



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DE ANANINDEUA
FACULDADE DE QUÍMICA

GILMAR XAVIER DOS SANTOS

**ÓLEO ESSENCIAL DAS ESPÉCIES *Piper divaricatum* E *Piper callosum* E
ESTIMATIVA DE PROPRIEDADES FÍSICAS DOS CONSTITUINTES
MAJORITÁRIOS USANDO MÉTODOS DE CONTRIBUIÇÃO DE GRUPOS**

ANANINDEUA-PA
2020

GILMAR XAVIER DOS SANTOS

**ÓLEO ESSENCIAL DAS ESPÉCIES *Piper divaricatum* E *Piper callosum* E
ESTIMATIVA DE PROPRIEDADES FÍSICAS DOS CONSTITUINTES
MAJORITÁRIOS USANDO MÉTODOS DE CONTRIBUIÇÃO DE GRUPOS**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado a Faculdade de Química, do Campus Universitário de Ananindeua, da Universidade Federal do Pará, como requisito para obtenção do grau de Licenciado em Química.

Orientadora: Eng.^a. Me. Marcilene Paiva da Silva

Coorientador: Dr. Alcy Favacho Ribeiro

ANANINDEUA-PA
2020

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) de acordo com ISBD
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Pará
Gerada automaticamente pelo módulo Ficat, mediante os dados fornecidos pelo(a)
autor(a)

S237o Santos, Gilmar Xavier dos
Óleo essencial das espécies *Piper divaricatum* e *Piper callosum* e estimativa de propriedades físicas dos constituintes majoritários usando métodos de contribuição de grupos / Gilmar Xavier dos Santos. — 2020.
66 f. : il. color.

Orientador(a): Prof^a. MSc. Marcilene Paiva da Silva
Coorientador(a): Prof. Dr. Alcy Favacho Ribeiro
Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Curso de Química, Campus Universitário de Ananindeua, Universidade Federal do Pará, Ananindeua, 2020.

1. *Piper divaricatum*. *Piper callosum*. Óleos essenciais. Composição química. Propriedades críticas.
I. Título.

GILMAR XAVIER DOS SANTOS

**ÓLEO ESSENCIAL DAS ESPÉCIES *Piper divaricatum* E *Piper callosum* E
ESTIMATIVA DE PROPRIEDADES FÍSICAS DOS CONSTITUINTES
MAJORITÁRIOS USANDO MÉTODOS DE CONTRIBUIÇÃO DE GRUPOS**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado a Faculdade de Química, do Campus Universitário de Ananindeua, da Universidade Federal do Pará, como requisito para obtenção do grau de Licenciado em Química.

Data da Aprovação: 17/02/2020

Conceito: Excelente

BANCA EXAMINADORA

Eng.^a. Me. Marcilene Paiva da Silva
Orientadora – UFPA

Prof. Dr. Alcy Favacho Ribeiro
Coorientador – UFPA

Prof. Dr. Fabio Cardoso Borges
Examinador Interno – UFPA

Eng.º. Me. Eduardo Gama Ortiz Menezes
Examinador Externo

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho a minha mãe Maria Nilda Lima Xavier e a minha família. Dedico também ao Ricardo Saldanha, meu pai adotivo, Evaldo Cunha Marques meu padrinho e pai ao mesmo tempo, Thais Nara minha mãe adotiva, Ivonete Teixeira, pois sem eles em minha vida eu nunca teria chegado até aqui.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus.

A minha família biológica e as duas famílias que me adotaram, e que sempre me motivaram a continuar nesse caminho, agradeço pelo apoio nos momentos ruins e nos bons.

Agradeço também ao Ricardo Saldanha Moraes, Evaldo Cunha Marque e Thais Nara Lima, pois sem estas pessoas eu não conseguiria superar meus obstáculos, sou eternamente grato a eles, agradeço por ter me adotado.

Agradeço aos meus amigos, Carlos Eduardo Rodrigues, Ítalo Dias, Augusto de Oliveira, Witalo Leal, Vinicius de Moraes, Josi Cunha, Lana Cassia, Dhefferson de Oliveira, Jair Leão, Renan Silva, Yasmim Dias, Camila Araújo e a minha irmã querida Eva Ludmila Marques, são pessoas que sempre me ajudaram de certa forma e que nunca me abandonaram.

Agradeço também ao Dr. Alcy Favacho Ribeiro, pela paciência, pela oportunidade de trabalhar com ele.

Agradeço muito a minha orientadora Msc. Eng.^a Marcilene Paiva da Silva, por sua disponibilidade em ajudar em todo o trabalho e pela sua paciência comigo.

EPÍGRAFE

“Esse é o meu jeito ninja de ser! Tô certo!” Uzumaki Naruto

RESUMO

Piper é o gênero mais importante que pertence à família Piperaceae com sua distribuição em regiões tropicais e região neotropical. Apresentando propriedades antimicrobianas e antifúngicas este gênero é muito utilizado para inibir pragas. Sua família é conhecida por manifestar metabolitos secundários na sua composição como: fenilpropanoides e terpenos. Além disso a família tem sua importância econômica e também sua utilização pra fins medicinais. Os óleos essenciais das espécies de *Piper divaricatum* e *Piper callosum*, tiveram rendimentos de 1,9% para *Piper divaricatum* e 1,7% para *Piper callosum*. Apresentando em suas composições química os constituintes majoritários os fenilpropanóides como: metileugenol (38,46%) e o eugenol (24,29%) que corresponde ao vegetal *Piper divaricatum*. *Piper callosum* apresenta em sua composição química os constituintes majoritários os hidrocarbonetos e fenilpropanóide como: α -Pineno (8,12%), β -Pineno (18,03) e Safrol (50,59%) respectivamente. Devido à importância no conhecimento das propriedades físicas e termodinâmicas das substâncias puras no desenvolvimento das simulações em processos de engenharia, este presente trabalho teve o objetivo de analisar métodos de predição das propriedades críticas dos compostos majoritários das espécies coletadas, levando em consideração estruturas que apresentam somente carbonos e hidrogênios podendo ser cadeias cíclicas, acíclicas e isômeros, e para moléculas que apresentam carbonos, hidrogênios e oxigênios em suas estruturas, desde da cadeia acíclica, cíclica e isômeros . Ao analisar o melhor método comparado com o da literatura foram calculadas as propriedades críticas dos constituintes majoritários dos óleos essenciais de *Piper divaricatum* e *Piper callosum*.

Palavras-chave: *Piper divaricatum*. *Piper callosum*. Óleos essenciais. Composição química. Propriedades críticas

ABSTRACT

Piper is the most important genus belonging to the Piperaceae family with its distribution in tropical and neotropical regions. With antimicrobial and antifungal properties this genus is widely used to inhibit pests. Its family is known to manifest secondary metabolites in its composition as: phenylpropanoids e terpenes. In addition, the family has its economic importance and also its use for medicinal purposes. The essential oils of the species *Piper divaricatum* and *Piper callosum*, had yields of 1.9% for *Piper divaricatum* and 1.7% for *Piper callosum*. The majority of the constituents of these oils are phenylpropanoids such as methyleugenol (38.46%) and eugenol (24.29%), which corresponds to the plant *Piper divaricatum*. *Piper callosum* presents in its chemical composition the major constituents the hydrocarbons and phenylpropanoid as: α -Pinene (8.12%), β -Pinene (18.03) and Safrol (50.59%) respectively. Due to the importance in the knowledge of physical and thermodynamic properties of pure substances in the development of engineering process simulations, this present work aimed at analyzing methods for predicting the critical properties of the majority compounds of the collected species, taking into account structures that present only carbons and hydrogenes that can be cyclic, acyclic and isomer chains, and for molecules that present carbons, hydrogenes and oxygen in their structures, from the acyclic, cyclic and isomer chain. When analyzing the best method compared to the literature, the critical properties of the majority constituents of *Piper divaricatum* and *Piper callosum* essential oils were calculated.

Key words: *Piper divaricatum*. *Piper callosum*. Essential oils. Chemical composition. Critical properties

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Diagrama de pressão/temperatura de uma substância pura.....	26
Figura 2 - Vegetal <i>Piper divaricatum</i> e <i>Piper callosum</i>	28
Figura 3 - Cromatograma do óleo essencial de <i>Piper divaricatum</i>	39
Figura 4 - Cromatograma do óleo essencial de <i>Piper callosum</i>	42
Figura 5 - Valores experimentais e calculados pelo melhor método para a temperatura normal de ebulição de hidrocarbonetos.....	44
Figura 6 - Valores experimentais e calculados pelo melhor método para a temperatura crítica de hidrocarbonetos.....	45
Figura 7 - Valores experimentais e calculados pelo melhor método para a pressão crítica de hidrocarbonetos.....	45
Figura 8 - Valores experimentais e calculados pelo melhor método para o fator acêntrico de hidrocarbonetos.....	46
Figura 9 - Valores experimentais e calculados pelo melhor método para a temperatura normal de ebulição de álcoois.....	47
Figura 10 - Valores experimentais e calculados pelo melhor método para a temperatura crítica de álcoois.....	47
Figura 11 - Valores experimentais e calculados pelo melhor método para a pressão crítica de álcoois.....	48
Figura 12 - Valores experimentais e calculados pelo melhor método para o fator acêntrico de álcoois.....	48

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Composição química dos compostos majoritários dos óleos voláteis das espécies de <i>Piper divaricatum</i> e <i>Piper callosum</i>	24
Tabela 2 – Condições do CG/EM utilizado na análise da composição química.....	30
Tabela 3 – Composição química do óleo essencial da espécie de <i>Piper divaricatum</i> ..	40
Tabela 4 – Composição química do óleo essencial da espécie de <i>Piper callosum</i>	43
A Tabela 5 – Indica o método que apresentou melhores resultados quando comparados aos valores experimentais dos hidrocarbonetos.....	44
A Tabela 6 – Indica o método que apresentou melhores resultados quando comparados aos valores experimentais dos álcoois.....	46
Tabela 7 – Valores preditos das propriedades físicas das substâncias majoritárias que compõem o óleo volátil de <i>Piper divaricatum</i>	50
Tabela 8 – Valores estimados das propriedades críticas, fatores acêntricos das substâncias majoritárias que compõem o óleo essencial de <i>Piper callosum</i>	52
Tabela A1 – Avaliação dos Métodos de Predição para Fator Acêntrico de Álcoois.....	63
Tabela A2 – Avaliação dos Métodos de Predição para Fator Acêntrico de hidrocarbonetos.....	63
Tabela B1 – Avaliação dos Métodos de Predição para a Pressão Crítica (Pc) de Álcoois.....	64
Tabela B2 – Avaliação dos Métodos de Predição para a Pressão Crítica (Pc) de hidrocarbonetos.....	64
Tabela C1 – Avaliação dos Métodos de Predição para a Temperatura Crítica (Tc) de Álcoois.....	65
Tabela C2 – Avaliação dos Métodos de Predição para a Temperatura Crítica (Tc) de hidrocarbonetos.....	65

Tabela D1 – Avaliação dos Métodos de Predição para a Temperatura de Ebulição (Tb) de Álcoois.....66

Tabela D2 – Avaliação dos Métodos de Predição para a Temperatura de Ebulição (Tb) de hidrocarbonetos.....66

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

P	Pressão
P_c	Pressão crítica
T	Temperatura
T_b	Temperatura de ebulição
T_c	Temperatura crítica
T_r	Temperatura reduzida
ω	Fator acêntrico
R	Faixa de erro
S	Desvio padrão
X_j	Erro Relativo Percentual
X_{rm}	Média do Erro Relativo Percentual

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	15
2 OBJETIVOS.....	17
2.1 OBJETIVO GERAL.....	17
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	17
3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	18
3.1 ÓLEOS ESSENCIAIS.....	18
3.1.1 Extração de óleos essenciais.....	19
3.1.2 Óleos essenciais caracterização CG-MS.....	19
3.2 FAMÍLIA PIPERACEAE.....	20
3.2.1 Gênero <i>Piper</i>	21
3.2.2 <i>Piper divaricatum</i>	21
3.2.3 <i>Piper callosum</i>	22
3.3 PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS.....	26
3.3.1 Propriedades Críticas.....	26
3.3.2 Fator Acêntrico (ω).....	27
4 METODOLOGIA.....	28
4.1 ÓLEOS VOLÁTEIS DE <i>Piper divaricatum</i> E <i>Piper callosum</i>	28
4.1.1 Vegetal <i>Piper divaricatum</i> e <i>Piper callosum</i>	28
4.1.2 Obtenção do óleo essencial das espécies <i>Piper divaricatum</i> e <i>Piper callosum</i> ..	29
4.1.3 Análise da composição química.....	29
4.2 MÉTODO PARA CALCULAR PROPRIEDADES CRÍTICAS E TEMPERATURA DE EBULIÇÃO.....	31
4.2.1 Método para calcular pressão de vapor.....	33
4.2.2 Método de predição do fator acêntrico (ω).....	36

4.3 CRITÉRIOS DE ANÁLISE DA TEMPERATURA DE EBULIÇÃO, TEMPERATURA CRÍTICA, PRESSÃO CRÍTICA E FATOR ACÊNTRICO.....	36
5 RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	38
5.1 OBTENÇÃO DOS ÓLEOS ESSENCIAIS.....	38
5.1.1 Obtenção do óleo essencial e composição química de <i>Piper divaricatum</i>	38
5.1.2 Obtenção do óleo essencial e composição química de <i>Piper callosum</i>	41
5.2 ESTIMATIVA DO MÉTODO DE CONTRIBUIÇÃO DE GRUPO DAS PROPRIEDADES TERMOFÍSICA DE SUBSTÂNCIAS PURAS.....	44
5.3 PROPRIEDADES TERMOFÍSICA DOS COMPOSTOS MAJORITÁRIOS DO ÓLEO ESSENCIAL DA ESPÉCIE DE <i>Piper divaricatum</i>	49
5.4 PROPRIEDADES TERMOFÍSICA DOS COMPOSTOS MAJORITÁRIOS DO ÓLEO ESSENCIAL DA ESPÉCIE DE <i>Piper callosum</i>	51
6 CONCLUSÃO.....	53
REFERÊNCIAS.....	54
APÊNDICES.....	63

1 INTRODUÇÃO

As plantas medicinais são utilizadas há muito tempo antes de cristo da história da humanidade. Indícios dessa atividade foram encontrados nas mais antigas civilizações, nas quais ervas medicinais serviam, entre outros fins, como fonte de substâncias bioativas. Hoje, os vegetais se constituem em uma fonte renovável de produtos naturais que encontram emprego principalmente na indústria de perfumaria, cosmética, farmacêutica e alimentícia (FIRMO et al., 2011; FIGUEIREDO, PEDRO e BARROSO, 2017).

