REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

COMPARAÇÃO DO PERFIL QUÍMICO DE DECOCTOS DE ORÉGANO (*Origanum vulgare*) PREPARADOS EM DIFERENTES TEMPOS DE EXTRAÇÃO A PARTIR DE AMOSTRAS SECAS EM ESTUFA E EM CONDIÇÕES NATURAIS

COMPARISON OF THE CHEMICAL PROFILE OF OREGANO (Origanum vulgare) DECOCTS PREPARED AT DIFFERENT EXTRACTION TIMES FROM OVEN-DRIED SAMPLES AND IN NATURAL CONDITIONS

COMPARACIÓN DEL PERFIL QUÍMICO DE DECOCCIONES DE ORÉGANO (Origanum vulgare) PREPARADAS EN DIFERENTES TIEMPOS DE EXTRACCIÓN A PARTIR DE MUESTRAS SECADAS AL HORNO Y EN CONDICIONES NATURALES

Marcella Uxa Jacob Werneck Rocha[1], Fátima de Cássia Oliveira Gomes[1], Ildefonso Binatti[1], Esther Maria Ferreira Lucas[1]

e666534
https://doi.org/10.47820/recima21.v6i6.6534

PUBLICADO: 6/2025

RESUMO

Além de suas características alimentícias e organolépticas, vários condimentos apresentam fitofármacos. A maioria dessas especiarias é comercializada desidratada, para estender seu prazo de validade e minimizar o custo de estocagem e transporte. Porém, deve-se tomar o cuidado durante a desidratação para que este processo não provoque alterações nos metabólitos bioativos presentes, afetando suas propriedades medicinais. Pelo fato de as folhas desidratadas do orégano serem amplamente empregadas na produção de chás, este trabalho investigou se a secagem e o aquecimento, durante a extração, poderiam promover alterações nos metabólitos secundários presentes. A secagem em estufa a 40ºC e em condições ambientes foi realizada com amostras das partes aéreas de orégano. Os materiais desidratados deram origem a decoctos, preparados com variações no período de decocção que, posteriormente, foram analisados por Espectrometria de Massas com Ionização por Electrospray (ESI-MS). A aplicação de processos de secagem distintos levou a obtenção de perfis químicos diferentes, enquanto a variação do tempo de decocção não promove variações significantes. Decoctos das folhas secas em condições ambientes resultaram em espectros nos quais os sinais mais intensos corresponderam ao ácido rosmarínico (m/z=359), um fitofármaco, e ao ácido aristolóquico (m/z= 381) um metabólito tóxico. O ácido quínico foi o metabólito majoritário, encontrado nos extratos das folhas secas em estufa. Este composto é um importante precursor de ácidos clorogênicos (m/z=191).

PALAVRAS-CHAVE: *Origanum vulgarum*. ESI-MS. Perfil químico.

ABSTRACT

In addition to the substances that give them flavor, spices also contain bioactive substances that can give them medicinal properties. Dehydration is a resource that promotes increased shelf life and reduces the storage and transportation costs for spices and is widely used in both industrial and artisanal products. However, the heating involved in dehydration can affect the chemical profile of spices, promoting changes in their pharmacological properties. Among the spices used for medicinal purposes, oregano is one of the most widespread. In this work, it was investigated how the chemical profile of oregano decoctions can be affected according to the variation of the leaf drying method and the decoction time. Oregano samples were dried in ambient conditions and in an oven at 40ºC. From each of the dehydrated materials, aqueous extracts were prepared by decoction, varying the heating time. The decoctions were analyzed by Electrospray Ionisation Mass Spectrometry (ESI-MS). The chemical profile of the decocts did not present significant variations

[1] Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais - CEFET-MG/Departamento de Química.

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

according to the variation in decoction time, but, in relation to the drying method, the observed variations were relevant in relation to the presence of bioactive metabolites. In the spectra obtained from the leaves dried under ambient conditions, the most intense signals found correspond to rosmarinic acid (m/z=359), which has pharmacological properties, and aristolochic acid (m/z= 381), which has toxic properties. In the decoctions obtained from oven-dried leaves, the main metabolite was quinic acid, an important precursor of chlorogenic acids (m/z=191).

KEYWORDS: *Origanum vulgarum. ESI-MS. Chemical profile.*

RESUMEN
Además de sus propiedades alimentarias y aromáticas, algunas especias también contienen sustancias bioactivas. La mayoría de estas especias se comercializan deshidratadas para aumentar su vida útil y reducir los costes de almacenamiento y transporte. Sin embargo, hay que tener cuidado de que el proceso de deshidratación no provoque alteraciones del perfil químico que afecten a sus propiedades farmacológicas. Teniendo en cuenta el uso generalizado de hojas de orégano deshidratadas en la preparación de tés, este estudio investigó si el método de secado y el tiempo de decocción durante la extracción podían alterar el perfil químico de los extractos. Las muestras de orégano se secaron en condiciones ambientales y en un horno a 40oC. A partir de cada uno de los materiales deshidratados, se prepararon extractos acuosos por decocción, variando el tiempo de calentamiento. A continuación, las decocciones se analizaron mediante espectrometría de masas por ionización de electrospray (ESI-MS) en modo positivo y negativo. Se observó que la aplicación de diferentes métodos de secado dio lugar a muestras con perfiles químicos diferentes, mientras que la variación del tiempo de extracción para las muestras obtenidas utilizando el mismo método de secado no dio lugar a variaciones significativas. En los espectros obtenidos de las hojas secadas en condiciones ambientales, las señales más intensas encontradas corresponden al ácido rosmarínico (m/z=359), que tiene propiedades farmacológicas, y ácido aristolóquico (m/z= 381) que tiene propiedades tóxicas. En las decocciones obtenidas a partir de hojas secadas al horno, el principal metabolito era el ácido quínico, un importante precursor de los ácidos clorogénicos (m/z=191).

PALABRAS CLAVE*: Origanum vulgarum. ESI-MS. Perfil químico.*

INTRODUÇÃO

O progresso da ciência vem ocasionando um grande desenvolvimento na certificação científica das propriedades farmacológicas atribuídas às plantas medicinais. Na cultura popular, o a aplicação e formas de uso destas plantas é comumente transmitida oralmente, de geração para geração. Este conhecimento, embora seja valoroso, nem sempre é acompanhado de comprovação científica (Zejli, 2024). As ervas de pequeno porte, devido à facilidade de manejo e cultivo, são as mais utilizadas pela população (Rodrigues *et al.,* 2004).

O orégano, entre as diversas espécies herbáceas com aplicação na medicina, é uma erva que apresenta ampla abrangência mundial (Zejli, 2024). O Gênero *Origanum* pertence à família *Lamiaceae*, possuindo um número superior a 70 espécies. De modo geral, esta espécie é uma herbácea, perene, ereta, aromática, de hastes algumas vezes arroxeadas, de 30-50 cm de altura, nativa do Sul da Europa, adaptadas ao Brasil. Suas folhas são simples, esparso-pubescentes, de

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

1-2 cm de comprimento. Suas flores são esbranquiçadas, róseas ou violáceas, dispostas em glomérulos e reunidos em inflorescências paniculadas terminais (Lorenzi; Matos, 2021).

Na culinária, o orégano é um saborizante de carnes, massas, molhos e vegetais sendo predominantemente comercializado desidratado. Além disso, é consumido como chás, obtidos por decocção e/ou infusão, indicados nas patologias respiratórios e estomacais, cólicas menstruais, artrite e problemas urinários (Soltani *et al.*, 2020). Ensaios biológicos realizados com seus extratos já conduziram à validação científica de suas propriedades dose-dependentes: antimicrobiana, antioxidante, analgésica e anti-inflamatória (Zejli *et al.,* 2024).

Conforme citado por Soltani *et al.*, (2020) o orégano cultivado na Europa e na Ásia, apresenta, em sua fração volátil, uma composição rica em mono e sesquiterpenos: timol, γ-terpineno, carvacol, *p*-cimeno, β-bisaboleno, β-cariofileno, espatulenol, germancreno-D e sabinóis. O monoterpeno volátil α-terpineol é o principal componente, possuindo diversas ações biológicas, como antioxidante, anticancerígeno, anticonvulsivante, antiulceroso, anti-hipertensivo e antinociceptivo (Khaleel, 2018).

Já em sua fração fixa, os metabólitos presentes pertencem às classes dos compostos fenólicos, sendo destacados os: ácidos fenólicos simples, fenilpropanóides condensados e não condensados, ácidos fenólicos policíclicos glicosilados, flavonoides na forma de heterosídeos e aglicona, triterpenos e ácidos graxos. O principal componente que confere o odor característico do orégano é o ácido rosmarínico, um fenilpropanóide condensado para o qual já foram relatadas diversas ações farmacológicas: anineoplásico (Huang**,** 2006; Zhang, 2011), antidepressivo (Takeda, 2002), anti-inflamatório (Osakabe, 2004), anti-alérgico (Takano, 2004) antimicrobiano (Moreno, 2006), neuroprotetor (Ono, 2012), inibidor do vírus HIV-1 (Dubois, 2008), antioxidante e inibidor da peroxidação lipídica (Kosar, 2008).

Variações da composição em relação aos seus metabólitos secundários e da morfologia entre indivíduos de uma mesma espécie de orégano são muito comuns, sendo ocasionadas pela distribuição geográfica, clima, e estação do ano da coleta (Skoufogianni *et al.,* 2019). Estudo publicado por Klimiene *et al*., (2021) indica que o anabolismo de flavonóides por amostras de Orégano, cultivadas em clima temperado é significativamente favorecida por fósforo, potássio e magnésio e prejudicada por sódio, no solo. Grevsen *et al.,* (2009) relatam que a biossíntese de flavonóides é favorecida durante o estágio de floração da espécie, enquanto a biossíntese de ácidos fenólicos é favorecida no estágio quando as flores já se encontram abertas.

