sintética ou natural, podem ser separadas e identificadas usando CG-EM. Também é importante destacar a utilidade do CG-EM no



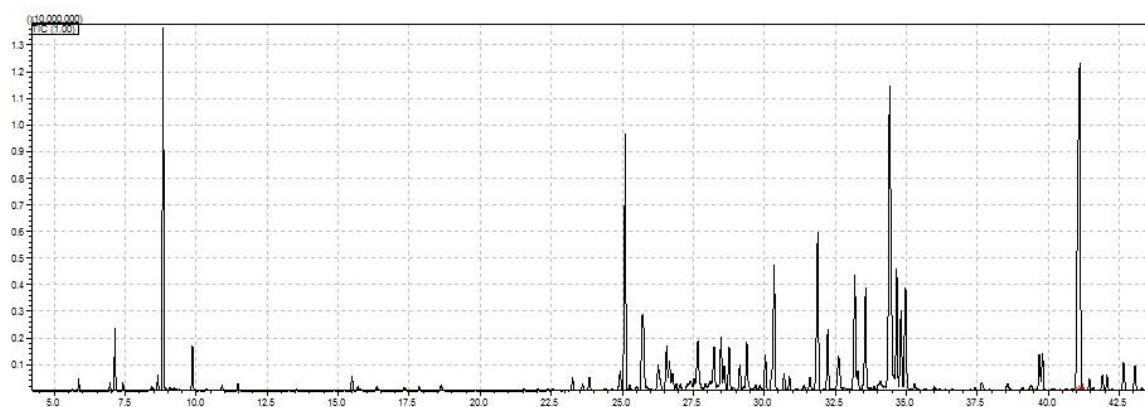
controle de qualidade, de modo a caracterizar o perfil de substâncias qualitativo e quantitativo presentes nos produtos acabados (ABEDI; TALEBPOUR; JAMECHENARBOO, 2018).

Os óleos essenciais possuem constituintes aromáticos, de natureza volátil, de baixo peso molecular, de origem terpenoide ou não terpenoide, que podem ser analisados facilmente por CG-EM. Esses compostos são hidrocarbonetos e seus derivados oxigenados. Alguns também podem conter derivados nitrogenados ou contendo átomos de enxofre. Estas substâncias podem existir na forma de álcoois, ácidos, ésteres, epóxidos, aldeídos, cetonas, aminas, sulfetos ou outros. Apesar de não serem tão comuns, halogênios como bromo e cloro podem ser detectados em óleos essenciais oriundos de algas marinhas. Os terpenos são sintetizados por um arranjo do tipo "cabeça-a-cauda", com duas ou mais unidades de isopreno. Os terpenos mais simples são hemi e monoterpenos, respectivamente, com cinco e dez átomos de carbono. Eles podem ser alifáticos, alicíclicos, bi- ou tricíclicos, com vários graus de instauração, contendo até três ligações duplas. Os sesquiterpenos contêm três unidades de isopreno, os diterpenos contêm quatro, os triterpenos contêm seis e assim por diante. Os diterpenos (C<sub>20</sub>) raramente são encontrados em óleos voláteis. Além disso, fenilpropanoides, ácidos graxos e seus ésteres ou seus produtos de degradação também podem ser detectados em óleos essenciais (BAŞER; DEMIRCI, 2011; RAUT; KARUPPAYIL, 2014).

A análise dos componentes voláteis da formulação de perfume, incorporando a fragrância F15 (Figura 2), evidenciou a presença de 36 picos no cromatograma obtido por CG-EM, com tempos de retenção variando entre 5,87 a 43,00 minutos. Os picos com tempo de retenção de aproximadamente 41,11 minutos correspondem ao veículo e ao fixador (galaxolide). A integração destes picos não foi realizada para fins de determinação da composição percentual dos componentes voláteis presentes na formulação do perfume. Os compostos identificados foram (seguidos da indicação do índice de retenção observado em coluna capilar expresso entre parênteses)  $\alpha$ -pineno, sabineno,  $\beta$ -pineno, mirceno, *p*-cimeno, limoneno, *v*-terpineno, terpinoleno, linalol,

