

Relatório de Análise

Solicitante:

A Graça de Maria

Análise:

Perfil cromatográfico de óleo essencial

Amostra:

Óleo essencial de Patchouli – *Pogostemon cablin*

ID amostra: Pogostemon cablin

Lote: 01

Tipo de Extração: Arraste a vapor.

Data da Extração: 01/02/2021

Técnica de análise:

Cromatografia em fase gasosa acoplada a espectrometria de massas

Equipamento da marca *Agilent*, Modelo MSD 5977B.

Método:

Parâmetros de análise cromatográfica: Temperatura do injetor 280°C, Volume de injeção: 1µL, Modo de injeção: *Split (1:20)*, Fluxo: 1 mL min⁻¹, , Gás de arraste: Hélio, Coluna capilar: ZB-5MS (60mx0.25mmx0.25µm), Gradiente de temperatura do forno: temperatura inicial 70°C - 1min. taxa 1°C/min até 115°C e taxa 5°C/min até 270°C - 5min. Temperatura do detector de massas: 280°C, Temperatura da fonte de ionização: 270°C e Modo de aquisição: *scan*

Considerações:

As identificações dos compostos são obtidas através da comparação dos espectros de massas das amostras com os da biblioteca NIST17.L, sendo apresentado na tabela de resultados o grau de similaridade de cada identificação. O cálculo do percentual relativo de cada substância identificada na amostra é realizado com base na área de cada pico do cromatograma, sendo o somatório das áreas considerado 100%. Para o cálculo de percentual considera-

se os picos dos compostos eluidos da coluna e identificados por similaridade e os picos eluidos da coluna não identificados devido à baixa similaridade, todos oriundos da amostra.

Resultados:

Na tabela 1 apresenta-se a lista de compostos identificados, suas concentrações relativas, grau de similaridade com a biblioteca de compostos referência, o tempo de retenção na coluna e o código de registro no CAS.

Na figura 1 apresenta-se o cromatograma da amostra analisada.

Tabela 1. Lista de compostos identificados na amostra de óleo essencial.

| Nome | Área Relativa, % | Similaridade, % | Tempo de Retenção, min | **CAS# |
|------------------------------|------------------|-----------------|------------------------|------------|
| <i>α-Pineno</i> | 0,24 | 96,76 | 10,55 | 80-56-8 |
| <i>β-Pineno</i> | 0,51 | 97,71 | 12,67 | 18172-67-3 |
| <i>β-Patchouleno</i> | 6,12 | 98,55 | 49,92 | 514-51-2 |
| <i>β-Elemeno</i> | 1,28 | 97,98 | 50,49 | 515-13-9 |
| <i>Cicloseicheleno</i> | 1,25 | 97,51 | 52,12 | 52617-34-2 |
| <i>β-Cariofileno</i> | 5,76 | 99,56 | 52,48 | 87-44-5 |
| <i>α-Guaieno</i> | 22,45 | 98,35 | 53,55 | 3691-12-1 |
| <i>Seicheleno</i> | 10,28 | 99,73 | 54,18 | 20085-93-2 |
| <i>Humuleno</i> | 0,64 | 98,11 | 54,57 | 6753-98-6 |
| <i>α-Patchouleno</i> | 6,42 | 99,40 | 54,83 | 560-32-7 |
| <i>Ciclosativeno</i> | 2,63 | 94,94 | 54,98 | 22469-52-9 |
| <i>γ-Patchouleno</i> | 1,70 | 97,43 | 55,17 | 508-55-4 |
| <i>β-Selineno</i> | 0,78 | 97,99 | 56,24 | 17066-67-0 |
| <i>Acifileno</i> | 3,76 | 98,37 | 56,56 | 87745-31-1 |
| <i>α-Bulneseno</i> | 19,44 | 99,46 | 56,84 | 3691-11-0 |
| <i>α-Maalieno</i> | 0,24 | 93,87 | 57,53 | 489-28-1 |
| <i>Patchoulol</i> | 15,62 | 99,19 | 62,77 | 5986-55-0 |
| *Compostos não identificados | 0,88 | | | |
| Total | 100 | | | |

* Compostos com baixa similaridade com os espectros da Biblioteca devido a baixa concentração e/ou coeluição da coluna.

**O registro CAS de um composto químico, é um número com um registro único no banco de dados do *Chemical Abstracts Service* que atribui esses números a cada produto químico que é descrito na literatura.

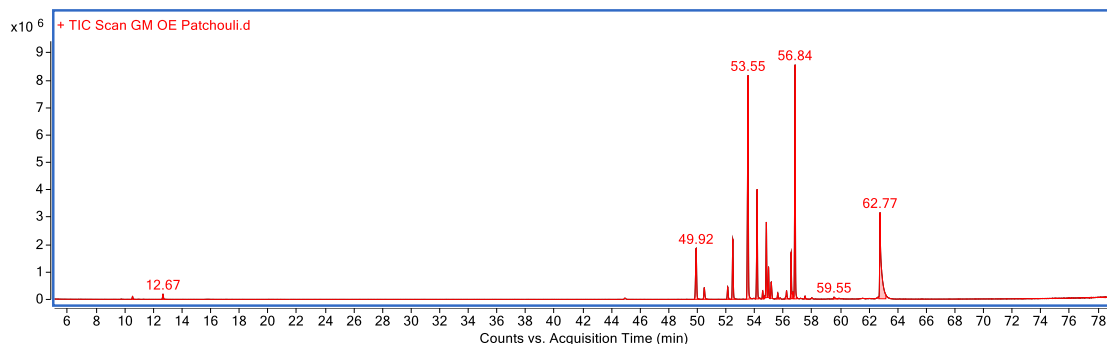


Figura 1: Cromatograma da amostra de óleo essencial.

Anotação de Função Técnica (AFT): 188379 CRQ V

Assinatura responsável técnico: Rosana Schneider

Rosana de Cassia de Souza Schneider

CRQ 5° Região - n° 05100730

Santa Cruz do Sul, 01 de Junho de 2021.