A família Piperaceae contém cerca de 3700 espécies, apresentando uma morfologia de arbustos, trepadeiras, ervas e árvores de pequeno porte, sua distribuição ocorre na zona circuntropical. A família contém cinco grandes gêneros sendo *Verhuellia*, *Peperomia*, *Piper*, *Manekia* e *Zippelia*, sendo *Piper* e *Peperomia* os mais expressivos, contendo 2000 e 1600 espécies, respectivamente. Piperaceae além de ter a sua importância econômica também tem a sua importância medicinal principalmente na comunidade popular (CHRISTENHUSZ e BYNG, 2016; ALVES et al., 2019; REGASINI et al., 2008; SANTOS et al., 2014; PICARD et al., 2014; UTTARA et al., 2009; PARMAR et al., 1997; DE OLIVEIRA et al., 2019).

Cerca de 2000 espécies de *Piper* são bioativas como: anti-inflamatórias, antioxidantes, antibacterianas, antifúngicas e antimaláricas, (DURANT-ARCHIBOLD et al., 2018; PARRA et al., 2013; MGBEAHURUIKE et al., 2017; JARAMILLO-COLORADO et al., 2019).

Piper divaricatum pertence à família da Piperaceae, faz parte do gênero *Piper*, também conhecida popularmente como pau-de-angola, jaborandi-manso e betre, apresentando uma ampla distribuição na América Latina (ANDRADE et al., 2009; SILVA et al., 2014). *P. divaricatum* quando cozidas são usadas como antirreumáticos, quando em infusão serve para dores de cólica e reumáticas (ANDRADE et al., 2009; DA SILVA et al., 2010; SILVA et al., 2014; VILHENA et al., 2019). A espécie apresenta metabólitos secundários que são os terpenoides e fenilpropanoides (DA SILVA et al., 2016; DE OLIVEIRA et al., 2019).

Piper callosum Ruiz & Pav, é um arbusto que pode chegar a cerca de 1,00 m de altura, pertence ao gênero *Piper*, conhecido vulgarmente por elixir-paregórico, óleo-elétrico, ventre-livre, erva-de-soldado, panquilé e João-brandin, esta espécie tem uma ampla distribuição no Brasil, sendo encontrada também na Bolívia, Peru e

Colômbia (ANDRADE et al., 2009; GUIMARÃES et al., 2015; SILVA et al., 2017). Essa espécie é utilizada na medicina popular para os mais distintos tratamentos como para enjoo, dores dentes e cólica, anti-hemorrágico, anti-inflamatório, antidiarreico (SOUTO et al., 2012; ANDRADE et al., 2009; SILVA et al., 2017; GONÇALVES et al., 2019).

Óleo essencial da *Piper callosum* apresenta em sua composição química β -pineno e safrol, sendo o safrol o compostos majoritários e também já foram isolados compostos como: sesquiterpenos, monoterpenos, e fenilpropanóides (MAIA et al., 1987, 1993; SOUTO et al., 2012; MAJOLO et al., 2019; ALMEIDA et al., 2018; GONÇALVES et al., 2019; SILVA et al., 2017).

As inúmeras propriedades biológicas que os óleos essenciais possuem são consequência de seus constituintes químicos complexos, geralmente da classe dos terpenos (SANGWAN et al., 2001; ANDRADE et al., 2014). Para a aplicação dos óleos essenciais, é importante a caracterização química, pois a composição pode variar entre indivíduos de uma mesma espécie botânica. Essas variações devem-se a ocorrência de diferentes quimiotipos, de acordo com a adaptação da planta ao ambiente circundante ou seu desenvolvimento (CHAMORRO et al., 2012).

É possível extrair OEs de diversos órgãos das plantas: flores, folhas, frutos, raízes, cascas dos caules e sementes (SIMÕES e SPITZER, 2007). Em relação aos métodos de extração, os mais utilizados são enfloração, expressão (prensagem), extração com solvente, CO₂ supercrítico, arraste por vapor d'água e hidrodestilação (BUCKLE, 2003; DE OLIVEIRA et al., 2019). Porém, independentemente do tipo de extração, o rendimento em óleo essencial ao final da extração geralmente é muito baixo quantitativamente (SILVEIRA et al., 2012).

Apesar disso, estudos sobre as substâncias puras e misturas são importantes para conhecer as suas propriedades físicas e químicas (CONSTANTINO e GANI, 1994). Devido os déficits de dados experimentais parâmetros físico químico de substâncias puras na literatura, são utilizados métodos de contribuição de grupos para estimar as propriedades críticas (MARRERO e PADILHO, 1999; MARRERO e GANI, 2001. NANNOOLAL, 2006; GHARAGHEIZI et al., 2011; LI et al., 2016; MONDEJAR et al., 2017; TAHAMI et al., 2019).

Diante do presente trabalho objetivasse analisar as concentrações dos constituintes das espécies de *Piper divaricatum* e *Piper callosum* e avaliar os métodos de predição das propriedades críticas dos compostos majoritários das espécies em estudo.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

- Avaliar os melhores métodos de estimativa de propriedades físico-química das substâncias majoritárias que constituem os óleos essenciais das espécies de *Piper divaricatum* e *Piper callosum*.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Analisar a composição química dos óleos essenciais das espécies coletadas.
- Estimar o melhor método para calcular as propriedades físicas como pressão crítica, temperatura de ebulição, temperatura crítica e fator acêntrico para moléculas que apresentam apenas carbonos e hidrogênios na sua cadeia.
- Estimar o melhor método para calcular as propriedades físicas como pressão crítica, temperatura de ebulição, temperatura crítica e fator acêntrico de estruturas que apresentam carbonos, hidrogênios e oxigênios em sua cadeia.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 ÓLEOS ESSENCIAIS

Os óleos essenciais são muito conhecidos pelas aplicabilidades de seus em compostos bioativos como: antitumoral, anti-inflamatória, anti-parasitário, antioxidante que combate os radicais livres, antibacterianas, antifúngicas, inseticidas e antivirais (TARIQ et al., 2019). O uso de óleos essenciais vem desde as mais antigas civilizações do Oriente Médio, Índia, China, Grécia e Egito, que há milhares de anos já usavam os óleos essenciais como alternativa para saúde. (BILIA et al., 2014; BASER e BUCHBAUER, 2015; OLIVEIRA DE SOUZA et al., 2017; DONATO et al., 2020).

Os óleos essenciais são estruturas complexas obtidos por extrações de diferentes espécies vegetais principalmente em plantas medicinais, o qual apresentam metabólitos secundários envolvidos no processo do crescimento e reprodução das células, que são aplicados em áreas das indústrias farmacêuticas, alimentos e cosméticos. No momento atual, encontra-se cerca de 3000 óleos essenciais estipulados, sendo que 300 são de suma importância para fins da indústria cosméticos, alimentícias, sanitárias e agrônômicas (SILVA et al., 2003; TARIQ et al., 2019). Além disso, os óleos essenciais apresentam inúmeros mecanismos de ação devido a sua particularidade na composição química (TEIXEIRA et al., 2018).

As estruturas complexas dos óleos essenciais são formadas por monoterpenos, sesquiterpenos, fenilpropanóides, os quais são responsáveis pela proteção da planta contra microorganismos (OLIVEIRA DE SOUZA et al., 2017). A extração dos óleos essenciais são extraídos principalmente por hidrodestilação e seus constituintes possuem diferentes ações biológicas que são empregadas nos tratamentos de doenças como malária, hepatite e câncer (LAWAL e OGUNWANDE, 2013). Os óleos voláteis, apresentam afável aroma e são encontrados na forma oleosa, depois da extração, tais óleos são líquidos voláteis e apresentam propriedades de dissolverem em solventes orgânicos, em contato com a água os óleos essenciais apresentam pouca afinidade, limitando sua solubilidade, porém mesmo apresentando solubilidade limitada, o óleo é capaz de deixar a solução aquosa aromatizada, que são conhecidos como hidrolatos (TELES, 2003; PEREIRA et al., 2014).

Os óleos essenciais geralmente apresentam-se incolor, em muitos casos também costumam apresentar uma ligeira cor amarelada, quando extraídos, por serem compostos voláteis em geral não são muito estáveis, e quando exposto a luz, na existência de ar, com a presença de calor, umidade ou até mesmo com metais, particularmente são estes fatores responsáveis pela oxidação principalmente dos hidrocarbonetos terpênicos insaturados, tal influencia gera modificações químicas nos óleos essenciais, que são evidenciadas pela coloração, com a mudança de odor e aumento da viscosidade. Além do mais outra característica dos óleos voláteis é de apresentarem um paladar pungente, ácido e picante (CHEN et al., 2015; SIMÕES et al., 2017).

3.1.1 Extração de óleos essenciais

Existem diferentes métodos de extração de óleos essenciais, a extração pode ocorrer uma variação conforme a localização dos voláteis presente no vegetal e com a proposta de uso para o mesmo (SIMÕES et al., 2017).

Dentre as várias técnicas de extração existe o procedimento de hidrodestilação, é bastante indicado para vegetais frescos para obtenção dos óleos essenciais, sendo umas das técnicas tradicionais muito utilizadas até hoje. Nesse processo a planta fica diretamente em contato com a água fervente, sendo o aparelho de Clevenger muito utilizado para obtenção destas pequenas quantidades de óleos essenciais, nesta técnica a planta é submetida a um balão com água e aquecida, quando chega a determinada temperatura o vapor contendo água e óleo são desprendidos até chegar no condensador, após este procedimento ocorre a separação do óleo e da água, devido as diferentes densidades (SOVOVÁ e ALEKSOVSKI, 2006; BUSATO et al., 2014).

3.1.2 Óleos essenciais caracterização CG-EM

Dentre as técnicas de caracterização de óleos essenciais, a cromatografia gasosa (CG) tem sido um dos métodos mais utilizado nos laboratórios modernos. Esta técnica de análise moderna permite quantificar os compostos de forma eficiente. Logo, a cromatografia gasosa tem sido aplicada em diversas áreas, na quantificação dos mais variados compostos orgânicos de matrizes vegetais, animais, e entre outros. Então, os óleos voláteis identificados por este método vêm ganhando destaque por

possuir funções de uma maior complexidade na composição dos óleos essenciais (MARRIOTT et al., 2001; JALALI-HERAVI e PARASTAR, 2011).

A CG é uma técnica bastante satisfatória para óleos voláteis. Este método permite fazer inúmeras acoplações ao CG, para apresentar uma melhor resolução nas análises, por exemplo temos os infravermelho por transformada de Fourier (FT-IR), detector de ionização de chama (FID), espectrômetro de massa (EM) e espectrômetro de massa em tandem (MS/MS). O CG permite ainda fazer outras acoplações como é o caso da técnica de olfatométrica de GC (GC-O), existe também a acoplação multidimensional ao CG, estas técnicas permitem a análise de dos compostos voláteis. (MARRIOTT et al., 2001; KUBECZKA e FORMACEK, 2002; ZELLNER et al., 2008; JALALI-HERAVI e PARASTAR, 2011).

Ainda que exista diferentes adaptações para o CG, o CG-EM é o método mais utilizado para identificação de compostos voláteis na vasta área da química, pois esta técnica apresenta uma melhor resolução, quando comparado com os métodos de detecção tradicionais, desta forma este método realiza análises de analitos numerosos, o mesmo realiza ainda a identificação dos constituintes pelo espectro de massa, com baixa detecção e alta sensibilidade. (AMIGO et al., 2008; HAO et al., 2007; LUBEC e AFJEHI-SADAT, 2007; JALALI-HERAVI e PARASTAR, 2011).