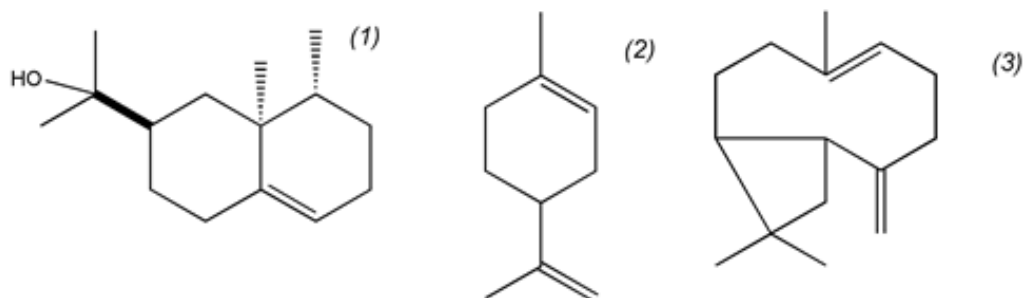
terpineol,  $\alpha$ -copaeno,  $\beta$ -patcholeno,  $\beta$ -elemeno,  $\alpha$ -cedreno,  $\beta$ -cariofileno, thujopseno,  $\alpha$ -humuleno,  $\alpha$ -patchouleno,  $\nu$ -curcumeno,  $\alpha$ -zingibereno,  $\alpha$ -bulneseno,  $\beta$ -dihidroagarofurano,  $\beta$ -bisaboleno,  $\beta$ -sesquifelandreno, selina-3,7(11)-dieno, elemol, germacreno-b, guaiol,  $\alpha$ -cedrol, 10-epi- $\nu$ -eudesmol,  $\nu$ -eudesmol, valerianol, 10-epi- $\alpha$ -eudesmol, bulnesol e patchouli álcool. Estes resultados estão compilados na Tabela 2.

**Figura 2** – Perfil cromatográfico da análise do perfume por CG-EM.



O perfume apresentou três substâncias majoritárias (Figura 3). O valerianol, um sesquiterpeno identificado no óleo essencial de *Valeriana officinalis* (G.JOMMI *et al.*, 1967) e presente no óleo essencial de *A. balsamifera* (BEEK, VAN *et al.*, 1989) é a substância em maior quantidade no produto (12,4%), seguido por limoneno (6,7%), um monoterprenoide monocíclico com aroma fresco e cítrico presentes nos óleos de *C. limon* (ESPINA *et al.*, 2011) e *B. dracunculifolia* (CASSEL *et al.*, 2000) e  $\beta$ -cariofileno (6,7%), um monoterpreno presente no óleo de *P. cablin* (SUNDARESAN *et al.*, 2009).

**Figura 3** - Estruturas químicas dos componentes voláteis majoritários identificados do perfume: Valerianol<sup>15</sup> (1), limoneno<sup>9</sup> (2),  $\beta$ -cariofileno<sup>9</sup> (3).



A análise das substâncias identificadas mostrou que 22,0% da área total dos picos foi composta de substâncias pertencentes ao óleo essencial de *A. balsamifera*, como o valerianol, 10-epi- $\gamma$ -eudesmol,  $\gamma$ -eudesmol e o 10-epi- $\alpha$ -eudesmol (BEEK, VAN *et al.*, 1989). O óleo de *P. cablin* contribuiu com 9,7%, sendo as substâncias mais relevantes o patchulol e o  $\beta$ -cariofileno (SUNDARESAN *et al.*, 2009; TAYLOR *et al.*, 2009).