Mediante a relevância econômica e abrangência da utilização, há relatos, na literatura, sobre a variação da expressão dos metabólitos secundários do orégano conforme sua origem ou modo de preparo dos chás, mas estes estudos são realizados empregando cultivares oriundos da Ásia e Europa (Skoufogianni *et al.,* 2019). Mediante ao vasto uso do orégano desidratado no Brasil, torna-se interessante determinar como a secagem do vegetal afeta a composição química

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

e, consequentemente, interfere em sua bioatividade. Em função de sua administração como fitoterápico ser realizada principalmente através dos chás, torna-se importante verificar se o período em que o vegetal fica sob fervura influência na composição dos chás. Para tanto, amostras de *Origanum vulgarum* foram secas ao ambiente e estufa. Decoctos obtidos a partir dos materiais desidratados, variando-se o período de decocção, tiveram seu perfil químico determinado por ESI, e os *fingerprints* obtidos foram então comparados.

MÉTODOS

Coleta e tratamento do material vegetal

A coleta dos ramos de orégano foi realizada em outubro de 2022, em Belo Horizonte-MG nas coordenadas (-19.86180953748961,-43.9862451) pela manhã. Os caules foram separados das folhas manualmente.

Secagem das folhas

Uma amostra de 5,0g foi seca em estufa a 40 ºC e, a cada intervalo de 30 minutos, a amostra foi retirada da estufa e sua massa determinada até atingir massa constante. Uma amostra de 2,0g foi deixada sobre o vidro de relógio, exposta a luz e ventilação natural e, a cada intervalo de 24 horas, era pesada até atingir massa constante.

Preparo dos decoctos

Na preparação dos extratos por decocção, duas porções de 0,10g de cada uma das amostras secas em condições ambientes foram adicionadas a 10mL de água destilada e submetidas ao aquecimento, totalizando oito amostras. Assim que os sistemas entraram em ebulição e o aquecimento foi mantido por períodos diferentes para cada par de amostra (5, 10, 20 e 30 minutos). O mesmo procedimento foi aplicado para as amostras secas em estufa.

Após a decocção, sistemas foram deixados em repouso até atingirem a temperatura ambiente e filtrados, com o auxílio de uma pipeta Pasteur e algodão. As fases líquidas obtidas foram centrifugadas durante 10 minutos a 600rpm e o sobrenadante foi coletado e transferido para frascos âmbar.

Determinação do perfil químico das amostras por Espectrometria de Massas com Ionização por Electrospray (ESI-MS)

A análise da composição química dos decoctos foi realizada por Espectrometria de Massa com Ionização por Electrospray nos modos positivo e negativo, ao longo do intervalo de m/z 50-2000. O espectrômetro utilizado foi espectrômetro de massas LCQ FLEET *Thermo Scientific* equipado com ionizador por *electrospray* e analisador de massas de baixa resolução do tipo *ion*

trap. A diluição das amostras em metanol (1:9) foi realizada e estas foram bombeadas continuamente por uma seringa (Hamilton 500 mL) com um fluxo de 20 mL/min. A tensão de aplicação foi definida para 5 kV e a temperatura de dessolvatação a 275 ºC.

RESULTADOS

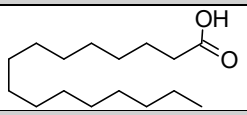
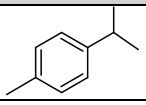
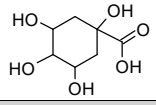
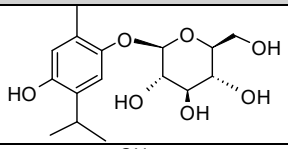
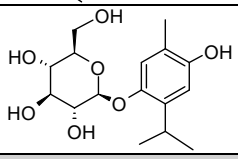
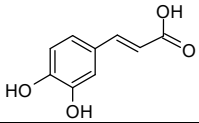
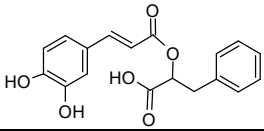
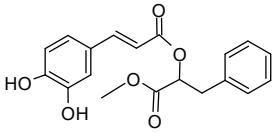
A secagem em condições ambiente partiu de amostras de 2,0g, que após 11 dias atingiu massa constante de 1,79g, implicando em uma perda de massa correspondente a 10,5%. A secagem em estufa partiu de amostras de 5,0g que após 9h atingiram a massa constante de 0,27g, resultando em 95% de redução de massa. Esta diferença na eficiência da remoção da água pode ser explicada pelo emprego do aquecimento na estufa possibilitando a eliminação de toda umidade. Já nas condições ambientes, além da temperatura não exceder 25ºC, ainda havia o fator de a umidade do ar atmosférico dificultar a remoção de água do material vegetal.

Os sinais m/z presentes nos espectros de massas, *fingerprints,* obtidos para as os decoctos preparados foram analisados tendo como base as m/z das espécies protonadas, dos adutos com sódio e/ou potássio (modo positivo) e desprotonadas (modo negativo) de compostos já identificados em amostras de *Origanum vulgare*. Segundo os dados apresentados na revisão bibliográfica realizada por Soltani *et al*. (2020), as faixas de massas moleculares características para cada classe de metabólitos secundários encontrados no orégano podem ser agrupadas da seguinte forma: compostos fenólicos simples 154 a 170Da; fenilpropanóides não condensados: 148 a 198Da; agliconas de flavonóides 270 a 332Da; fenilpropanóides condensados 354 a 360Da; fenilpropanóides condensados e glicosilados 436 a 747Da; heterosídeos de flavonóides: 432 a 611Da; ácidos graxos: 282 a 457Da.

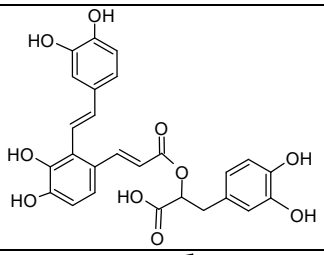
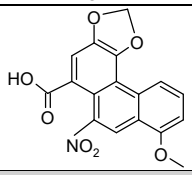
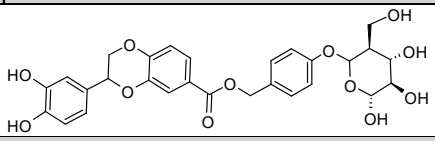
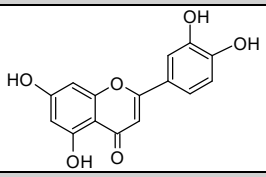
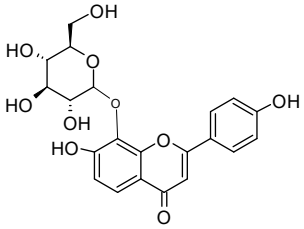
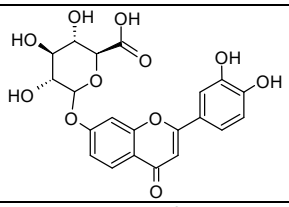
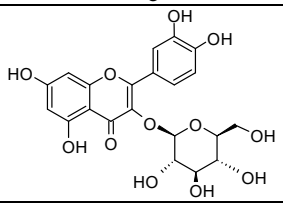
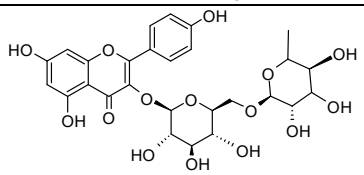
Os metabólitos do *Origanum vulgare* que exibiram massas moleculares passíveis de serem relacionados a sinais presentes nos *fingerprints* são apresentados no quadro 1, e pertencem às classes dos ácidos graxos, terpenos, fenilpropanóides e flavonóides, estando os dois últimos presentes tanto na forma heterosídica quanto aglicona. Nos *fingerprints* obtidos, para todas as amostras preparadas, os sinais de massas moleculares entre 353 e 397Da exibiram abundância relativa muito superior aos demais. Esta faixa de massa corresponde a moléculas pertencentes a classe dos fenilpropanóides. De acordo com GREVSEN *et al.* (2009), a classe de metabólitos predominante em *O. vulgare* depende do estágio de desenvolvimento do vegetal, sendo a produção dos fenilpropanóides, predominante no estágio em que as flores já se encontram abertas.

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

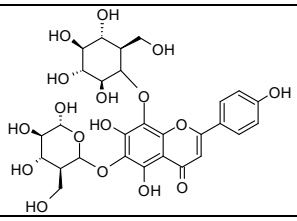
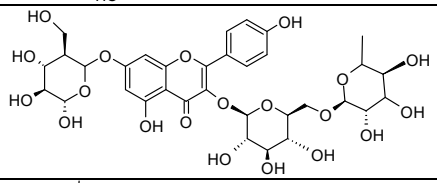
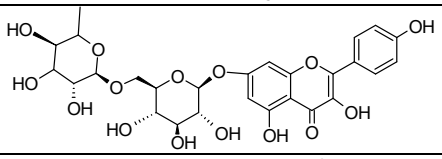
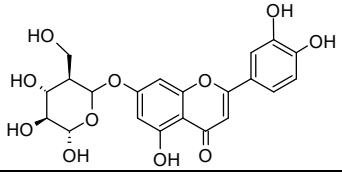
Quadro 1. Metabólitos com massas moleculares compatíveis a sinais presentes nos *fingerprints* das amostras obtidas a partir de orégano *Origanum vulgare* submetidos a secagem em condições ambientes e em estufa e preparadas por diferentes períodos de decocção

Metabólitos	Períodos de aquecimento durante a decocção (min.)							
	Secagem em condições ambiente (min)				Secagem em estufa (min)			
	5	10	20	30	5	10	20	30
Ácidos graxos								
ácido palmídico 	+							
Terpenóides								
cimeno 	+	+	+	+		+	+	+
ácido quínico 	+	+	+	+	+	+	+	+
Quinonas								
Timoquinol-2-O-glicopiranosídeo 	+	+	+	+	+	+	+	+
Timoquinol-5-O-glicopiranosídeo 	+	+	+	+	+	+	+	+
Fenilpropanóides								
ácido caféico 	+	+	+	+	+	+	+	+
ácido rosmarínico 	+	+	+	+	+	+	+	+
éster metílico do ácido rosmarínico 	+	+	+	+	+	+	+	+