3.2 FAMÍLIA PIPERACEAE

A família da Piperaceae é composta por cinco gêneros que são *Verhuellia*, *Peperomia*, *Piper*, *Manekia* e *Zippelia* (SCHUBERT et al., 2012; SANTOS et al., 2014), sendo o gênero *Piper* e *Peperomia* os predominantes. Desempenhando também um importante papel na economia, com a *Piper nigrum* (pimenta-preta), e também tem sua ampla aplicação na medicina popular (PARMAR et al., 1997; SANTOS et al., 2014). Além disso, estudos demonstram que os óleos essenciais de *P. nigrum* possuem compostos bioativos com poder de reduzir certas enfermidades como câncer, doenças cardiovasculares, doença de Alzheimer e doença de Parkinson (UTTARA et al., 2009; DE OLIVEIRA et al., 2019).

A distribuição da Piperaceae ocorre principalmente na região pantropical, e suas plantas apresenta uma morfologia caracterizada por ervas, trepadeiras, arbustos raramente se encontra árvores de grande porte, (CRAKER e SIMON, 1992; PARMAR et al., 1997; SANTOS et al., 2001; SANTOS et al., 2014).

3.2.1 Gênero *Piper*

Dentro da família da Piperaceae *Piper* é o gênero predominante apresenta mais de 2000 espécies distribuídas em regiões tropicais da Ásia, Oceania, África e também são encontradas em abundância na região neotropical (DYER e PALMER, 2004; DURANT-ARCHIBOLD et al., 2018).

Por apresentar atividades antimicrobianas e antifúngicas o gênero *Piper* tem sido amplamente utilizado para inibir pragas, principalmente na América Latina e na região das Índias. A espécie é usada como planta medicinal, pois o apresenta atividades anti-inflamatórias, antioxidantes, antibacterianas, antifúngicas e antimaláricas, (GARCÍA, 1992; ARNASON et al., 2005; BEZERRA et al., 2008; ORDAZ et al., 2011; PARRA et al., 2013; MGBEAHURUIKE et al., 2017; JARAMILLO-COLORADO et al., 2019).

3.2.2 *Piper divaricatum*

P. divaricatum se encontra na família da Piperaceae dentro do maior gênero desta família, *Piper*, esta espécie é encontrada como arbusto podendo chegar até 9,00 m de altura, também conhecida popularmente por pau-de-angola, jaborandi-manso e betre, a espécie geograficamente é abundante sendo encontrada nas principais regiões da América Central, Brasil, Bolívia, Colômbia, Equador, Guiana, Peru e Suriname (ANDRADE et al., 2009; SILVA et al., 2014).

As raízes desta espécie apresentam características aromáticas e um sabor forte que lembra o gengibre, além disso suas folhas e raízes são cozidas e utilizadas como antirreumático, a mesma pode ser empregada como infusão para tratar dores de cólica e reumáticas (ANDRADE et al., 2009; DA SILVA et al., 2010; SILVA et al., 2014; VILHENA et al., 2019).

Este vegetal é rico em óleo essencial, são encontrados neste vegetal metabólitos secundários, que são principalmente os terpenóides e fenilpropanóides, estas classes podem ser responsável de apresentarem atividades biológicas (DA SILVA et al., 2016; DE OLIVEIRA et al., 2019).

Estudos evidenciam que o óleo essencial de *Piper divaricatum* apresenta em sua composição química o metileugenol e o eugenol como compostos majoritários (DA SILVA et al., 2010; DA SILVA et al., 2014; DA SILVA et al., 2016; DE OLIVEIRA et al., 2019; VILHENA et al., 2019). Além disso, a composição química da espécie

pode variar por alguns motivos como: sazonalidade, ritmo circadiano e desenvolvimento, e assim ocorrendo algumas variações na composição dos constituintes químicos majoritários (GOBBO-NETO e LOPES, 2007; DE ALMEIDA et al., 2009; BARBOSA et al., 2012).

Metileugenol é uma substância volátil encontrado em diversas plantas aromáticas, apresentando atividade antibacteriana moderada e também pode se destacar sua atividade relacionada com o sistema nervoso central, sendo também empregado como anestésico geral em altas doses (LIMA et al., 2000; SAYYAH et al., 2002; TAVEIRA et al., 2003; VILHENA et al., 2019). O óleo volátil da *Piper divaricatum* pode ser extraído por hidrodestilação, extração com solvente orgânico, extração com CO₂ supercrítico e também por arraste a vapor (DE OLEVEIRA et al., 2019).

3.2.3 *Piper callosum*

Piper callosum Ruiz & Pav, é encontrada como arbusto que pode chegar cerca de 1,00 m de altura, esta espécie é conhecida pelos nomes de elixir-paregórico, óleo-elétrico, ventre-livre, erva-de-soldado, panquilé e João-Brandin, e está distribuída no Brasil nos estados do Acre, Amazonas, Amapá, Pará, Rondônia, Distrito Federal, Mato Grosso, Espírito Santo, Rio de Janeiro e Paraná (ANDRADE et al., 2009; GUIMARÃES et al., 2015; SILVA et al., 2017).

O uso de *Piper callosum* na medicina popular está relacionada com diversos tratamentos, sendo usada como anti-hemorragico, enjoo, dores de cólica e dentes, anti-inflamatório, antidiarreico, recurso terapêuticos para picadas de mosquitos, usado também para dores reumáticas, além disso o vegetal tem aplicação como adstringente e afrodisíaco, podendo também a espécie ser utilizada para ação inseticida (SOUTO et al., 2012; ANDRADE et al., 2009; SILVA et al., 2017; GONÇALVES et al., 2019).

A composição química do óleo essencial da espécie é rica em: α -pineno, β -pineno e safrol, sendo o safrol o constituinte em maior concentração no vegetal, além disso, já foram isolados da espécie metabólitos secundários, como os monoterpenos, sesquiterpenos, e fenilpropanóides e também amidas alcaloides (MAIA et al., 1987, 1993; SOUTO et al., 2012; MAJOLO et al., 2019; ALMEIDA et al., 2018; GONÇALVES et al., 2019; PARMAR et al., 1997; SILVA et al., 2017).

Os compostos com maior concentração presente em óleo volátil da espécie de *Piper divaricatum* e *Piper callosum* estão apresentados na Tabela 1. (p. 24-25)

Tabela 1 - Composição química dos compostos majoritários dos óleos voláteis das espécies de *Piper divaricatum* e *Piper callosum*.

Espécies	Compostos em maiores concentrações nas espécies	Referências
<i>P. divaricatum</i>	Metileugenol (71,36%), acetato de eugenol (9,65%) e eugenol (8,82%)	VILHENA et al., 2019
<i>P. divaricatum</i>	Metileugenol (61,85%), eugenol (21,7%), acetato de eugenol (4,35%) e β -elemeno (5,32%)	DE OLIVEIRA et al., 2019
<i>P. divaricatum</i>	Metileugenol (63.8%) e eugenol (23.6%)	DA SILVA et al., 2010
<i>P. divaricatum</i>	Germacreno D (9,4%), valenceno (11,1%), γ -cadineno (11,0%)	SILVA et al., 2014
<i>P. divaricatum</i>	Metileugenol (77.1%), eugenol (7.9%) e acetato de eugenol (3.8%)	DA SILVA et al., 2014
<i>P. divaricatum</i>	Metileugenol (69,2%) e eugenol (16,2%)	SOUTO et al., 2012
<i>P. divaricatum</i>	Linalol (23,4-29,7%), b-pineno (19,9 a 25,3%) e a-pineno (9,0 a 18,8%), 1,8-cineol (8,9-9,6%) e germacreno D (6,3-6,5%).	DE ALMEIDA et al., 2009.; CRUZ et al., 2011
<i>P. divaricatum</i>	Safrol (98%)	BARBOSA et al., 2012

<i>P. divaricatum</i>	Eugenol (37,5%), metil eugenol (36,3%), γ -elemeno (10,7%), asarona (4,6%) e trans- cariofileno (3,0%)	JARAMILLO-COLORADO et al., 2019
<i>P. callosum</i>	Safrol (69,2%), metileugenol (8,6%) e β -pineno (6,2%).	SOUTO et al., 2012
<i>P. callosum</i>	Safrol (67,0%), metileugenol (7,2%) e β -pineno (6,6%)	MAJOLO et al., 2019
<i>P. callosum</i>	Safrol (29,3%), o α -pineno (19,2%) e β -pineno (14,3%)	GONÇALVES et al., 2019
<i>P. callosum</i>	Safrol (53,8%), α -pineno (12,2%), β -pineno (7,7%) e Metileugenol (7,6%)	ALMEIDA et al., 2018
<i>P. callosum</i>	Safrol (66,0%), metileugenol (10,2%) e elemicina (3,7%).	DA SILVA et al., 2016
<i>P. callosum</i>	Safrol (29,3%), α -pineno (19,2%) e β -pineno (14,3%)	FANELA et al., 2016

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

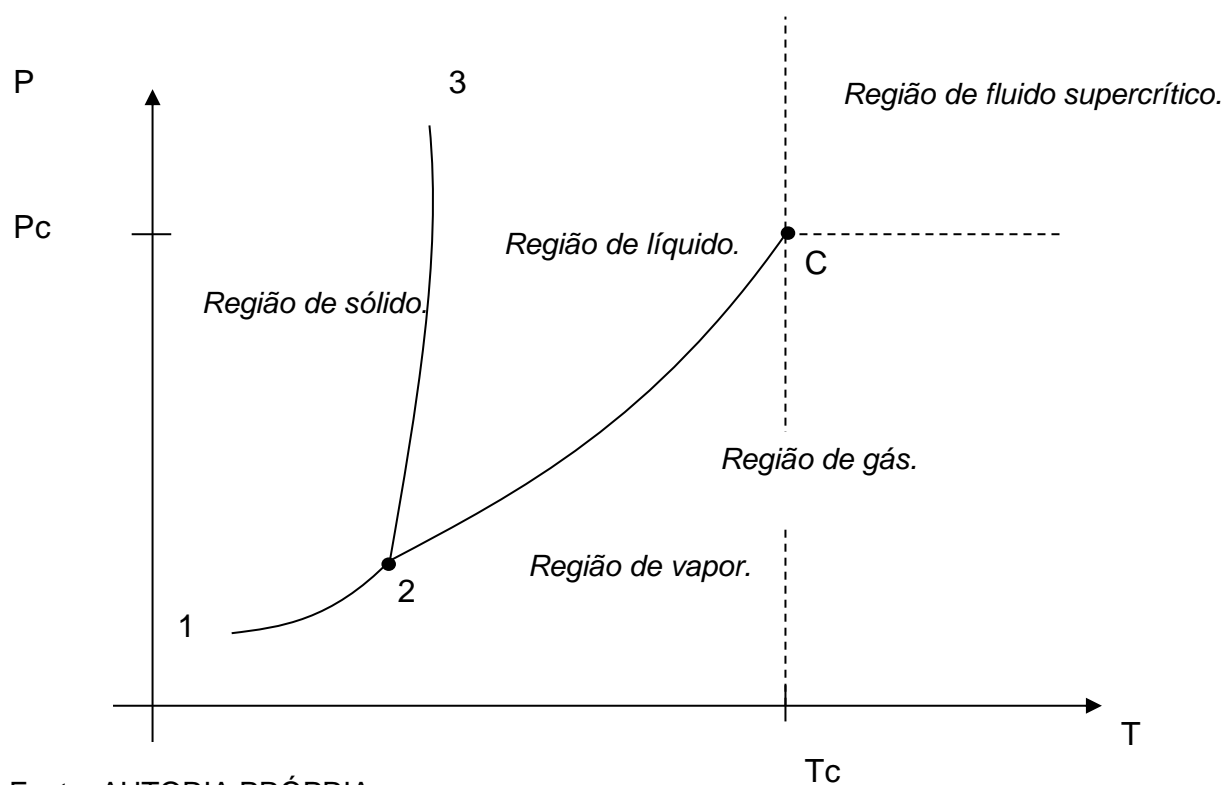
3.3 PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS

3.3.1 Propriedades Críticas

Segundo Sandler (1999) e Van Ness (2007), pressão, temperatura, entalpia, entropia e volume, podem ser representadas por um diagrama termodinâmico. Com isto pode-se relacionar temperatura e pressão que constitui em uma simultaneidade entre fases, como mostra a Figura 1. A coexistência de duas fases como temperatura e pressão podem ser indicadas por este diagrama. A curva de sublimação nesta condição é representada pela linha presente entre as regiões sólido e gás, já as curvas de fusão e vaporização separam as regiões de sólido e líquido, líquido e gás, por essa ordem.

Segundo a literatura (CENGEL,1996; VAN NESS, 2007), a região indicada na Figura 1 com temperatura e pressão maiores do que temperatura crítica (T_c) e a pressão crítica (P_c) é dita como região de fluido. Neste caso, um fluido que possui uma temperatura superior a temperatura crítica (T_c) é classificado no estado supercrítico.