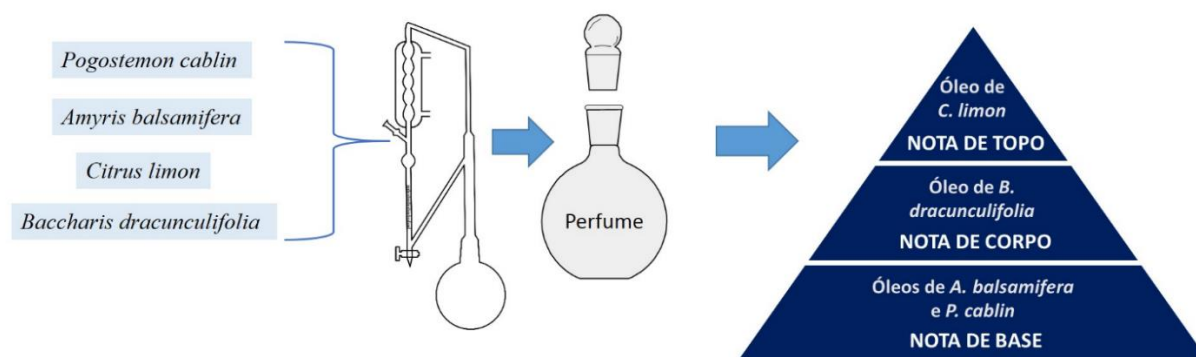
Constituintes descritos somente no óleo de *B. dracunculifolia* responderam por 3,3% dos componentes voláteis do perfume, sendo eles guaiol,  $\alpha$ -humuleno e  $\alpha$ -copaeno (CASSEL *et al.*, 2000). As substâncias  $\alpha$ -pineno,  $\beta$ -pineno e limoneno correspondem a 7,9% da fração do volátil do perfume, sendo componentes conhecidos dos óleos de *B. dracunculifolia* e *C. limon* (CASSEL *et al.*, 2000; ESPINA *et al.*, 2011). O óleo de *C. limon* ainda participa da composição do perfume, com as substâncias como sabineno, mirceno,  $\rho$ -cimeno,  $\gamma$ -terpineno, terpinoleno, terpineol, linalol e thujopseno com porcentagem de 5,1% da formulação de perfume (ESPINA *et al.*, 2011).

O perfume ainda apresentou quatro substâncias, denominadas como  $\alpha$ -cedreno,  $\gamma$ -curcumeno  $\alpha$ -cedrol e bulnesol. Estas substâncias não são descritas em nenhum dos óleos utilizados. Foi relatada em 1962 a síntese de patchulol e guaiol a partir do bulnesol, de modo que é razoável supor que este último possa ser um intermediário da síntese do patchulol no óleo de *P. cablin* (BATES; SLAGEL, 1962).

A volatilidade, juntamente ao peso molecular, são os determinantes mais importantes na retenção de uma substância em uma corrida por cromatografia gasosa (ABO-ALTEMEN *et al.*, 2019; HART *et al.*, 2000; TEIXEIRA; RODRÍGUEZ; RODRIGUES, A. E., 2010). Tal propriedade físico-química é de extrema relevância em perfumaria, permitindo classificar as substâncias de um perfume em três grupos: as notas de cabeça ou topo (substâncias de alta volatilidade, responsáveis pela primeira impressão da fragrância); notas de corpo (substâncias de média volatilidade, que caracterizam o perfume) e as notas de fundo (substâncias de baixa volatilidade, que são sentidas após dissipação das notas de cabeça e corpo) (MATA; GOMES; RODRIGUES, A. E., 2005; TEIXEIRA; RODRÍGUEZ; RODRIGUES, A. E., 2010).

A análise dos tempos de retenção das substâncias identificadas permitiu sugerir a classificação das substâncias presentes no óleo de *C. limon* como notas de cabeça. Os constituintes do óleo de *B. dracunculifolia* se inseriram dentro das notas de corpo e os óleos de *P. cablin* e *A. balsamifera* foram classificados como notas de base (Figura 4).