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

ácido salvanólico A						+	+	+	+
ácido aristolóquico		+	+	+	+				
Heterosídeo de fenilpropanóide									
origalignanol						+	+	+	+
Flavonóides									
Luteolina		+			+			+	+
Heterosídeo de flavonóides									
vitexina		+							
Luteolina-7-O-glucoronídeo		+	+	+	+				
isoquercetina		+			+				
kaempeferol rutinosídeo		+	+	+	+	+	+	+	+

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

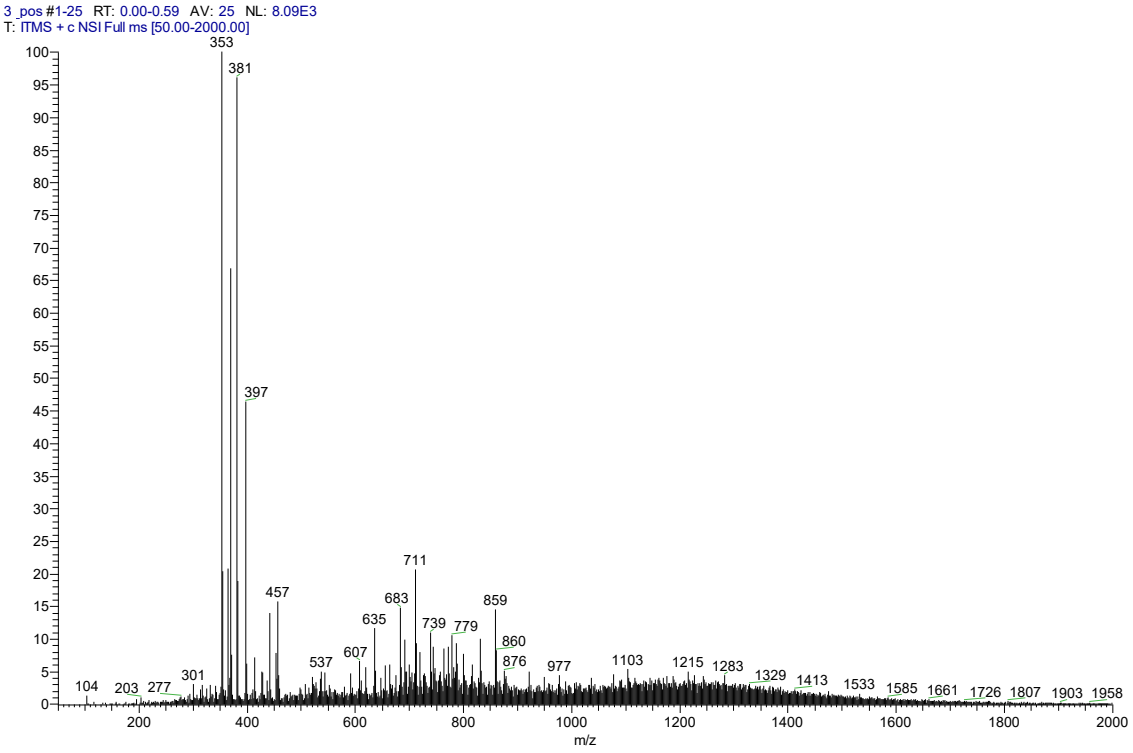
Vicenina-2		+	+	+	+	+	+	+	+
kaempeferol-3-O-rutinosídeo-7-O-glicosídeo		+	+	+	+	+			
apigenina-7-O-rutinosídeo		+		+	+	+	+	+	+
cinarosídeo						+	+		

+ = presença do metabólito

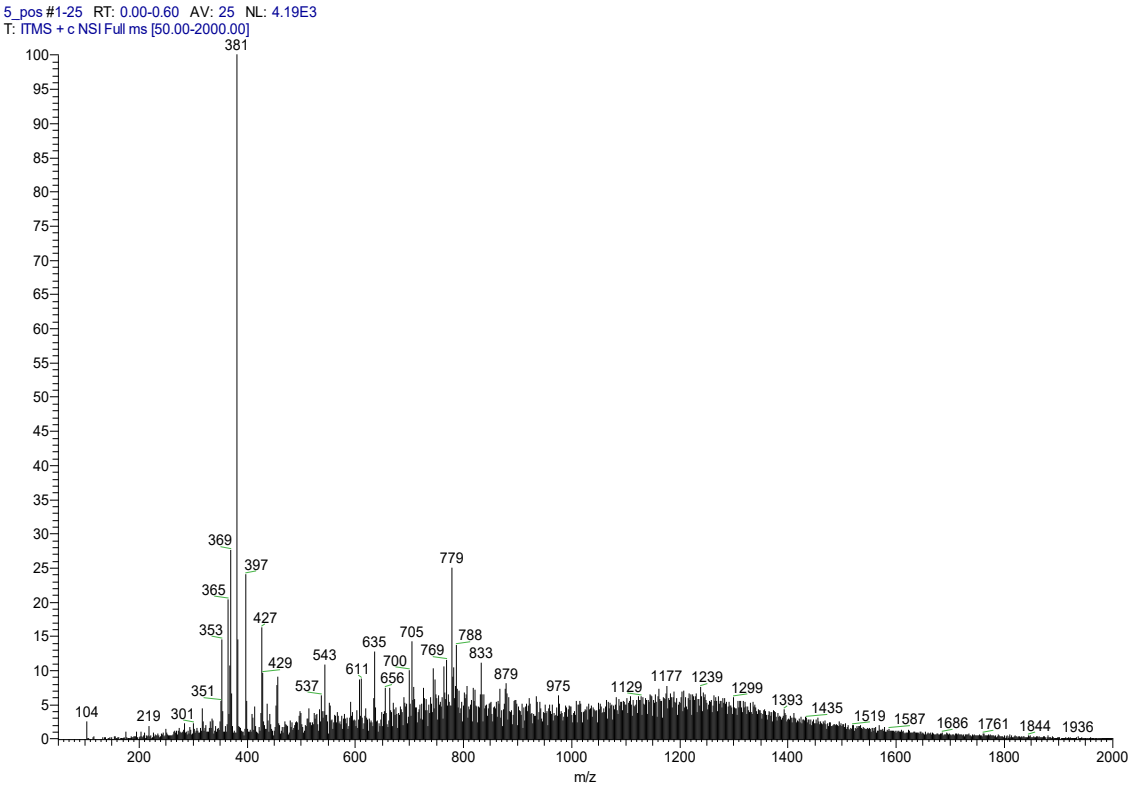
Os espectros obtidos tanto no modo positivo (Figura 1) quanto negativo (Figura 2) dos decoctos obtidos empregando as folhas secas em condições ambiente, em diferentes períodos de decocção, não apresentaram variações qualitativas dos perfis químicos. As variações observadas se caracterizam pelas diferenças entre as intensidades relativas dos sinais.