Figura 1 - Diagrama de pressão/temperatura de uma substância pura



Os conhecimentos das propriedades termofísicas dos compostos puros, é de suma importância para conhecermos dados como pressões de vapor, aquecimento de vaporização, capacidade de calor e densidade que são fundamentais para processos químicos. Vale mencionar que na literatura há poucos dados sobre as constantes críticas de vários compostos orgânicos, além disso para sintetizar substâncias puras economicamente não são muito viáveis além de levar bastante tempo, vale ressaltar também que pode haver a degradação dessas substâncias, em determinados casos, desta forma o uso de métodos de contribuição do grupo ainda são excepcionalmente confiáveis e fáceis de fornecer resultados satisfatórios, a mecânica destes métodos só necessita saber de estruturas moleculares (NANNOOLAL, 2006; GHARAGHEIZI et al., 2011; LI et al., 2016; MONDEJAR et al., 2017; TAHAMI et al., 2019).

3.3.2 Fator Acêntrico (ω)

Quando na literatura não existem dados para essas propriedades físicas, faz-se o uso de alternativas como a utilização dos métodos de estimativa. Disto isso o fator acêntrico desempenha um importante papel para estimar propriedades termodinâmicas (PITZER et al., 1955; CHEN et al., 1993; HEMMATI-SARAPARDEH et al., 2018; TAHAMI et al., 2019).

4 METODOLOGIA

4.1 ÓLEOS VOLÁTEIS DE *Piper divaricatum* E *Piper callosum*

4.1.1 Vegetal *Piper divaricatum* e *Piper callosum*

As partes áreas (folhas e galhos) do vegetal *P. divaricatum* foram coletadas no Município de Belém no estado do Pará (Latitude 1°27'49.3"S, Longitude 48°26'37.2"W), no terreno da Universidade Federal do Pará (UFPA).

As folhas e galhos da *Piper callosum* foram coletadas no Município de Abaetetuba situado ao Norte do Pará com Latitude 01°43'05" sul e Longitude 48°52'57" oeste. Figura 2 mostra as espécies de *Piper divaricatum* e *callosum*.

Figura 2 – Vegetal *Piper divaricatum* e *Piper callosum*



Piper divaricatum

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA



Piper callosum

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

4.1.2 Obtenção do óleo essencial das espécies *Piper divaricatum* e *Piper callosum*

As folhas e os galhos foram transferidos para bandejas e secas por ventilação constante em estufa a 35°C durante 5 dias. Após a secagem, o material foi moído em moinho de facas e embalado a vácuo.

As extrações dos óleos essenciais foram realizadas no Laboratório de Engenharia de Produtos Naturais (LEPRON), da Faculdade de Engenharia Química na UFPA. Os óleos essenciais foram extraídos por hidrodestilação em aparelho de Clevenger modificado acoplado a um sistema de refrigeração para manutenção da água de condensação entre 10-15 °C durante 3 horas de acordo com a metodologia descrita por MAIA e ANDRADE (2009).

O teor de umidade residual das folhas foi determinado por um medidor de umidade GEHAKA, modelo IV 2500 por secagem com infravermelho. Após a extração, os óleos foram centrifugados durante 5 min a 3000 rpm, desidratados com Na₂SO₄ anidro e novamente centrifugados nas mesmas condições. Os óleos foram armazenados em ampolas de vidro âmbar, na ausência de oxigênio, conservados em ambiente refrigerado a 5 - 10 °C. Os rendimentos dos óleos essenciais foram calculados de acordo com a Equação 1.

$$R(\%) = \frac{V_o}{M - \left(\frac{M \times U}{100}\right)} \times 100\% \quad (1)$$

Onde R é o rendimento do óleo; V_o é o volume de óleo; M é a massa de material usado na extração; U é a umidade residual do material seco.

4.1.3 Análise da composição química

A análise da composição química dos óleos essenciais das espécies de *Piper divaricatum* e *Piper callosum* foram realizadas no laboratório Adolfo Ducke no Museu Paraense Emílio Goeldi por cromatografia de fase gasosa acoplada a espectrometria de massas nas condições utilizando as condições descritas na Tabela 2 (p. 30).

Tabela 2 – Condições do CG/EM utilizado na análise da composição química

Equipamento	Shimadzu QP 2010 ultra, auto-injetor: AOC-20i
Coluna	Coluna capilar de sílica Rtx-5MS (30 m x 0,25 mm; 0,25 µm de espessura do filme)
Temperatura da coluna	60°C a 240°C a 3°C/min
Temperatura do injetor	250 °C
Gás de arraste	Hélio
Velocidade de gás de arraste	32 cm/s (medida a 100 °c)
Tipo de injeção	Split 1:20 (solução de 2 µL de óleo em 500 µL de Hexano)
Volume de injeção	1 µL
Impacto eletrônico	70 eV
Temperatura da fonte íons	200 °C

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

A identificação dos componentes foi baseada na comparação e interpretação dos seus espectros de massas e índices de retenção com aqueles existentes nas bibliotecas Adams (2007) e FFNSC 2 (MONDELLO, 2015). Os índices de retenção foram determinados de acordo com a Equação 2, descrita por Van Den Dool e Kratz (1963), que relaciona o tempo de retenção dos compostos ao tempo de retenção de uma série de hidrocarbonetos homólogos (C8-C40).

$$IR = \left(\frac{100}{T.R(HP) - T.R(HA)} \right) \times T.R(x) - T.R(HA) + IK(HA) \quad (2)$$

Onde,

T.R: Tempo de retenção;

HP: Hidrocarboneto que elui em tempo de retenção posterior ao da substância desconhecida;

HA: Hidrocarboneto que elui em tempo de retenção anterior ao da substância desconhecida;

IK: Índice de Kovats;

X: Substância desconhecida.

A quantificação dos compostos voláteis foi feita por cromatografia gasosa com detector de ionização em chamas (FID) em sistema Shimadzu QP 2010 nas mesmas condições que a CG/EM, exceto que hidrogênio foi utilizado como gás de arraste.

4.2 MÉTODO PARA CALCULAR PROPRIEDADES CRÍTICAS E TEMPERATURA DE EBULIÇÃO

- CONSTANTINOU e GANI (1994)

Nos métodos de contribuições de grupo de primeira ordem são usados para moléculas pequenas e simples, estas moléculas devem apresentar na sua estrutura aproximadamente dois carbonos. Para estruturas que apresentam de três a seis carbonos são usados os níveis de segunda ordem. Já para níveis de terceira ordem é utilizado normalmente de sete a sessenta carbonos presente na estrutura. A hipótese deste método se faz principalmente na estrutura molecular dos compostos sendo efetuado em dois níveis respectivamente, os grupos de primeira ordem estão relacionados aos grupos funcionais simples, os de segunda ordem são grupos formados por blocos de primeira ordem (CONSTANTINOU e GANI, 1994).

O método de CONSTANTINOU e GANI (1994) podem ser expressos pelas seguintes equações.

$$\frac{T_b}{204,359} = \ln (\sum n_i T_{bi1} + \sum n_i T_{bi2}) \quad (3)$$

$$\frac{T_c}{181,128} = \ln (\sum n_i T_{ci1} + \sum n_i T_{ci2}) \quad (4)$$

$$(P_c - 1,3705)^{-0,5} - 0,100220 = \ln (\sum n_i P_{ci1} + \sum n_i P_{ci2}) \quad (5)$$

onde:

n_i = Número de grupos

T_{bi1} = Valor do grupo para temperatura de ebulição do tipo primeira ordem

T_{bi2} = Valor do grupo para temperatura de ebulição do tipo segunda ordem

T_{ci1} = Valor do grupo para temperatura crítica do tipo primeira ordem

T_{ci2} = Valor do grupo para temperatura crítica do tipo segunda ordem

P_{ci1} = Valor do grupo para pressão crítica do tipo primeira ordem

P_{ci2} = Valor do grupo para pressão crítica do tipo segunda ordem

- MARRERO & GANI (2001)

Marrero e Gani (2001) em seu trabalho mostraram uma nova metodologia, sendo análogo ao método de Constantinou e Gani (1994). Vale ressaltar que neste método existe a um terceiro nível de contribuição, também conhecido de terceira ordem. Este método pode ser expresso pelas equações abaixo.

$$\frac{T_b}{222,543} = \ln (\Sigma N_i T_{b1i} + \Sigma M_j T_{b2j} + \Sigma O_k T_{b3k}) \quad (6)$$

$$\frac{T_c}{231,239} = \ln (\Sigma N_i T_{c1i} + \Sigma M_j T_{c2j} + \Sigma O_k T_{c3k}) \quad (7)$$

$$(P_c - 5,9827)^{-0,5} - 0,108998 = (\Sigma N_i P_{c1i} + \Sigma M_j P_{c2j} + \Sigma O_k P_{c3k}) \quad (8)$$

Onde:

Ni / Mj / Ok = Número de grupos

Tb1i = Valor do grupo para temperatura de ebulição do tipo primeira ordem

Tb2j = Valor do grupo para temperatura de ebulição do tipo segunda ordem

Tb3k = Valor do grupo para temperatura de ebulição do tipo terceira ordem

Tc1i = Valor do grupo para temperatura crítica do tipo primeira ordem

Tc2j = Valor do grupo para temperatura crítica do tipo segunda ordem

Tc3k = Valor do grupo para temperatura crítica do tipo terceira ordem

Pc1i = Valor do grupo para pressão crítica do tipo primeira ordem

Pc2j = Valor do grupo para pressão crítica do tipo segunda ordem

Pc3k = Valor do grupo para pressão crítica do tipo terceira ordem

- MARRERO e PADILHO (1999)

Marrero e Padilho (1999) apresentaram uma técnica de predição para temperatura de ebulição de substâncias orgânicas puras, esta técnica estar relacionada principalmente nas interações na molécula (as ligações), sendo assim diferente dos outros métodos já mencionados. Disto isso as predições deste método são bastante precisa frente a avaliação de ésteres e ácidos graxos. O método pode ser expresso pelas equações (9), (10) e (11):

$$T_b = 204,66 + \Sigma \quad (9)$$

$$T_c = \frac{T_b}{(0,5851 - 0,9286 \Sigma - \Sigma)} \quad (10)$$

$$P_c = (0,1285 - 0,0059 n_A - \Sigma)^{-2} \quad (11)$$

onde:

Σ : Soma da frequência das interações entre os grupos que aparecem na molécula e suas contribuições

n_A : Número total de átomos na molécula

4.2.1 Método para calcular pressão de vapor

- VETERE (1991)

Vetere (1991) truncou a equação de Wagner após o terceiro termo, assumindo que o quarto parâmetro só é necessário quando se deseja correlacionar com alta precisão dados experimentais muito confiáveis. O método foi avaliado para aproximadamente 50 compostos que são representativos de uma classe geral de compostos, incluindo moléculas fortemente polares e compostos bifuncionais. Vetere (1991) comparou o método com algumas relações preditivas bem conhecida na literatura e o método proposto foi superior aos demais. As equações para a correlação são:

$$\ln(P_{vapor}) = \frac{A(1-T_r) + B(1-T_r)^{1,5} + C(1-T_r)^3}{T_r} \quad (12)$$

$$A = -\alpha_c$$

$$B = \frac{\alpha_b + 2\alpha_c - 3H - \ln P_c}{1,5(1-T_{br})^{0,5}}$$

$$C = \frac{\alpha_c - H - B(1-T_{br})^{0,5}}{(1-T_{br})^2}$$

$$\alpha_c = -0,294 + 1,1708 \frac{T_{br} \ln P_c}{1-T_{br}}$$

$$H = \frac{T_{br} \ln P_c}{1 - T_{br}}$$

Os valores de α_b são calculados de acordo com a classificação das substâncias nos seguintes grupos:

Hidrocarbonetos:

$$\frac{\alpha_b}{\alpha_c} = 2,7305 - 2,0325T_{br}$$

Álcoois:

$$\frac{\alpha_b}{\alpha_c} = 3,6775 - 3,2500T_{br}$$

Assim, utilizando-se apenas as constantes críticas (T_c e P_c) e a temperatura normal de ebulição (T_b) é possível prever a pressão de vapor.