**Figura 4** - Estrutura piramidal provável do perfume desenvolvido.



**Tabela 2** - Compostos identificados por CG-EM.

<b>Pico</b>	<b>Composto</b>	<b>t<sub>R</sub></b>	<b>IR<sub>obs</sub> (IR<sub>ref</sub>)</b>	<b>Área relativa (%)</b>
1	α-pinene	5,87	932 (939)	0,16
2	sabinene	6,96	971 (976)	0,11
3	β-pinene	7,14	977 (980)	0,99
4	mircene	7,43	988 (991)	0,13
5	p-cimene	8,65	1024 (1023)	0,29
6	limonene	8,83	1028 (1031)	6,70
7	ν-terpinene	9,87	1056 (1062)	0,84
8	terpinolene	10,91	1084 (1088)	0,19
9	linalool	11,47	1099 (1098)	0,13
10	terpineol	15,49	1194 (1189)	0,28
11	α-copaene	23,25	1373 (1376)	0,33
12	β-patchoulene	23,61	1381 (1380)	0,19
13	β-elemeno	23,85	1387 (1391)	0,29
14	α-cedrene	24,39	1413 (1409)	0,39
15	β-caryophyllene	25,11	1417 (1418)	6,72
16	thujopsene	25,72	1432 (1429)	3,12
17	α-humulene	26,57	1452 (1454)	1,21
18	α-patchoulene	26,78	1457 (1456)	0,51
19	ν-curcumin	27,53	1475 (1480)	0,19
20	α-curcumin	27,67	1478 (1483)	1,21
21	α-zingiberene	28,24	1492 (1495)	1,15
22	α-bulnesene	28,48	1497 (1505)	1,58
23	β-dihydro-agarofuran	28,59	1501 (1496)	0,73
24	β-bisabolene	28,76	1505 (1507)	1,23
25	β-sesquiphellandrene	29,39	1521 (1524)	1,41
26	selina-3,7(11)-dien	30,04	1537 (1542)	0,94
27	elemol	30,35	1545 (1549)	3,65
28	germacrene-b	30,70	1554 (1556)	0,50
29	guaiol	32,24	1592 (1595)	1,75
30	α-cedrol	32,62	1601 (1596)	1,44
31	10-epi-ν-eudesmol	33,20	1618(1619)	3,41
32	ν-eudesmol	33,57	1627 (1630)	2,99
33	valerianol	34,44	1650 (1655)	12,47
34	10-epi-α-eudesmol	34,67	1657 (1658)	3,18
35	bulnesol	34,82	1661 (1666)	2,15
36	patchouli alcohol	34,98	1665	2,98

IR<sub>obs</sub> - Índice de retenção observado na coluna capilar DB-5; IR<sub>ref</sub> = Índice de retenção de referência



## CONCLUSÃO

A partir deste trabalho, foi possível desenvolver um produto inovador com potencial aplicação em perfumaria, baseado na associação de óleos essenciais (*C. limon*, *B. dracunculifolia*, *A. balsamifera* e *P. cablin*) e um flavorizante sintético (essência de maracujá). Este produto deverá ainda passar por estudos sensoriais de aceitação, com vistas a confirmar o seu potencial de mercado, bem como caracterizar o seu perfil de segurança. É importante destacar que fontes naturais de odores, em especial os óleos essenciais, ainda são um manancial de substâncias pouco exploradas, com potencial uso no desenvolvimento de novas fragrâncias que podem ser incorporadas em formulações de perfumes. Assim, torna-se importante explorar e pesquisar produtos naturais em perfumaria, sobretudo aqueles oriundos da biodiversidade brasileira.

## AGRADECIMENTOS

Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado da Bahia (edital 005/2011 FAPESB), UFBA, UFOP e Unifal-MG.

## REFERÊNCIAS

- ABEDI, G.; TALEBPOUR, Z.; JAMECHENARBOO, F. The survey of analytical methods for sample preparation and analysis of fragrances in cosmetics and personal care products. **Trends in Analytical Chemistry**, v. 102, p. 41–59, 2018.
- ABO-ALTEMEN, R. A. *et al.* GC-MS analysis and chemical composition identification of *Cyperus rotundus* L. from Iraq. **Energy Procedia**, v. 157, p. 1462–1474, 2019.
- ABRAMSON, C. I.; CHICAS-MOSIER, A. M. Learning in plants: Lessons from *Mimosa pudica*. **Frontiers in Psychology**, v. 7, n. March, p. 1–9, 2016.
- ADAMS, R. P. **Identification of essential oil components by gas chromatography/mass spectrometry**. 4. ed. Carol Stream: Allured Pub Corp, 2007.
- BAŞER, K. H. C.; DEMIRCI, F. **Essential oils**. Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology. [S.l.]: John Wiley & Sons, Inc., p. 1–37, 2011.



BATES, R. B.; SLAGEL, R. C. Conversion of bulnesol to patchouli alcohol, guaiol, and “ $\delta$ -guaiene”. **Journal of the American Chemical Society**, v. 84, n. 7, p. 1307–08, 1962.

BEEK, T. A. VAN *et al.* Essential oil of *Amyris balsamifera*. **Phytochemistry**, v. 28, n. 7, p. 1909–1911, 1989.

CABRAL, L. M. C. *et al.* **Handbook of fruit and vegetable flavors**. In: HUI, Y. H. *et al.* (Org.). 1. ed. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc., p. 1120, 2010.

CALKIN, R. R.; JELLINEK, J. S. **Perfumery: Practice and Principles**. 1. ed. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc., 1994.

CASSEL, E. *et al.* Extraction of *Baccharis* oil by supercritical CO<sub>2</sub>. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 39, n. 12, p. 4803–4805, 2000.