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

A

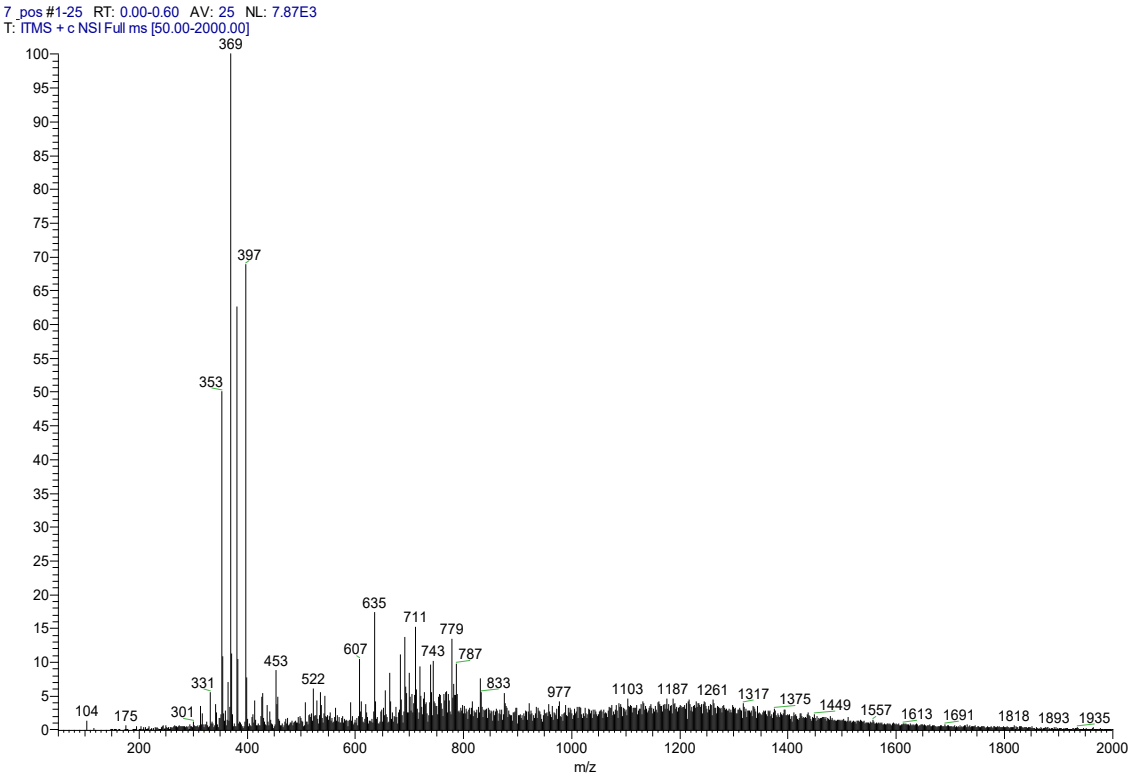


B



REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

C



REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

D

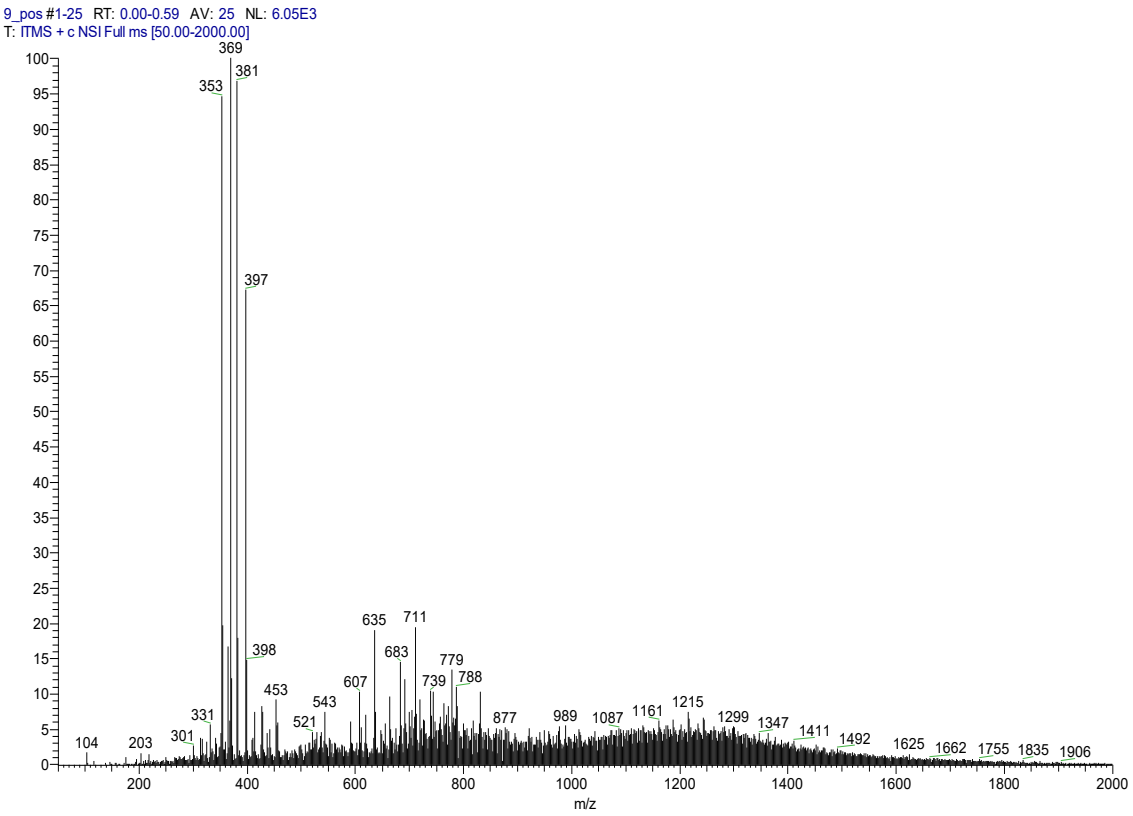


Figura 1. Espectros dos decoctos preparados com amostras de orégano secas em condições ambientes –*fingerprints* no modo positivo dos decoctos obtidos por períodos de aquecimento (A) 5min. (B) 10min. (C) 20min. e (D) 30min

Considerando os espectros obtidos no modo positivo, foi possível correlacionar cinco dos sinais de m/z observados que podem ser atribuídos ao ácido aristolóquico em m/z= 381 (MM+K), os isômeros 2-O-glicopiranosídeo e timimoquinol-5-O-glicopiranosídeo em m/z=369 (MM+K), o éster metílico do ácido rosmarínico em m/z= 397 (MM+Na), a vitexina em m/z= 457 (MM+Na) e a apigenina-7-O-rutinosídeo em m/z=711 (MM+Na) (Soltani, 2021).

Podemos observar um aumento do sinal m/z 369, atribuido a aduto de potássio dos isômeros timoquinol-2-O-glicopiranosídeo e timoquinol-5-O-glicopiranosídeo, ocasionado pelo aumento do tempo de decocção, atingindo uma intensidade máxima nos extratos obtidos com 20 minutos de decocção. Observa-se ainda, um aumento da intensidade dos demais sinais em relação ao m/z 369 nos extratos obtidos com 30 minutos de decocção indicando uma maior extração dos demais metabólitos, evidenciando que o maior tempo de contato da água quente com o material vegetal, conforme esperado, favorece, de modo geral a extração. Do ponto de vista farmacológico, este é um dado que pode implicar na variação das propriedades medicinais

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

destes sistemas, uma vez que, as respostas biológicas a fitofármacos costumam ser dose dependente.

Outro dado interessante a ser destacado é a presença do ácido aristolóquico, uma vez que este é um metabólito cuja nefrotoxicidade já foi comprovada (Faria, 2021).

Já nos espectros obtidos no modo negativo, não houve diferença significativa com a variação do tempo de decocção e o sinal em m/z=359, compatível com o ácido rosmarínico (MM-1) foi o mais abundante em todos os espectros. Além do ácido rosmarínico, foi possível correlacionar 11 dos sinais presentes com metabólitos já descritos para esta espécie. São estes: cimeno em m/z=133, ácido caféico em m/z=179, ácido quínico em m/z=197, ácido palmídico em m/z=255, luteolina em m/z=284, luteolina-7-O-glucoronídeo em m/z=461, isoquercetina em m/z=463, kaempeferol rutinosídeo em m/z=593, vicenina-2 em m/z=593, e kaempeferol-3-O-rutinosídeo-7-O-glicosídeo.

O ácido rosmarínico além de apresentar ações antioxidante, anti-inflamatória, antidiabética e anticancerígena (Sirajudeen *et al.,* 2024) é o principal metabólito responsável pelo aroma e sabor do orégano.

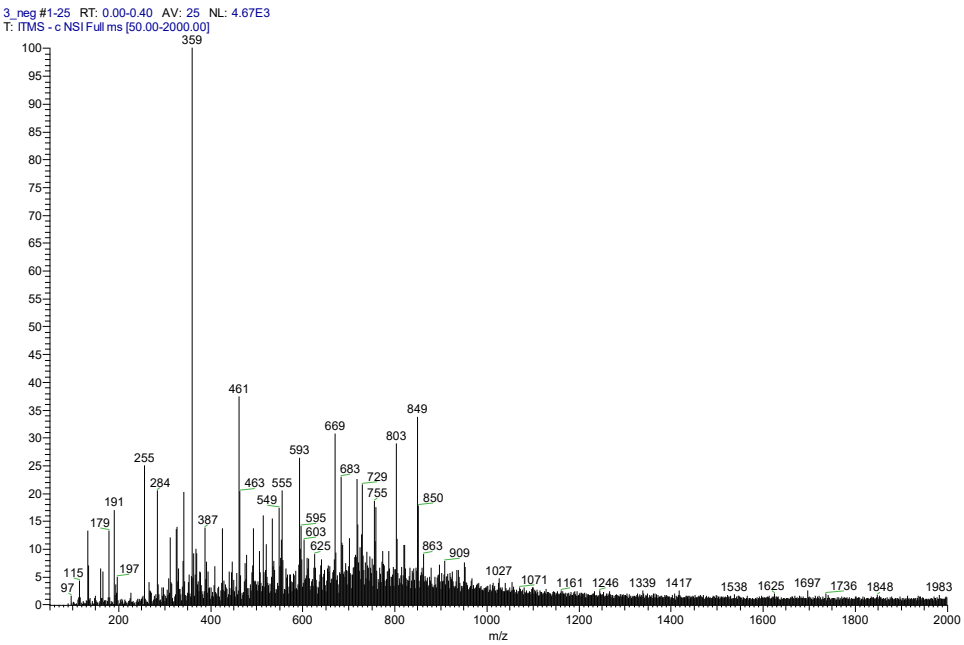
Embora para o timimoquinol-5-O-glicopiranosídeo não terem sido encontrados dados que comprovem sua ação farmacológica, é importante observar que seu isômero, o timoquinol-2-O-β-D-glicopiranosídeo (Th-Ol-G) isolado de *Pulicaria jaubertii*, assim como sua forma aglicona timoquinol (Th-Ol) e timoquinona (Th-One) exerceram citotoxicidade acentuada contra células HCT-116 e HeLa (IC50 = 13 ± 1,2 e 12 ± 0,6 µg / mL, respectivamente), em comparação com seu efeito na célula HEK-293 não carcinogênica (valor IC50 de 22 ± 1,3 µg / mL). Evidenciando a potencialidade destas substâncias atuarem como anticancerígenos seletivos (Sulaiman *et al.,* 2025).

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

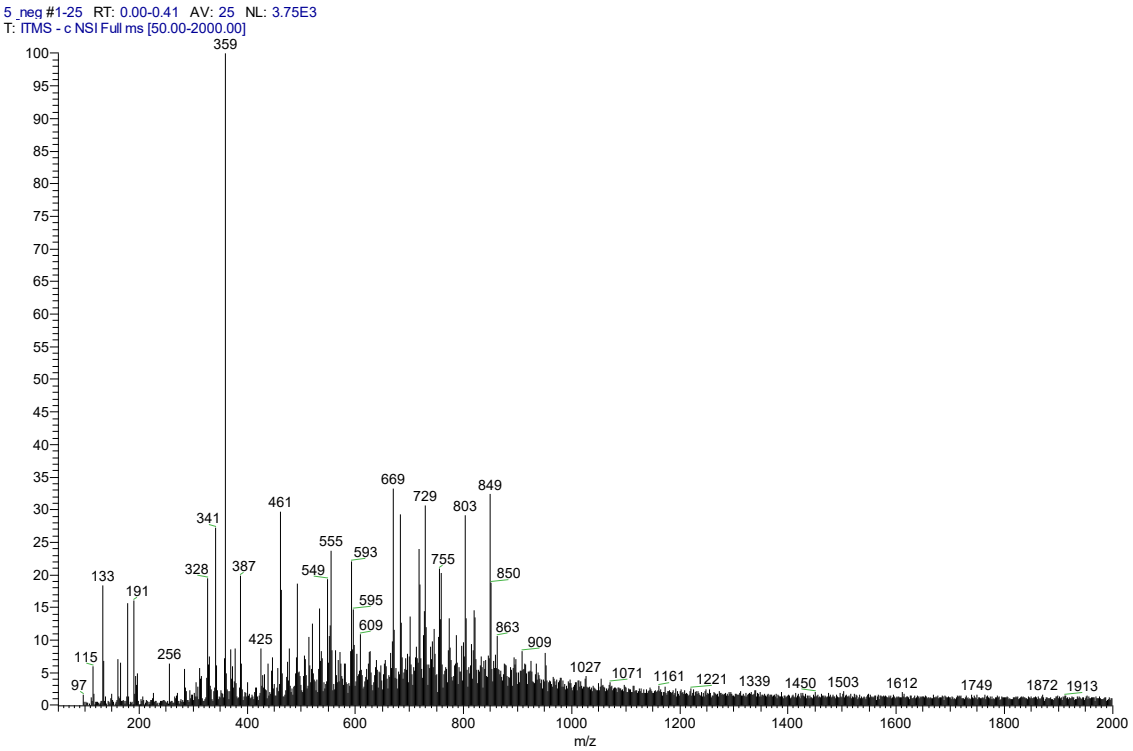
COMPARAÇÃO DO PERFIL QUÍMICO DE DECOCTOS DE ORÉGANO (*Origanum vulgare)* PREPARADOS EM DIFERENTES TEMPOS DE EXTRAÇÃO A PARTIR DE AMOSTRAS SECAS EM ESTUFA E EM CONDIÇÕES NATURAIS