- TU (1994)

Tu (1994), desenvolveu um método de contribuição de grupos para estimar a pressão de vapor de substâncias orgânicas que usa somente a massa molar (M) como dado de entrada, descrito a seguir:

(13)

$$\ln(MP)(kPa) = A + \frac{B}{T} - C \ln T - DT$$

$$T = \frac{T(K)}{100}$$

$$A = \sum n_i a_i + Q_a$$

$$C = \sum n_i c_i + Q_c$$

$$B = \sum n_i b_i + Q_b$$

$$D = \sum n_i d_i + Q_d$$

$$Q_i = \xi_1 q_1 + \xi_2 q_2$$

→ Para não hidrocarbonetos $q_1 = 0$

$$Q_a = 3,2193\xi_2 \quad Q_c = 1,3134\xi_2$$

$$Q_b = -9,4045\xi_2 \quad Q_d = -0,0660\xi_2$$

$$\xi_2 = f_0 + f_1Nc + f_2Nc^2 + f_3Nc^3 + f_4Nc^4$$

onde:

$a_i, b_i, c_i, d_i \rightarrow$ contribuição de cada grupo

$Nc \rightarrow$ n° de carbonos na molécula

$f_0, f_1, f_2, f_3, f_4 \rightarrow$ parâmetros que dependem da função orgânica

- NANNOOLAL et al., (2008)

Nannoolal et al., (2008) é um autor que desenvolveu um modelo de predição de propriedades físicas para compostos orgânicos e não eletrolíticos. Neste trabalho, a estrutura molecular da substância e um ponto de referência, normalmente valores de temperatura de ebulição, são as únicas informações necessárias para estimar a pressão de vapor em outras temperaturas por meio da metodologia de contribuição de grupos. Este método utilizou mais de 1600 substâncias para estimar os fatores de contribuição e as equações 13 e 14 do modelo. Na equação 13, o valor de dB é aproximadamente igual a zero para compostos apolares e calculado pela equação 15 para outros compostos. Em grupos monofuncionais de álcool (com apenas uma estrutura de – OH –) utiliza-se a equação 14.

$$\log(P) = (4,1012 + dB) \left(\frac{T_{rb}-1}{T_{rb}-(1/8)} \right) \quad (14)$$

$$\log(P) = (4,1012 + dB) \left(\frac{T_{rb}-1}{T_{rb}-(1/8)} \right) + \frac{0,75407}{1+7 \exp\left(\frac{201}{T}-91\right)} - 1 \quad (15)$$

$$dB = (\sum N_i C_i) - 0,176055 \quad (16)$$

Onde

A pressão de vapor (P) tem unidade em atm

$T_{rb}=T/T_b$; N_i é o número de grupos i na molécula; C_i é a contribuição do grupo indicado

4.2.2 Método de predição do fator acêntrico (ω)

- PITZER et al., (1955)

O fator acêntrico pode ser correlacionado com a pressão de vapor calculada previamente com os métodos de contribuição de grupos como Vetere (1991), TU (1994) e Ceriani et al., (2013). Segundo a definição de Pitzer et al., (1955) caracteriza a não esfericidade das moléculas e é calculado por:

$$\omega = -1 - \log(P_r)_{Tr=0,7} \quad (17)$$

onde:

Pr = Pressão reduzida

Tr = Temperatura reduzida

4.3 CRITÉRIOS DE ANÁLISE DA TEMPERATURA DE EBULIÇÃO, TEMPERATURA CRÍTICA, PRESSÃO CRÍTICA E FATOR ACÊNTRICO

Foram utilizados os mesmos critérios de análise aplicados por Melo (1994) para escolha dos melhores métodos de predição de propriedades físicas (T_b , T_c , P_c , ω). Os critérios de análise estão baseados em medidas de tendência central e medidas de dispersão descritas a seguir:

a) Erro Relativo Percentual (X_j)

É a medida de dispersão entre os valores calculados de cada propriedade através de cada método e os valores experimentais definidas por:

$$X_j = \frac{(Y_{calculado} - Y_{experimental})}{Y_{experimental}} 100 \quad (18)$$

b) Média do Erro Relativo Percentual (X_{rm})

É a medida de tendência central do erro, ou seja, o valor do ponto em torno do qual os erros se distribuem e é definida por:

$$X_{rm} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N X_j \quad (19)$$

c) Desvio Padrão (S)

É a medida da dispersão dos erros em torno da média e definida por:

$$S = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^N (X_j - X_{rm})^2} \quad (20)$$

d) Faixa de Erro (R)

É a diferença entre o maior e o menor erro relativo percentual:

$$R = X_{jmaximo} - X_{jminimo} \quad (21)$$

Os parâmetros decisivos para definir os melhores métodos de predição das propriedades físicas são a medida de tendência central, média do erro relativo percentual (X_{rm}), e a medida de dispersão dos erros, desvio padrão (S), respeitando os seguintes critérios: os menores valores da média do erro relativo percentual (X_{rm}) e do desvio padrão (S) definem os melhores métodos. Em casos que a menor média corresponder ao maior desvio padrão, ou vice-versa, seleciona-se o método pela menor faixa de erro (R).

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 OBTENÇÃO DOS ÓLEOS ESSENCIAIS

5.1.1 Obtenção do óleo essencial e composição química de *Piper divaricatum*

A extração do óleo essencial das folhas da espécie de *Piper divaricatum* foi realizada usando o método de hidrodestilação, o rendimento foi de 1,9% livre de umidade para 100g do vegetal.

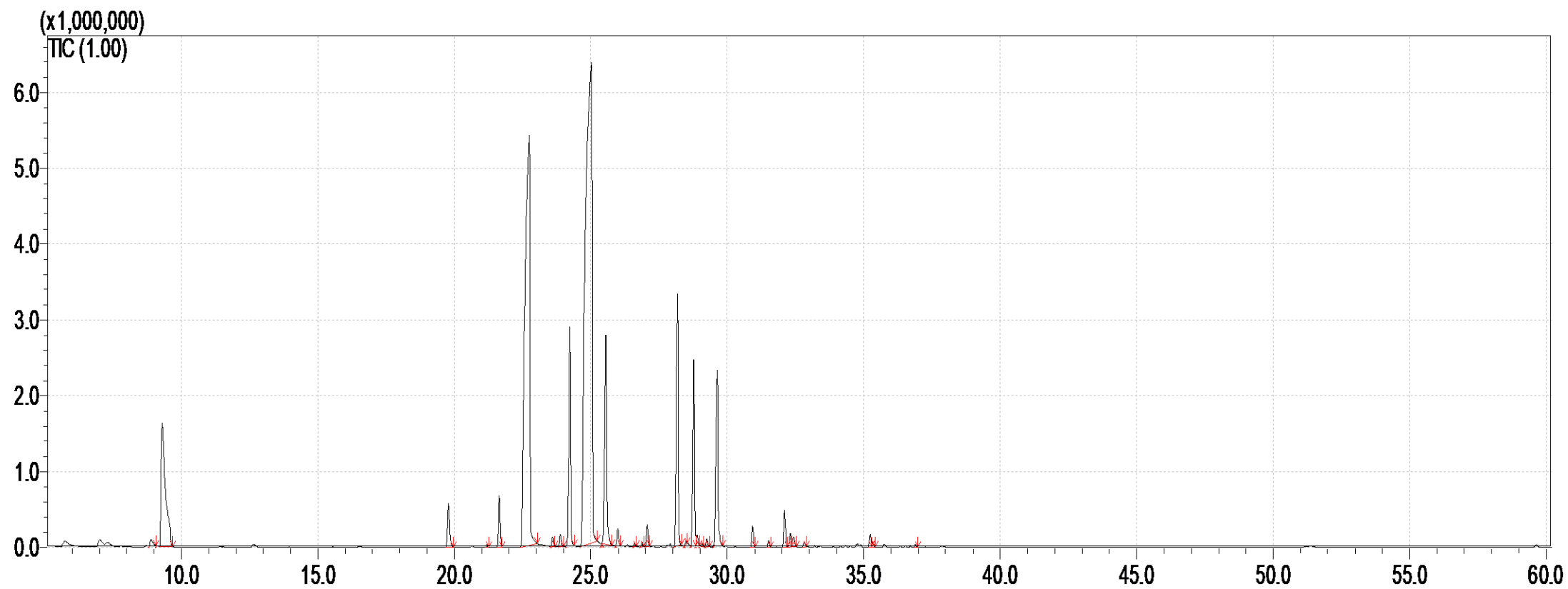
A análise da composição química do óleo essencial, identificou 26 compostos. Os constituintes mais representativos são referentes aos maiores picos, como ilustra o cromatograma na Figura 11 (p. 39).

No óleo essencial de *P. divaricatum* foi identificado 99,83% do conteúdo total. A classe predominante foi a dos fenilpropanoides, que apresentou teor de 68,64%. Além disso, vale destacar também a classe dos hidrocarbonetos monoterpênicos, que apresentou teor igual a 22,63%.

Os compostos majoritários identificados nos óleos essenciais de *P. divaricatum* foram o hidrocarboneto monoterpênico (*E*)-beta-ocimeno (6,5%), os hidrocarbonetos sesquiterpênicos (*E*)-cariofileno (5,4%) e germacreno D (5,6%) e os fenilpropanoides eugenol (24,3%) e metileugenol (38,5%).

Metileugenol também foi relatado como composto majoritário do óleo essencial de *P. divaricatum* com teores variando de 80,6 a 95,3% (MEIRELES et al., 2016). Da Silva et al., (2010) relataram óleo essencial de *P. divaricatum* com perfil químico similar ao obtido neste trabalho com 63,8% e 23,6% de metileugenol e eugenol, respectivamente. Este autor ainda relatou expressiva atividade fungicida e larvicida do óleo essencial.

Apesar de alguns estudos apontarem a presença constante de eugenol e metileugenol como principais compostos do óleo essencial de *P. divaricatum*, não é possível afirmar que esse é o único quimiotipo da espécie, pois outro estudo, feito com óleos essenciais das folhas e dos frutos dessa espécie, exibiu linalol (23,4–29,7%), β -pineno (19,9–25,3%) como majoritários no óleo das folhas (DE ALMEIDA et al., 2009) e Barbosa et al. (2012) identificaram o safrol como principal componente nos óleos das folhas (98,0%), frutas (87,0%) e galhos (83,0%). A tabela 3 (p. 40) mostra a composição química do óleo essencial da *Piper divaricatum*.

Figura 3 – Cromatograma do óleo essencial de *Piper divaricatum*

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

Tabela 3 – Composição química do óleo essencial da espécie de *Piper divaricatum*

IR (C)	IR (L)	Composto	(%)
1036	1032	(Z)- β -Ocimeno	0,23
1044	1044	(E)-beta-Ocimeno	6,53
1289	1285	Safrol	1,11
1330	1335	δ -Elemeno	1.11
1356	1356	Eugenol	24,29
1374	1374	α -Copaeno	0,17
1389	1389	β -Elemeno	4,98
1408	1403	Metileugenol	38,46
1419	1417	(E)-Cariofileno	5,39
1429	1430	β -Copaeno	0,35
1437	1439	Aromadendreno	0,06
1454	1452	α -Humuleno	0,43
1480	1484	germacreno D	5,65
1487	1489	β -Selineno	0,05
1494	1500	Biciclogermacreno	4,01
1497	1500	α -Muuroleno	0,23
1501	1495	γ -Amorfeno	0,06
1505	1508	Germacreno A	0,14
1517	1521	Acetato de eugenol	4,33
1546	1555	Elemicina	0,4
1560	1561	(E)-Nerolidol	0,12
1575	1577	Espatuleno	0,76
1580	1582	Óxido de cariofileno	0,28
1583	1590	Globulol	0,25
1654	1652	α -Cadinol	0,27
1656	1658	Selin-11-en-4- α -ol	0,12
		Hidrocarbonetos monoterpênicos	6,76
		Monoterpenos oxigenados	0,00
		Hidrocarbonetos sesquiterpênicos	22,63
		Sesquiterpenos oxigenados	1,8
		Fenilpropanoides	68,59
		Total	99,83

IR (C): Índice de retenção calculado; IR(L): Índice de retenção da literatura

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

Alguns estudos mostram que a ativação da via dos fenilpropanóides, com o aumento da atividade da enzima fenilalanina amônia liase, ocorre em situações onde a planta sofre estresse oxidativo, representando uma forma de defesa do vegetal (MENDOZA et al., 2018). Além disso, a expressão dessa enzima também é estimulada durante o desenvolvimento e por uma variedade de fatores ambientais, incluindo ataques patogênicos, lesões teciduais, irradiação por UV, exposição a metais pesados, baixas temperaturas e baixos níveis de nitrogênio, fósforo ou íons (ZANG e LIU, 2015; WEISSHAAR e JENKINS, 1998). Tais fatores podem estar relacionados à presença significativa de eugenol e metileugenol na espécie estudada neste trabalho.