DEANS, S. G.; RITCHIE, G. Antibacterial properties of plant essential oils. **International Journal of Food Microbiology**, v. 5, n. 2, p. 165–180, 1987.

ESPINA, L. *et al.* Chemical composition of commercial citrus fruit essential oils and evaluation of their antimicrobial activity acting alone or in combined processes. **Food Control**, v. 22, n. 6, p. 896–902, 2011.

FACCIO, G. Plant complexity and cosmetic innovation. **iScience**, v. 23, n. 8, p. 101358, 2020.

G. JOMMI *et al.* The structure of valerianol, a sesquiterpenic alcohol of eremophilane type from valeriana oil. **Tetrahedron Letters**, v. 8, n. 8, p. 677–681, 1967.

GONÇALVES, D. *et al.* Effect of *Citrus sinensis* essential oil deterpenation on the aroma profile of the phases obtained by solvent extraction. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, v. 116, p. 166–175, 2018.

HART, P. H. *et al.* Terpinen-4-ol, the main component of the essential oil of *Melaleuca alternifolia* (tea tree oil), suppresses inflammatory mediator production by activated human monocytes. **Inflammation Research**, v. 49, n. 11, p. 619–626, 2000.

HOMER, L. E. *et al.* Natural variation in the essential oil content of *Melaleuca alternifolia* Cheel (Myrtaceae). **Biochemical Systematics and Ecology**, v. 28, n. 4, p. 367–382, 2000.

JUGREET, B. S. *et al.* Chemistry, bioactivities, mode of action and industrial applications of essential oils. **Trends in Food Science & Technology**, v. 101, p. 89–105, 2020.





KLOPELL, FERNANDO CANANILEMOS, M. et al. Nerolidol, an antiulcer constituent from the essential oil of *Baccharis dracunculifolia* DC (Asteraceae). *Zeitschrift für Naturforschung C. A Journal of Biosciences*, v. 62, n. 7-8, p. 537-542, 2007.

LEE, J.; TRINH, C. T. Towards renewable flavors, fragrances, and beyond. *Current Opinion in Biotechnology*, v. 61, p. 168-180, 2020.

MATA, V. G.; GOMES, P. B.; RODRIGUES, A. E. Perfumery ternary diagrams (PTD): a new concept applied to the optimization of perfume compositions. *Flavour and Fragrance Journal*, v. 20, n. 5, p. 465-471, 2005.

MATTOS, L. H. S.; SPEZIALI, M. G. Patent landscape: Technology development behind science in the flavor and fragrances (F&F) area. *World Patent Information*, v. 51, p. 57-65, 2017.

RAUT, J. S.; KARUPPAYIL, S. M. A status review on the medicinal properties of essential oils. *Industrial Crops & Products*, v. 62, p. 250-264, 2014.

SCHILLING, B. *et al.* Investigation of odors in the fragrance industry. *Chemoecology*, v. 20, p. 135-147, 2010.

SERRA, S. Recent Developments in the Synthesis of the Flavors and Fragrances of Terpenoid Origin. In: ATTA-UR-RAHMAN (Org.). *Studies in Natural Products Chemistry*. Amsterdam: Elsevier B.V., v. 46, p. 201-226, 2015.

SONWA, M. M.; KONIG, W. A. Chemical study of the essential oil of *Cyperus rotundus*. *Phytochemistry*, v. 58, n. 5, p. 799-810, 2001.

SUNDARESAN, V. *et al.* Composition and comparison of essential oils of *Pogostemon cablin* (Blanco) Benth. (Patchouli) and *Pogostemon travancoricus* Bedd. var. *travancoricus*. *Journal of Essential Oil Research*, v. 21, n. 3, p. 220-221, 2009.

TAYLOR, P. *et al.* Composition and comparison of essential oils of composition and comparison of essential oils of *Pogostemon cablin* (Blanco) Benth. (Patchouli) and *Pogostemon travancoricus* Bedd. var. *travancoricus*. *Journal of Essential Oil Research*, v. 21, n. 3, p. 220-222, 2009.

TEIXEIRA, M. A.; RODRÍGUEZ, O.; RODRIGUES, A. E. Perfumery radar: A predictive tool for perfume family classification. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 49, n. 22, p. 11764-11777, 2010.

Received: 05 September 2020

Accepted: 10 September 2020

Published: 02 January 2021