Marcella Uxa Jacob Werneck Rocha, Fátima de Cássia Oliveira Gomes, Ildefonso Binatti, Esther Maria Ferreira Lucas

A

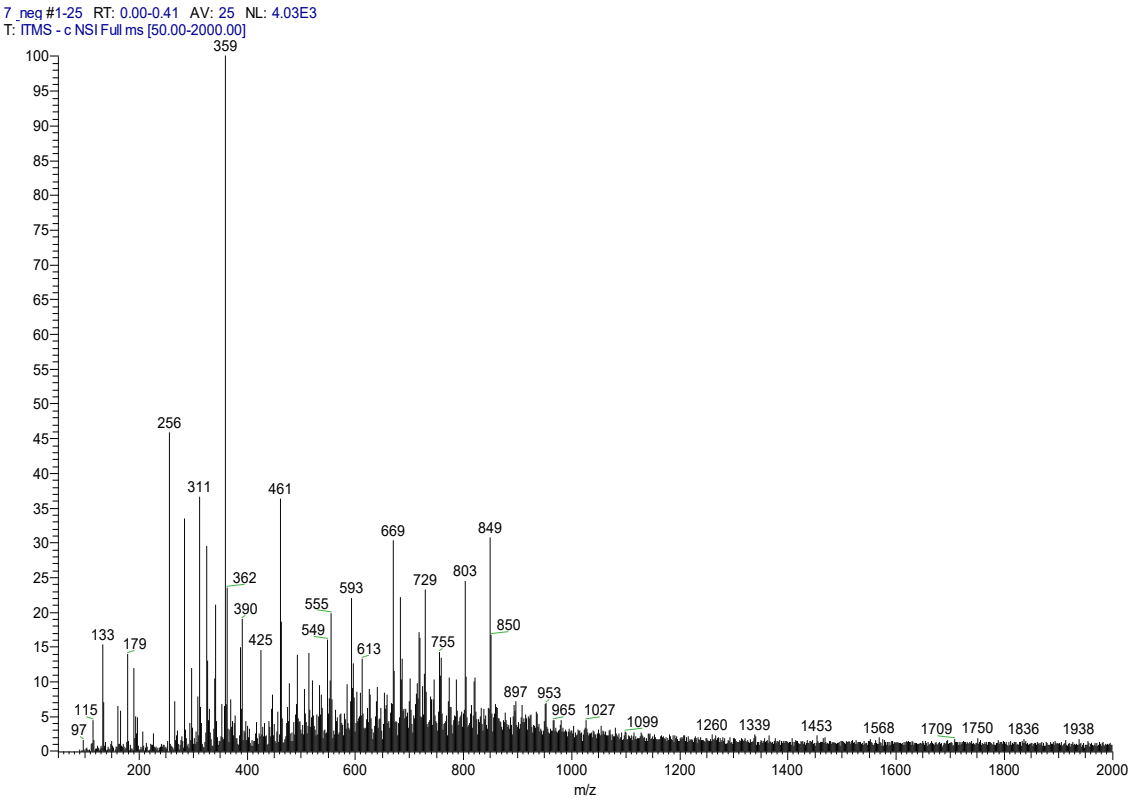


B



REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

C



REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

D

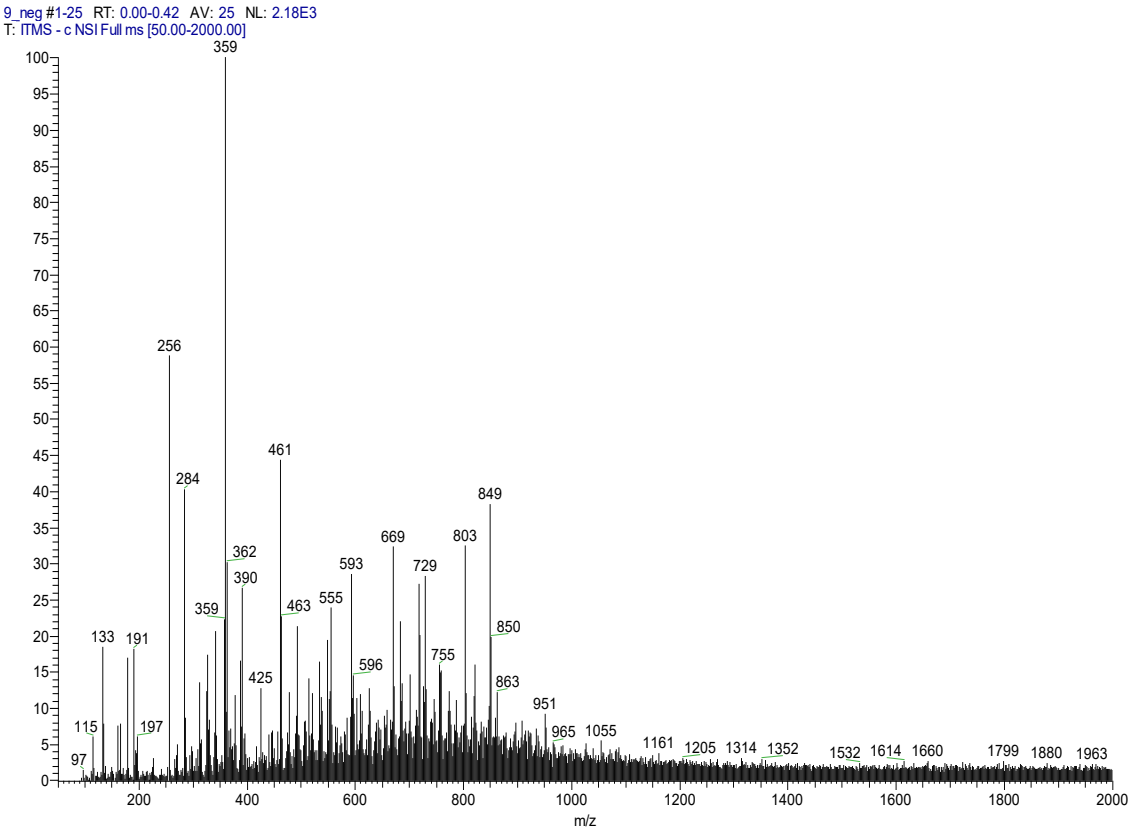
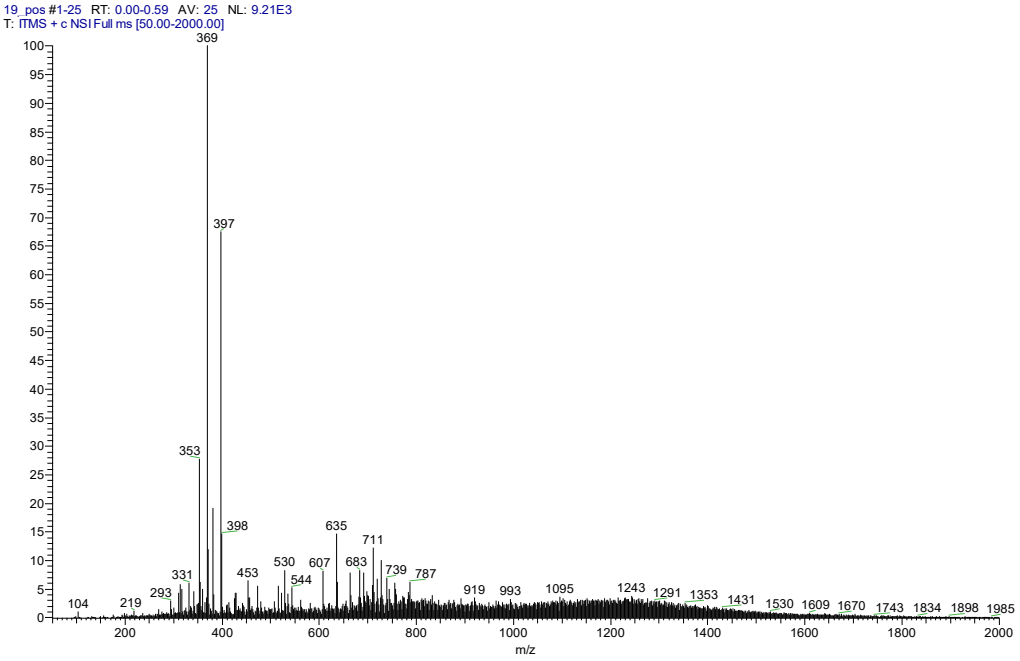