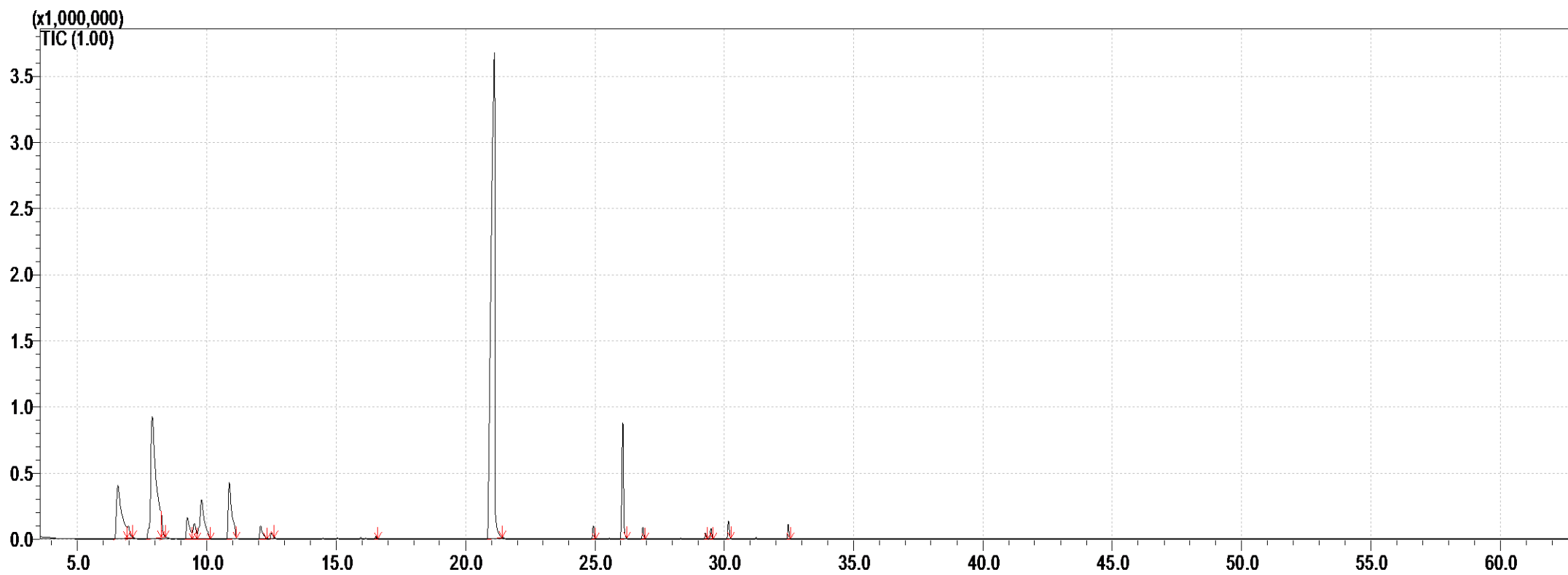
5.1.2 Obtenção do óleo essencial e composição química de *Piper callosum*

A extração do óleo essencial das folhas da espécie de *P. callosum* foi realizada pelo método de hidrodestilação, o rendimento foi de 1,7% livre de umidade para 100g da planta.

Efetou-se o estudo com cromatográfico do óleo volátil das folhas secas da espécie de *P. callosum*, por cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massa (GC/EM) e foram identificados 17 compostos sendo que os constituintes majoritários são referentes aos maiores picos, como ilustra o cromatograma na Figura 12.

Foram identificados 99,96% dos compostos, sendo 56,43% fenilpropanóides, 40,76% hidrocarbonetos monoterpênicos, 1,66% hidrocarbonetos sesquiterpênicos e 0,41% monoterpênicos oxigenados, o que possibilitou a identificação dos compostos majoritários da *P. callosum* e os principais constituintes majoritários foram: safrol (50,59%), α -pineno (8,12%) e β -pineno (18,03%).

Estudos anteriores relatam as composições da espécie *Piper callosum* e a Tabela 1 (p. 24-25) mostra seus constituintes majoritários com suas respectivas concentrações (FANELA et al., 2016.; ALMEIDA et al., 2018.; GONÇALVES et al., 2019). DA SILVA et al., (2016) encontraram compostos da espécie *P. callosum*, os quais foram: Safrol (66,0%), metileugenol (10,2%) e elemicina (3,7%) como compostos majoritários. A Tabela 4 mostra a composição química do óleo essencial da *Piper callosum*.

Figura 4 – Cromatograma do óleo essencial de *Piper callosum*

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

Tabela 4 – Composição química do óleo essencial da espécie de *Piper callosum*

Compostos	IR (C)	IR (L)	(%)
α-Pino	933	932	8,12
β-Pino	977	974	18,03
α -Terpino	1017	1014	2,01
<i>p</i> -Cimeno	1023	1020	1,16
1,8-Cineol	1030	1026	4,90
γ -Terpino	1058	1054	5,45
Terpinoleno	1088	1086	1,09
Linalool	1099	1095	0,31
α -Terpineol	1190	1186	0,10
Safrol	1292	1285	50,59
α -Copaeno	1378	1374	0,53
Metileugenol	1404	1403	5,31
E-Cariofileno	1422	1417	0,49
γ -Muurolo	1479	1478	0,23
Germacreno D	1484	1484	0,41
Pentadecano	1499	1500	0,70
Elemicina	1556	1555	0,53
Hidrocarbonetos Monoterpênicos			40,76
Monoterpenos Oxigenados			0,41
Hidrocarbonetos Sesquiterpênicos			1,66
Fenilpropanóides			56,43
Outros			0,70
Total			99,96

IR (C): Índice de retenção calculado; IR(L): Índice de retenção da literatura

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

5.2 ESTIMATIVA DO MÉTODO DE CONTRIBUIÇÃO DE GRUPO DAS PROPRIEDADES TERMOFÍSICA DE SUBSTÂNCIAS PURAS

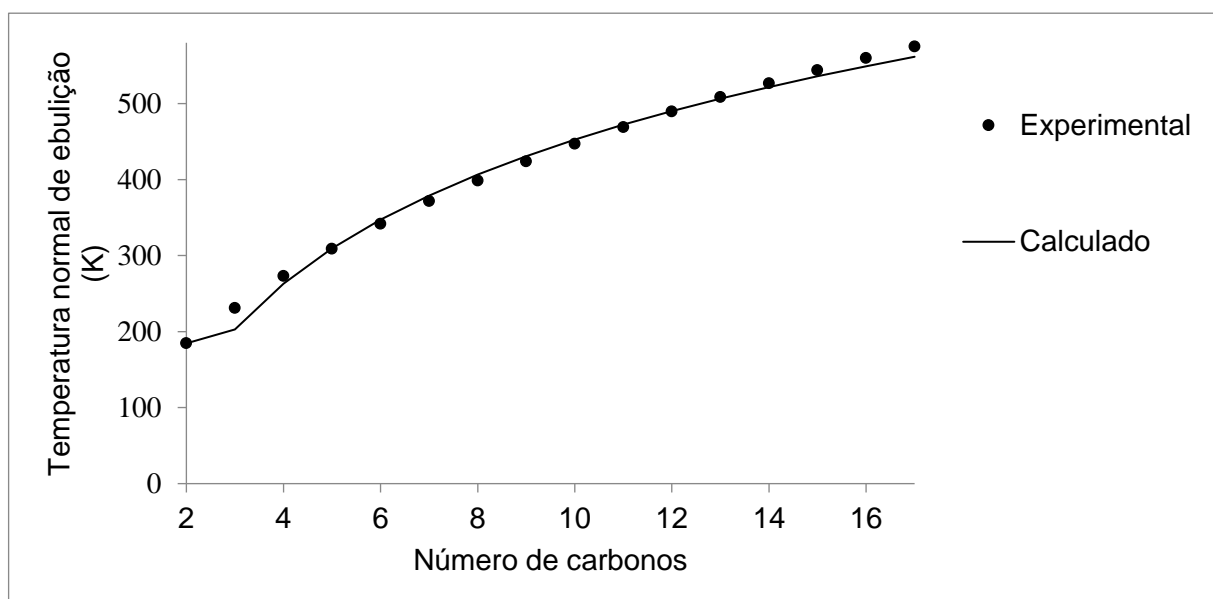
Para definir o melhor método para propriedades termofísicas das substâncias, precisamos levar em consideração, a média do erro relativo percentual (X_{rm}), e o desvio padrão (S), são estes os critérios para determinação do melhor método para estimar propriedades físicas conforme Melo (1994). A tabela 5 mostra o melhor método.

A Tabela 5 – Indica o método que apresentou melhores resultados quando comparados aos valores experimentais dos hidrocarbonetos

Propriedade física	$X_{rm}(\%)$	$S(\%)$	$R(\%)$	Métodos
Temperatura de ebulição	3,26	5,34	9,48	Marrero e Gani (2001)
Temperatura crítica	1,75	4,44	22,52	Marrero e Gani (2001)
Pressão crítica	1,49	1,95	7,85	Marrero e Gani (2001)
Fator acêntrico	0,9480	2,4961	5,2952	Nannoolal et al., (2008)

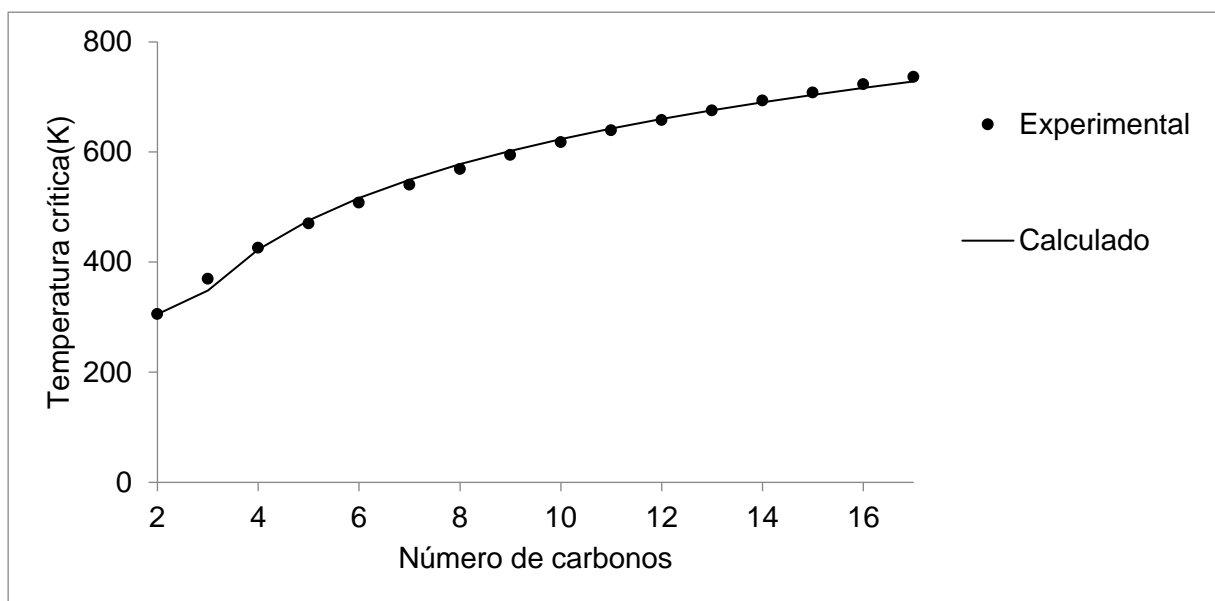
Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

Figura 5 – Valores experimentais e calculados pelo melhor método para a temperatura normal de ebulição de hidrocarbonetos



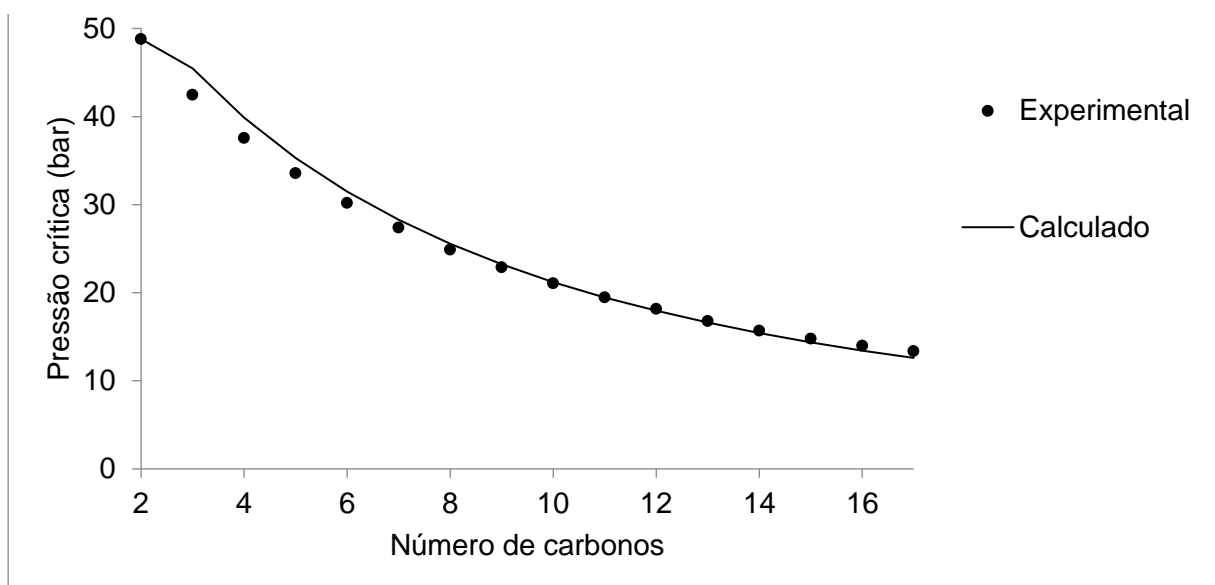
Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

Figura 6 – Valores experimentais e calculados pelo melhor método para a temperatura crítica de hidrocarbonetos



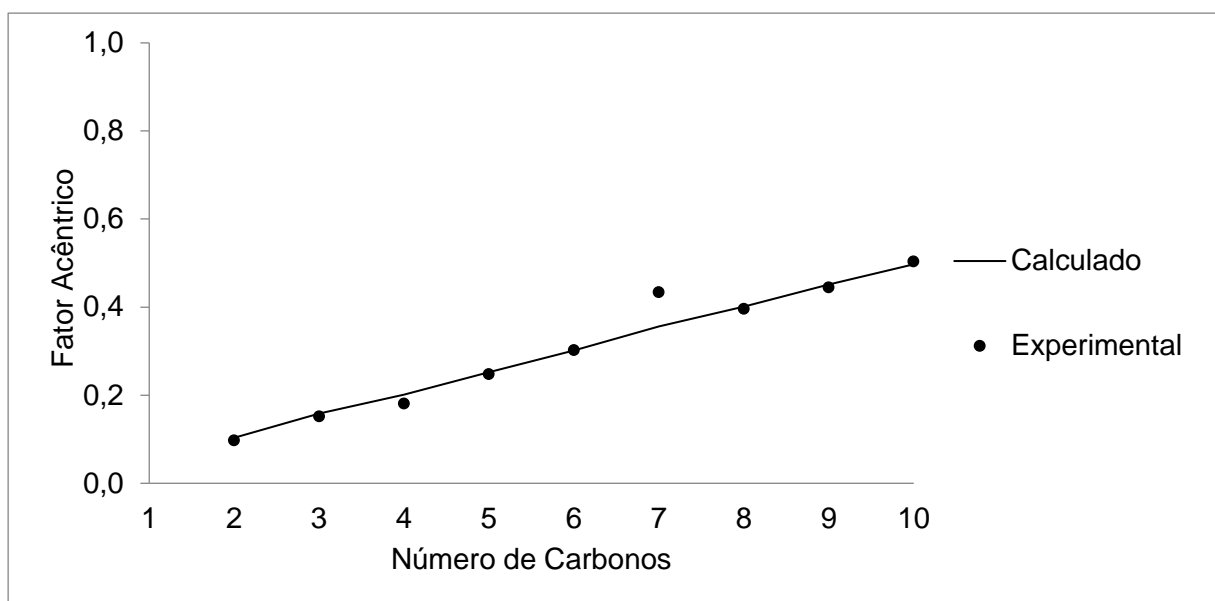
Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

Figura 7 – Valores experimentais e calculados pelo melhor método para a pressão crítica de hidrocarbonetos



Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

Figura 8 – Valores experimentais e calculados pelo melhor método para o fator acêntrico de hidrocarbonetos



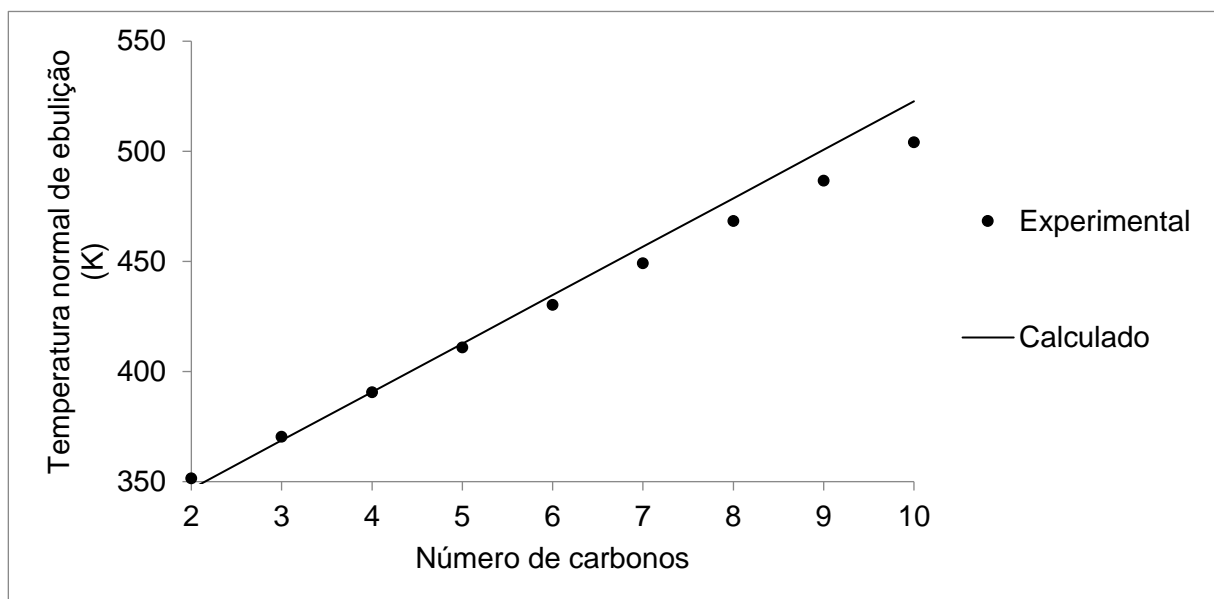
Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

A Tabela 6 – Indica o método que apresentou melhores resultados quando comparados aos valores experimentais dos álcoois

Propriedade física	<i>X_{rm}</i> (%)	<i>S</i> (%)	<i>R</i> (%)	Métodos
Temperatura de ebulição	0,80	1,62	7,23	Marrero e Pardillo (1999)
Temperatura crítica	0,06	1,34	8,80	Marrero e Pardillo (1999)
Pressão crítica	2,98	2,81	8,62	Marrero e Gani (2001)
Fator acêntrico	0,03	0,23	1,13	Nannoolal et al., (2008)

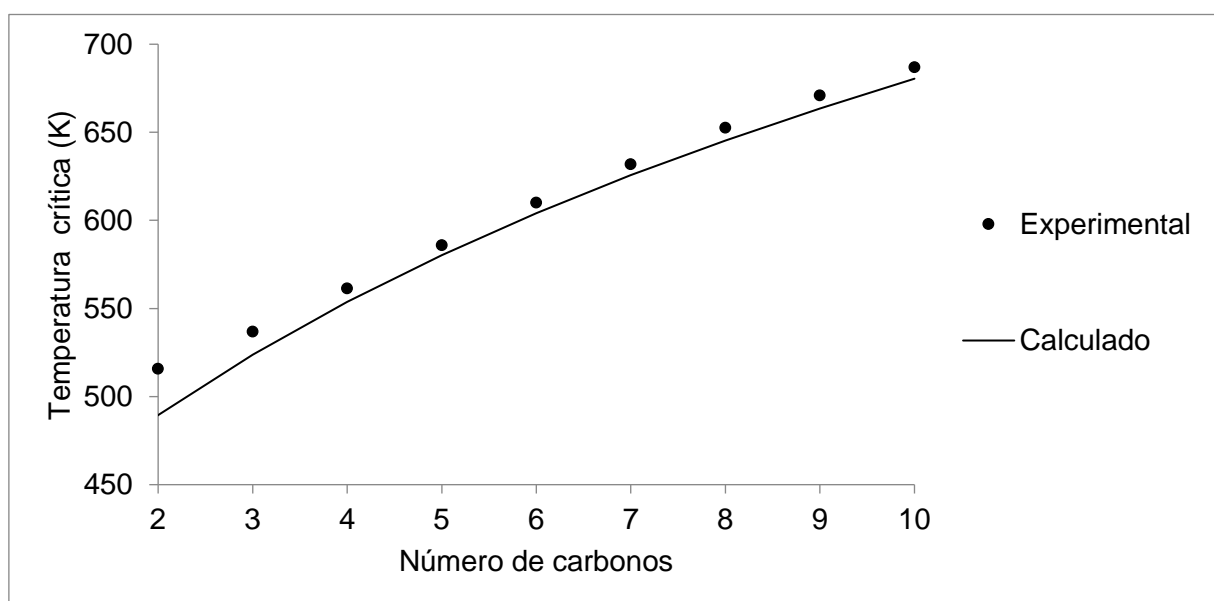
Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

Figura 9 – Valores experimentais e calculados pelo melhor método para a temperatura normal de ebulição de álcoois



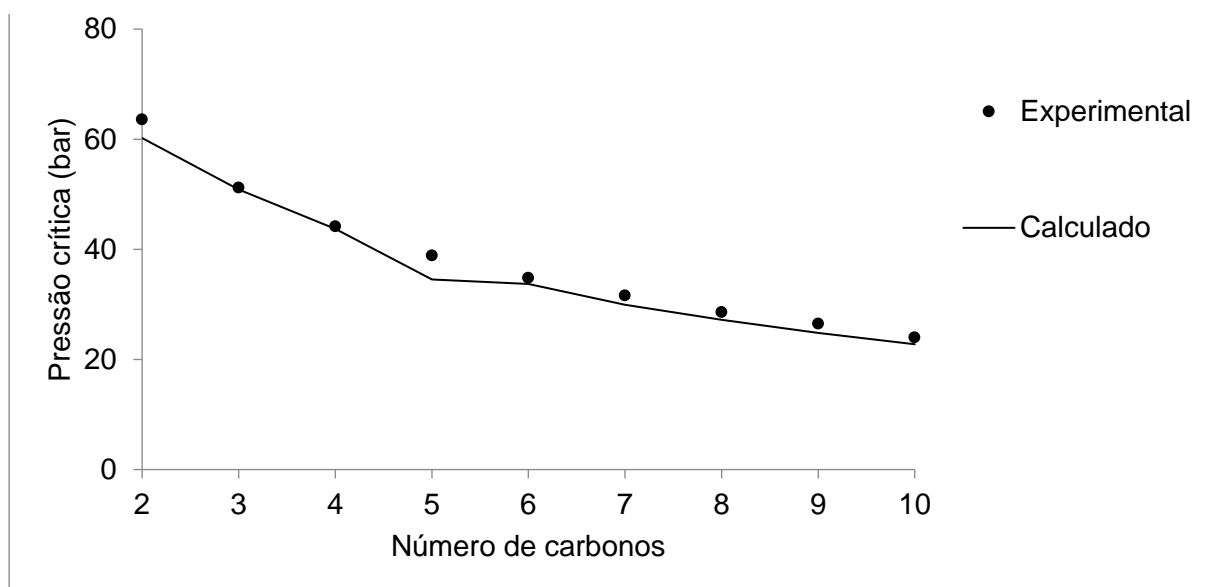
Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

Figura 10 – Valores experimentais e calculados pelo melhor método para a temperatura crítica de álcoois



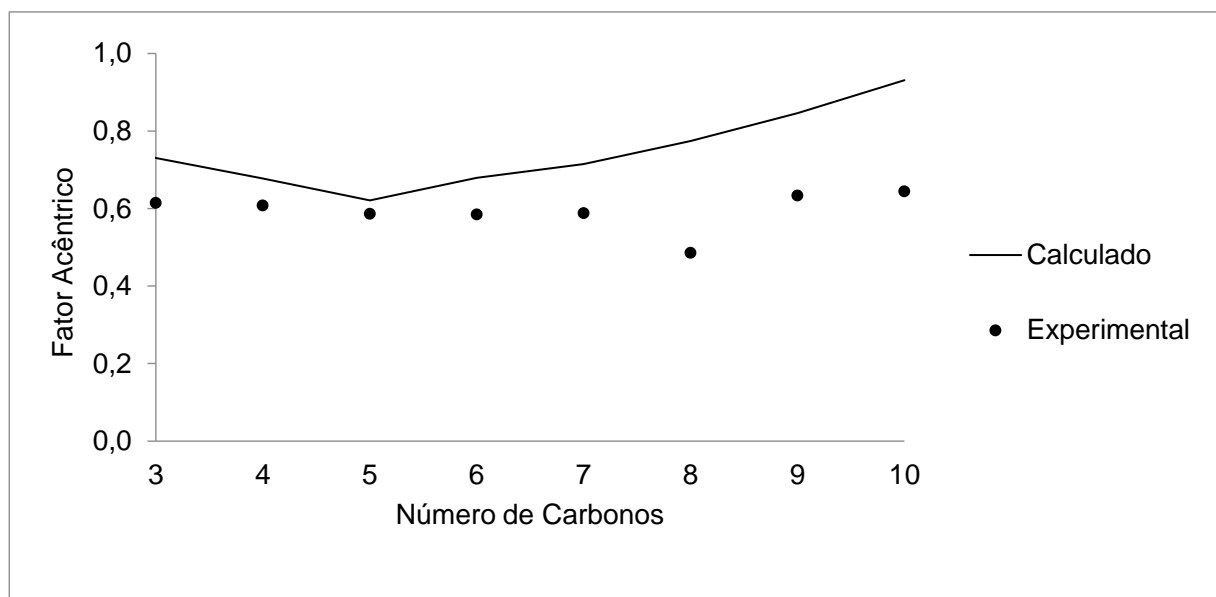
Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

Figura 11 – Valores experimentais e calculados pelo melhor método para a pressão crítica de álcoois



Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

Figura 12 – Valores experimentais e calculados pelo melhor método para o fator acêntrico de álcoois

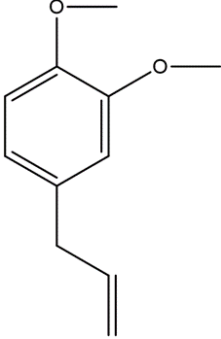
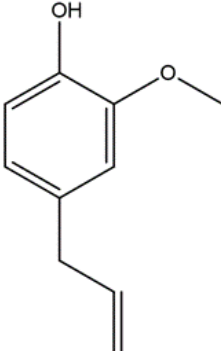


Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

5.3 PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS DOS COMPOSTOS MAJORITÁRIOS DO ÓLEO ESSENCIAL DA ESPÉCIE DE *Piper divaricatum*

O cálculo das substâncias majoritárias da *Piper divaricatum*, foi feito pelo método de Morrero e Padilho (1999), pois este método foi o mais satisfatório para compostos com a presença de oxigênio, disto isso como os compostos em maior concentração presente no óleo essencial da *Piper divaricatum* são os fenilpropanoides que são: metileugenol e eugenol, este método se faz o mais adequado para predição das propriedades físicas para estas substâncias. A Tabela 7 (p. 50) mostra as propriedades destas substâncias.