Figura 2. Espectros dos decoctos preparados com amostras de orégano secas em condições ambientes *fingerprints* no modo negativo dos decoctos obtidos por períodos de aquecimento (A) 5min. (B) 10min. (C) 20min. (D) 30min

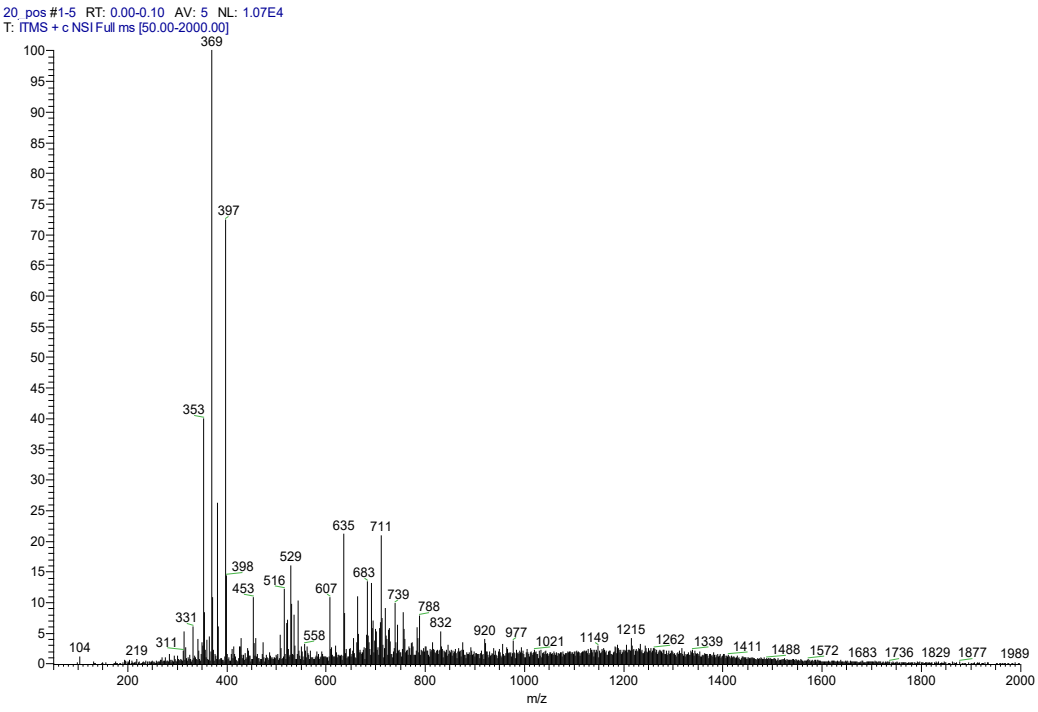
Em relação às amostras secas em estufa, também não foram observadas variações dos perfis químicos ao variar os tempos de decocção (Figura 3 e 4)

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

A

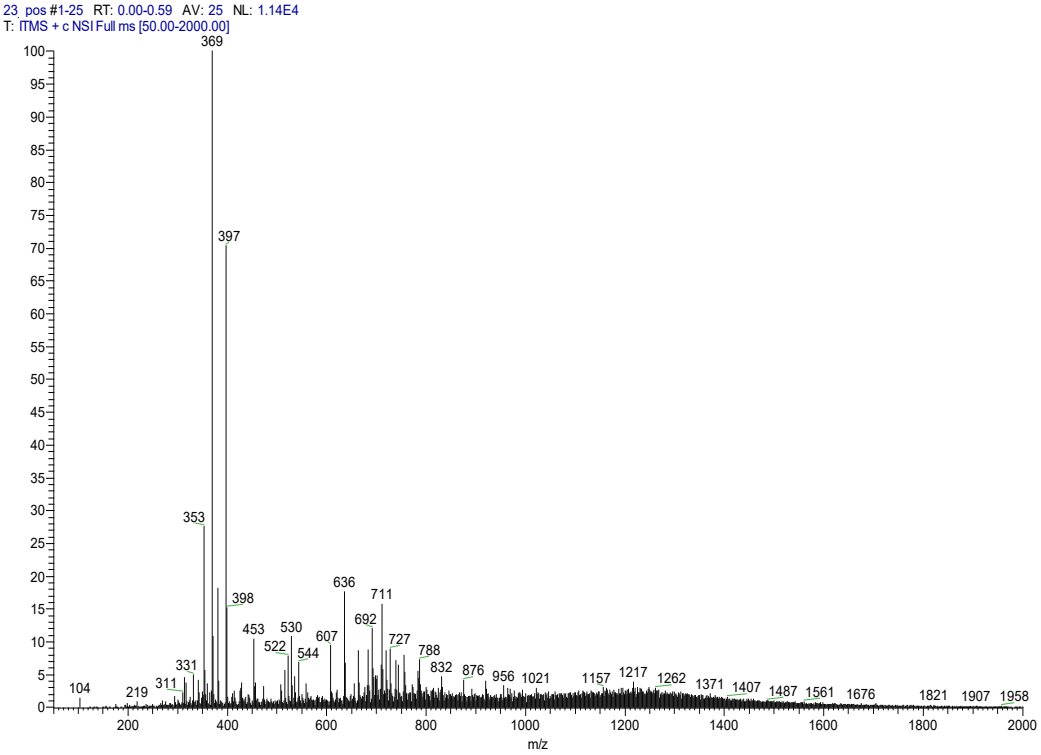


B



REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

C



D

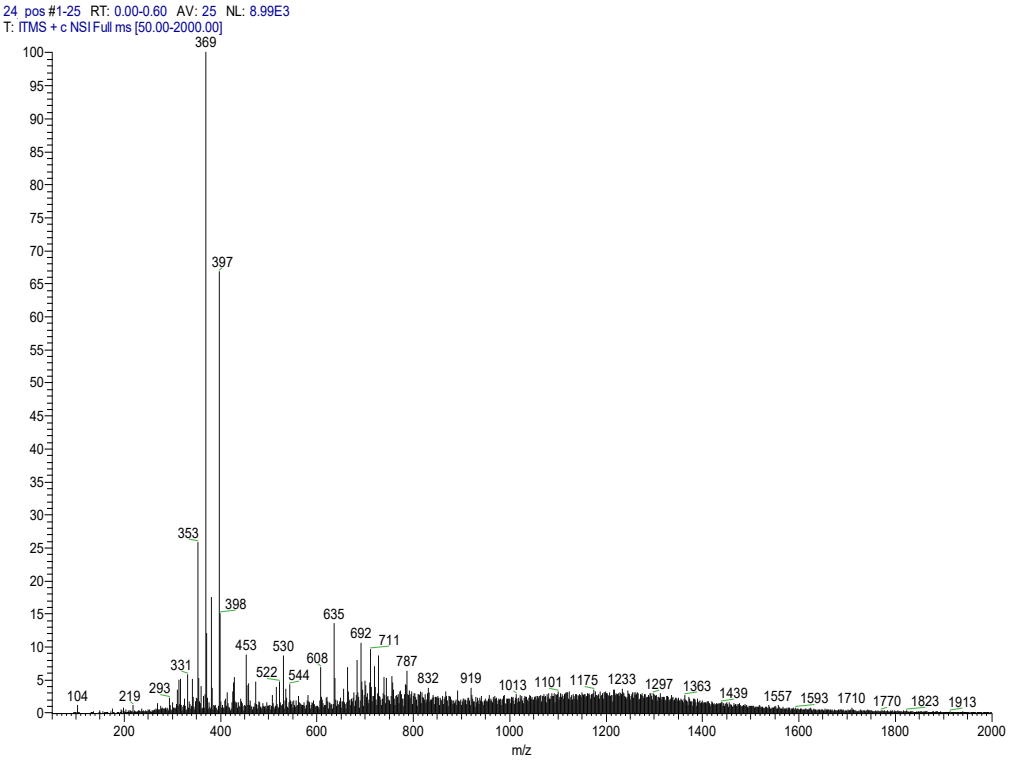
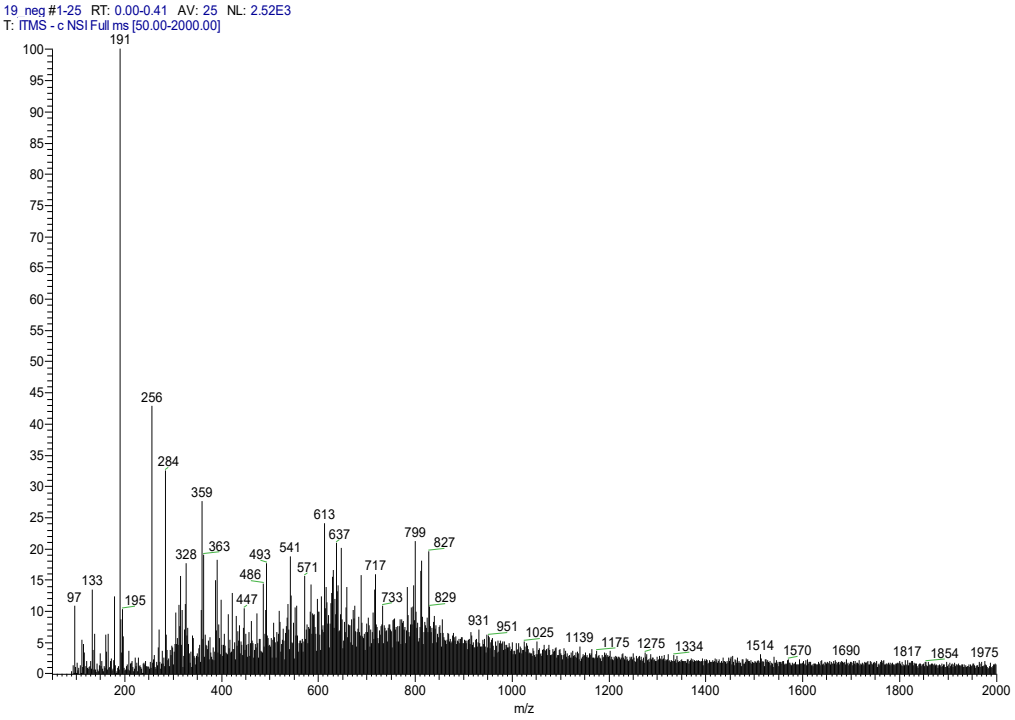


Figura 3. Espectros dos decoctos preparados com amostras de orégano secas em estufa a 40 ºC – *fingerprints* no modo positivo dos decoctos obtidos por períodos de aquecimento (A) 5min. (B) 10min. (C) 20min. (D) 30min

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

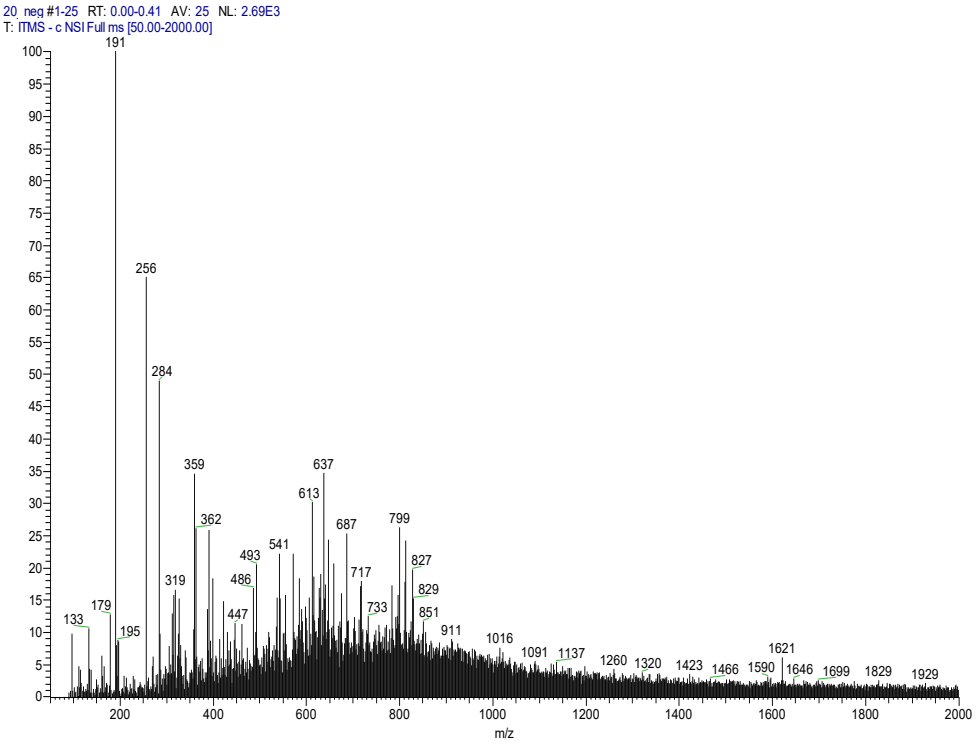
Considerando todos os espectros obtidos no modo positivo, para os decoctos obtidos a partir de amostras secas em estufa, foi possível correlacionar quatro dos sinais observados com a massa molecular de metabólitos já descritos para o orégano, são eles os isômeros 2-O-glicopiranosídeo e timimoquinol-5-O-glicopiranosídeo em m/z=369 (MM+K), o éster metílico do ácido rosmarínico em m/z= 397 (MM+) e a apigenina-7-O-rutinosídeo em m/z=711 (MM+ Na) (Soltani *et al.,* 2021).

A

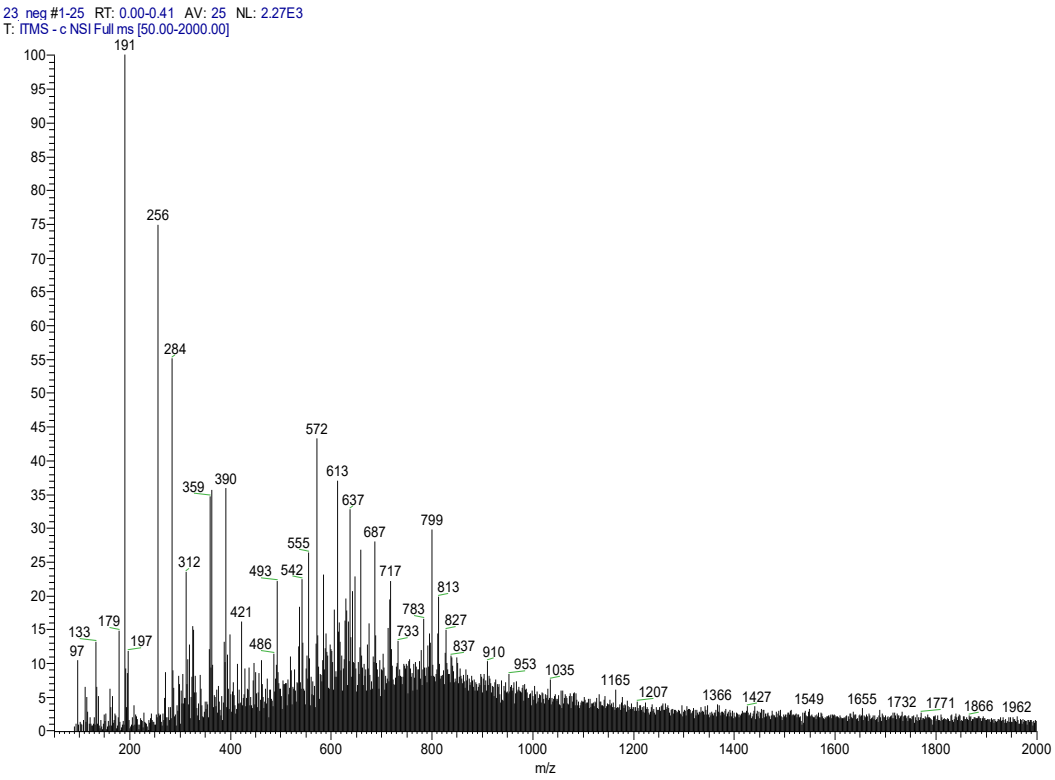


REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

B



C



REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

D

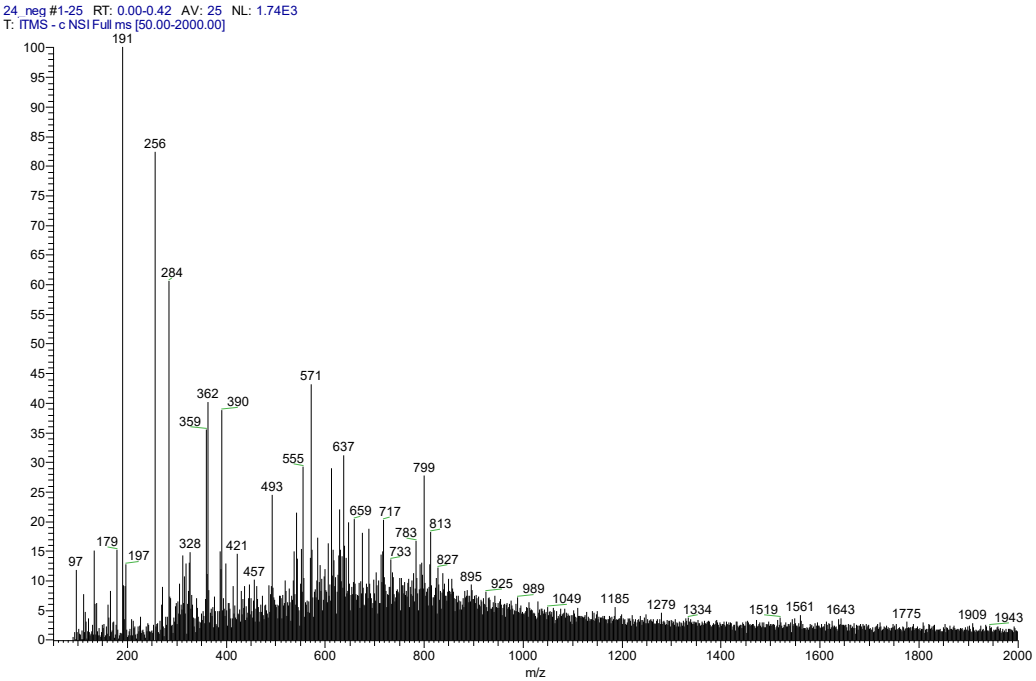


Figura 4. Espectros dos decoctos preparados com amostras de orégano secas em estufa a 40 ºC – *fingerprints* no modo negativo dos decoctos obtidos por períodos de aquecimento (A) 5min. (B) 10min. (C) 20min. (D) 30min

Já nos *fingerprints* obtidos no modo negativo foi possível observar que o sinal de m/z (MM-H) em m/z=191, foi o mais abundante em todos os espectros, sendo este compatível com o ácido quínico. Também pode-se correlacionar outros oito sinais com metabólitos já descritos para o orégano: cimeno em m/z=133, ácido caféico em m/z=179, ácido quínico em m/z=197, luteolina em m/z=284, ácido rosmarínico em m/z=359, cinarosídeo em m/z=447, vicenina-2 em m/z=493, ácido salvanólico A em m/z= 493, e origanolol em m/z=613.

É interessante observar que o ácido clorogênico, um composto de ocorrência natural do orégano, não foi observado nos espectros das amostras secas em estufa. Uma vez que este composto resulta da condensação do ácido quínico com o ácido caféico e nas amostras foi detectada a presença tanto do ácido caféico quanto o quínico, é possível supor que o aquecimento em estufa poderia favorecer a hidrólise do ácido clorogênico.

Do ponto de vista farmacológico, o fato do ácido quínico apresentar a maior abundância relativa em relação aos demais metabólitos é interessante, uma vez que testes *in vivo* e *in vitro* evidenciaram suas propriedades antioxidante, antidiabética, anticancerígena, antiviral, analgésica e antimicrobiana (Benali *et al.,* 2022).

Comparando o perfil químico das amostras secas em condições ambiente e em estufa é possível verificar que nos decoctos das amostras secas em estufa o sinal de m/z de maior

abundância relativa obtido no modo positivo é o referente ao ácido quínico. Já para as amostras obtidas a partir das folhas secas em condições ambiente, o ácido aristólico apresenta o sinal de m/z de maior abundância relativa. Ao se fazer a mesma comparação no modo negativo, observa-se que os sinais de maior intensidade são o timoquinol-glicosídeo e o ácido rosmarínico.

Deste modo, observamos que ao promover a secagem do orégano em estufa, garantimos a presença em maior abundância relativa do ácido quínico, que é um composto que apresenta diversas ações farmacológicas benéficas e dos isômeros 2-O e 5-O do timoquinol-glicosídeo. Já quando a secagem é realizada em condições ambiente, encontramos como metabólitos majoritários o ácido rosmarínico, que apresenta ações farmacológicas benéficas, mas, também o ácido aristolóquico que, por sua vez, apresenta propriedades tóxicas.

Ainda é possível observar que dois dos metabólitos que geraram os sinais mais intensos nos espectros, o ácido rosmarínico e o ácido quínico, apresentam as mesmas ações farmacológicas: antioxidante, antidiabético e anticancerígeno (Sirajudeen *et al.,* 2024; Benali *et al.,* 2022)., sugerindo a possibilidade de que exerçam ação sinérgica, quando presentes nos decoctos. Outro sinergismo que pode ser destacado se refere à ação antioxidante, que pode ser atribuída, de modo geral, tanto aos flavonóides quanto aos ácidos fenólicos (Kikuzaki, 1989) que correspondem às classes da maioria dos metabólitos anotados neste trabalho.

CONSIDERAÇÕES

A secagem de amostras de orégano secas em condições ambiente e em estufa a 40ºC fornecem materiais que exibem diferenças no perfil químico que são impactantes para a saúde humana, pois um dos metabólitos majoritários detectados nos decoctos obtidos pela secagem em condições ambiente, apresenta efeitos nefrotóxicos e carcinogênicos comprovados. Já os decoctos preparados a partir de material vegetal seco em estufa, além de não apresentarem tal metabólito, exibem como metabólitos majoritários o ácido quínico e o ácido rosmarínico, que apresentam diversas ações farmacológicas.

Por outro lado, observou-se que o período de decocção da espécie vegetal é relevante para a extração, pois o aumento do tempo promove acréscimo na quantidade de produto extraído, sem promover alterações no perfil dos espectros, indicando que este aumento não promove a degradação dos metabólitos extraídos.

REFERÊNCIAS

BENALI, T.; BAKRIM, S.; GHCHIME, R.; BENKHAIRA, N.; EL OMARI, N.; BALAHBIB, A.; BOUYAHYA, A. Pharmacological insights into the multifaceted biological properties of quinic acid. Biotechnology and Genetic **Engineering Reviews**, v.40, n.4, p.3408-34371, 2024.

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

DUBOIS M.; BAILLY, F.; MBEMBA, G.; MOUSCADET, J. F.; DEBYSER, Z.; WITVROUW, M.; COTELLE, P. REACTION of rosmarinic acid with nitrite ions in acidic conditions: discovery of nitro- and dinitrorosmarinic acids as new anti-HIV-1 agents. **J Med Chem.,** v. 51, n. 8, p. 2575-9, 24 Apr. 2008.

FARIA, B.; BISPO, C.; CORDEIRO, M.; BALTAZAR, A. Ácido aristolóquico - nefropatia e o cancro. **Acta Portuguesa de Nutrição,** v. 24, p. 70-5, 2021.

GREVSEN, K.; FRETTÉ, X. C.; CHRISTENSEN, L. P. Content and composition of volatile terpenes, flavonoids and phenolic acids in Greek oregano *(Origanum vulgare L. ssp. hirtum)* at different development stages during cultivation in cool temperate climate. **Europ. J. Hort. Sci**., v. 74, n. 5, S. 193–203, 2009.

HUANG, S. S.; ZHENG, R. L. Rosmarinic acid inhibits angiogenesis and its mechanism of action in vitro. **Cancer Lett**., v. 239, n. 2, p. 271-280, 2006.

KHALEEL, C.; NURHAYAT, T.; BUCHBAUER, G. α-Terpineol, a natural monoterpene:A review of its biological properties. **Open Chemistry**, v. 16, n. 1, p.349-361, 2018.

KIKUZAKI, H.; AKATANI, N. N. Structure of a new anti-oxidative phenolic acid from oregano (*Origanum vulgare* L.). **Agric. Biol. Chem**., v. 53, p. 519–524, 1989.

KLIMIENĖ, A.; KLIMAS, R.; SHUTAVA, H.; RAZMUVIENĖ, L. Dependence of the concentration of bioactive compounds in *Origanum vulgare* on Chemical Properties of the Soil. **Plants**, v. 10, p. 750, 2021.

KOŞAK, C. B. M. R.; GÖGER, F. In vitro antioxidant properties and phenolic composition of Phenolic compounds prevent amyloid B protein oligomerization and synaptic dysfunction by site-specific binding Salvia virgata Jacq. from Turkey. **J. Agric. Food Chem**., v. 56, n. 7, p. 2369-2374, 2008.

LORENZI, H.; MATOS, F. J. A. **Plantas medicinais no Brasil**: nativas e exóticas cultivadas. Nova Odessa, SP: Editora Plantarum, 2021. 576 p.

MORENO S.; SCHEYER T.; ROMANO C. Antioxidant and antimicrobial activities of rosemary extracts linked to their polyphenol composition. **Free Radic. Res**, v. 40, p. 223-231, 2006.

ONO, K.; LI, L.; TAKAMURA, Y.; YOSHIIKE, Y.; ZHU, L.; HAN, F.; MAO, X.; IKEDA, T.; TAKASAKI, J.; NISHIJO, H.; TAKASHIMA, A.; TEPLOW, D. B.; ZAGORSKI, M. G.; YAMADA, M. Phenolic compounds prevent amyloid β-protein oligomerization and synaptic dysfunction by site-specific binding. **J Biol Chem**., v. 287, n. 18, p. 14631-43, 27 apr. 2012.

OSAKABE, T. Y, N.; YASUDA, A.; NATSUME, M. Rosmarinic acid inhibits epidermal inflammatory responses: anticarcinogenic effect of Perilla frutescens extract in the murine two-stage skin model. **Carcinogenesis**, v. 25, n. 4, p.549-557, 2004.

RODRIGUES, V. G. S. **Cultivo, uso e manipulação de plantas medicinais**. Porto Velho, RO: Embrapa, 2004. 25 p.

SIRAJUDEEN, F; MALHAB, L. J. B.; BUSTANJI, Y. Exploring the Potential of Rosemary Derived Compounds (Rosmarinic and Carnosic Acids) as Cancer Therapeutics: Current Knowledge and Future Perspectives. **Biomol Ther.,** v. 32, n. 1, p. 38-55, 2024.

REVISTA CIENTÍFICA - RECIMA21 ISSN 2675-6218

SKOUFOGIANNI, F.; SOLOMOU, A. D.; DANALATOS, N. G. Ecology, Cultivation and Utilization of the Aromatic Greek Oregano (*Origanum vulgare* L.): A Review. **Not Bot Horti Agrobo**, v. 47, n. 3, p. 545-552, 2019.

SOLTANI, S.; SHAKERI, A.; IRANSHAHI, M. Review of the Phytochemistry and Antimicrobial Properties of *Origanum vulgare* L. and Subspecies. **Iranian Journal of Pharmaceutical Research**., v. 20, n. 2, p. 268-285, 2021.

SULAIMAN, G. M.; MESSAOUDI, S.; MOHAMMED, H. A.; KHAN, F. A.; EMWAS, A. H.; ELRAOUF, M. A.; EL-GHALY, EL-S.M.; ALMAHMOUD, A. S.; AROUA, L.. M.; RAGAB, E. A. Thymoquinol-2-*O*-*β*-D-glucopyranoside: Isolation from *Pulicaria Jaubertii*, Anticancer Efficacy, and Comparative Apoptotic Markers Binding Studies with Thymoquinone and Thymoquinol. **Chemistry Select**., v. 10, n. 14, 2025. disponível em: https://doi.org/10.1002/slct.202500551. Acesso em: 01 maio 2025.

TAKANO, H.; OSAKABE, N.; SANBONGI, C.; YANAGISAWA, R.; INOUE, K.; YASUDA, A.; NATSUME, M.; BABA, S.; ICHIISHI, E.; YOSHIKAWA, T. Extract of Perilla frutescens enriched for rosmarinic acid, a polyphenolic phytochemical, inhibits seasonal allergic rhinoconjunctivitis in humans. **Exp Biol Med.,** (Maywood). 2004.

TAKEDA, T. M. H.; TSUJI, M.; INAZU, M.; EGASHIRA, T. Rosmarinic acid and caffeic acid produce antidepressive-like effect in the forced swimming test in mice. **Eur. J. Pharmacol**., v. 449, n. 3, p. 261-267, 2002.

ZEJLI, H.; METOUEKEL, A.; ZOUIRECH, O.; MALIKI, I.; EL-MOUSSAOUI, A.; LFITAT, A.; BOUSSERAF, F. Z.; ALMAARY, K. S.; NAFIDI, H-A.; KHALLOUKI, F.; BOURHIA, M.; TALEB, M.; ABDELLAOUI, A. Phytochemical analysis, antioxidant, anti-inflamatory, hemagglutinin and hemolytic activities of chemically characterized extracts from *Origanum grossi* (L.) and *Thymus pallidus* (L.). **Plants**, v. 13, p. 385, 2024.

ZHANG J.-J.; WANG Y.-L.; FENG X.-B.; SONG X.-D.; LIU W.-B. Rosmarinic acid inhibits proliferation and induces apoptosis of hepatic stellate cells. **Biol. Pharm. Bull**., v. 34, n. 3, p. 343-348, 2011.