Na Tabela 7 – Valores preditos das propriedades físicas das substâncias majoritárias que compõem o óleo volátil de *Piper divaricatum*

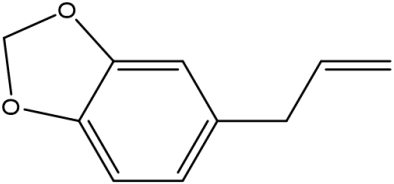
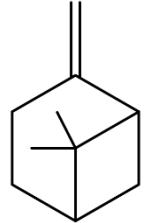
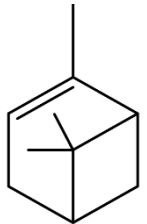
Substâncias	M [g / gmol]	Estrutura molecular	Fórmula molecular	Tb (K)	Tc (K)	Pc (bar)	ω
Metileugenol	178		C ₁₁ H ₁₄ O ₂	308,3960	426,3530	26,2613	0,59
Eugenol	164		C ₁₀ H ₁₂ O ₂	517,2600	650,9258	33,8160	1,30

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

5.4 PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS DOS COMPOSTOS MAJORITÁRIOS DO ÓLEO ESSENCIAL DA ESPÉCIE DE *Piper callosum*

Para estimar as propriedades físicas dos compostos majoritários da espécie *Piper callosum*, foram utilizados dois métodos diferentes, pois esta espécie apresenta duas classe majoritárias, sendo uma os hidrocarbonetos e os fenilpropanóides, sendo assim foi usado o método de Morrero e Gani (2001) para os compostos que não apresentam oxigênio na sua estrutura que são: β -Pineno e α -Pineno, vale ressaltar que este método foi o que apresentou melhor resultado frente de compostos sem oxigênio. Para os fenilpropanoides foi utilizado o método de Marrero e Padilho (1999), pois este método é o mais satisfatório para compostos que apresentam oxigênio em sua estrutura que é o caso do safrol, sendo assim estruturas que apresentam oxigênio este método é o melhor para estimar as propriedades físicas. A Tabela 8 (p. 52) mostra o cálculo das propriedades físicas das substâncias majoritárias.

Tabela 8 – Valores estimados das propriedades críticas, fatores acêntricos das substâncias majoritárias que compõem o óleo essencial de *P. callosum*

Substâncias	M [g / gmol]	Estrutura molecular	Fórmula molecular	Tb (K)	Tc (K)	Pc (bar)	ω
Safrol	162		C ₁₀ H ₁₀ O ₂	292,5860	366,4054	31,8183	1,24
β -Pineno	136		C ₁₀ H ₁₆	426,6371	639,2602	28,3607	0,23
α -Pineno	136		C ₁₀ H ₁₆	418,8926	623,0503	28,3172	0,26

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

6 CONCLUSÃO

O estudo da espécie de *Piper divaricatum* apresentou um rendimento de 1,9% livre de umidade, através do cromatográfico realizado frente ao óleo essencial da espécie e com a cromatografia gasosa acoplada a espectro de massas (CG/EM), possibilitou a identificação do óleo deste vegetal, onde foram identificado 26 constituintes , sendo eugenol (24,29%) e metileugenol (38,46%) como compostos majoritários para a espécie de *Piper divaricatum*.

A espécie de *Piper callosum* forneceu um rendimento de 1,7% livre de umidade, com o auxílio do cromatográfico realizado frente ao óleo essencial do vegetal e com a cromatografia gasosa acoplada a espectro de massas (CG/EM), tornou possível o reconhecimento dos constituintes químicos presente no óleo da *Piper callosum* apresentando um total de 17 constituintes, sendo três dotados como os compostos majoritários para este vegetal que são: safrol (50,59%), α -pineno (8,12%) e β -pineno (18,03).

Com o auxílio de métodos para estimar as propriedades físicas de substâncias puras das estruturas químicas com a presença apenas de carbono e hidrogênio, com estrutura característica de hidrocarbonetos cíclicos e aromáticos sem a presença de oxigênio melhor método selecionado foi o de Marrero e Gani (2001) e para as moléculas que tem oxigênio em sua composição química o melhor método foi o de Marrero & Padilho (1999), estes métodos foram para este trabalho, excepcionais para estimar as propriedades físicas das substâncias puras. Nannoolal et al., 2008 foi o melhor método para estimar o fator acêntrico dos constituintes majoritários da *Piper divaricatum* e *Piper callosum*.

REFERÊNCIAS

- ADAMS, R. P. **Identification of essential oil components by gas chromatography/mass spectrometry**. 4. ed. Carol Stream: Allured Publishing Corporation, 2007. 804 p.
- ALMEIDA, C. A.; AZEVEDO, M. M. B.; CHAVES, F. C. M.; DE OLIVEIRA, M. R.; RODRIGUES, I.A.; BIZZO, H.R.; GAMA, P.E.; ALVIANO, D.S.; ALVIANO C. S. *Piper* essential oils inhibit *Rhizopus oryzae* growth, biofilm formation, and *rhizopuspepsin* activity. **Canadian Journal of Infectious Diseases and Medical Microbiology**, v. 2018, p. 7, 2018.
- ALVES, N. S. F.; SETZER W.N.; DA SILVA, J. K. R. The chemistry and biological activities of *Peperomia pellucida* (Piperaceae): A critical Review. **Journal of Ethnopharmacology**, v. 232, p. 90-102, 2019.
- AMIGO, J. M.; SKOV, T.; BRO, R.; COELLO, J.; MASPOCH, S. Solving GC-MS problems with PARAFAC2. **TrAC - Trends in Analytical Chemistry**, v. 27, p. 714-725, 2008.
- ANDRADE, B. F. M. T.; BARBOSA, L. N.; PROBST, I. S.; FERNANDES JÚNIOR, A. Antimicrobial activity of essential oils. **Journal of Essential Oil Research**, v. 26, n. 1, p. 34-40, 2014.
- ANDRADE, E. H. A.; GUIMARAES, E. F.; MAIA, J. G. S. **Variabilidade química em óleos essenciais de espécies de *Piper* da Amazônia**. Belém: FEQ/UFPA, 2009. 448p.
- ARNASON, J. T.; DURST, T.; PHILOGENE, B. J. R. Phytochemical discovery of new botanical insecticides. Biopesticides of plant origin. **Lavoiser and Intercept, Ltd., Paris and Andover**, p. 37-46, 2005.
- BARBOSA, Q. P. S.; CÂMARA, C. A. G.; RAMOS, C. S.; NASCIMENTO, D. C. O.; LIMA-FILHO, J. V.; GUIMARÃES, E. F. Chemical composition, circadian rhythm and antibacterial activity of essential oils of *Piper divaricatum*: a new source of safrole. **Quím. Nova**, v. 25, p.1806-1808, 2012.
- BASER, K. H. C.; BUCHBAUER, G. **Handbook of essential oils: science, technology, and applications**. CRC press, 2015.
- BEZERRA, D. P.; MOURA, D. J.; ROSA, R. M.; DE VASCONCELLOS, M. C.; E SILVA, A. C. R.; DE MORAES, M. O.; SILVEIRA, E. R.; LIMA, M. A. S.; HENRIQUES, J. A. P.; COSTA-LOTUFO, L. V.; SAFFI, J. Evaluation of the genotoxicity of piplartine, an alkalamide of *Piper tuberculatum*, in yeast and mammalian V79 cells. **Mutation Research - Genetic Toxicology and Environmental Mutagenesis**, v. 652, p. 164-174, 2008.
- BILIA, A. R.; GUCCIONE, C.; ISACCHI, B.; RIGHESCHI, C.; FIRENZUOLI, F.; BERGONZI, M. C. Essential oils loaded in nanosystems: a developing strategy for a successful therapeutic approach. **Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine**, v. 2014, 2014.

BRUNETON, Jean et al. **Pharmacognosy, phytochemistry, medicinal plants**. Lavoisier publishing, 1999.

BUCKLE, J. Basic plant taxonomy, chemistry, extraction, biosynthesis, and analysis. *In*: BUCKLE, J. **Clinical aromatherapy: essential oils in practice**. 2. ed. Londres: Churchill Livingstone, p.39–75, 2003.

BUSATO, N. V.; SILVEIRA, J. C.; COSTA, A. O. S. D.; JUNIOR, C. Modeling strategies for essential oil extraction by hydrodistillation and steam distillation. **Ciência Rural**, v. 44, p. 1574-1582, 2014.

CENGEL, Y. A.; BOLES, M. A. **Termodinâmica**. Mc Graw-Hill, 1996.

CERIANI, R.; GANI, R.; LIU, Y. A. Prediction of vapor pressure and heats of vaporization of edible oil/fat compounds by group contribution. **Fluid Phase Equilibria**, v. 337, p. 53-59, 2013.

CHAMORRO, E. R.; ZAMBÓN, S. N.; MORALES, W. G.; SEQUEIRA, A. F.; VELASCO, G. A. Study of the chemical composition of essential oils by gas chromatography. *In*: SALIH, B.; ÇELIKBIÇAK, Ö. (Eds.). **Gas chromatography in plant science, wine technology, toxicology and some specific applications**. Rijeka: InTech, p. 307–324, 2012.

CHEN, D. H.; DINIVAH, M. V.; JENG, C. Y. New acentric factor correlation based on the Antoine equation. **Industrial & engineering chemistry research**, v. 32, p. 241-244, 1993.

CHEN, J.-W.; WU, Q.-H.; ROWLEY, D.C.; AL-KAREEF, A. M. Q.; WANG, H. Anticancer agent-based marine natural products and related compounds. **Journal of Asian Natural Products Research**, v. 17, p. 199-216, 2015.

CHRISTENHUSZ, M. J. M.; BYNG, J. W. The number of known plants species in the world and its annual increase. **Phytotaxa**, v. 261, p. 201-217, 2016.

CONSTANTINOU, L.; GANI, R. New group contribution method for estimating properties of pure compounds. **AIChE Journal**, v. 40, 1994.

CRAKER, L. E.; SIMON, J. E. (Ed.). **Herbs, spices, and medicinal plants: recent advances in botany, horticulture, and pharmacology**. Psychology Press, 1992.

CRUZ, S. M.; CÁCERES, A.; ÁLVAREZ, L.; MORALES, J.; APEL, M. A.; HENRIQUES, A. T.; SALAMANCA, E.; GIMÉNEZ, A.; VÁSQUEZ, Y.; GUPTA, M. P. Chemical composition of essential oils of *Piper jacquemontianum* and *Piper variable* from Guatemala and bioactivity of the dichloromethane and methanol extracts. **Revista Brasileira de Farmacognosia**, v. 21, p. 587-593, 2011.

DA SILVA, J. K. R., ANDRADE, E. H. A., GUIMARÃES, E. F., MAIA, J. G. S. Essential oil composition, antioxidant capacity and antifungal activity of *Piper divaricatum*. **Natural Product Communications**, v. 5, p. 477-480, 2010.

DA SILVA, J. K. R., PINTO, L. C., BURBANO, R. M., MONTENEGRO, R. C., ANDRADE, E. H. A., MAIA, J. G. S. Composition and cytotoxic and antioxidant activities of the oil of *Piper aequale* Vahl. **Lipids in health and disease**, v. 15, p. 174, 2016.

DA SILVA, J. K. R.; SILVA, J. R. A.; NASCIMENTO, S. B. DA LUZ, S. F. M.; MEIRELES, E. N.; ALVES, C. N.; RAMOS, A. R.; MAIA, J. G. S. Antifungal activity and computational study of constituents from *Piper divaricatum* essential oil against *Fusarium* infection in black pepper. **Molecules**, v. 19, p. 17926-17942, 2014.

DA SILVA, J. K. R.; SILVA, N. N. S.; SANTANA, J. F. S.; ANDRADE, E. H. A.; MAIA, J. G. S.; SETZER, W. N. Phenylpropanoid-rich Essential Oils of *Piper* Species from the Amazon and their Antifungal and Anti-cholinesterase Activities. **Natural Product Communications**, v. 11, p. 1907 – 1911, 2016.

DE ALMEIDA, J. G. L.; SILVEIRA, E.R.; PESSOA, O.D.L.; NUNES, E.P. Essential Oil Composition From Leaves and Fruits of *Piper divaricatum* G. Mey. **Journal of Essential Oil Research**, v. 21, p. 228-230, 2009.

DE OLIVEIRA, M. S.; DA CRUZ, J. N.; GOMES SILVA, S.; DA COSTA, W. A.; DE SOUSA, S. H. B.; BEZERRA, F. W. F.; TEIXEIRA, E.; SILVA, N. J. N.; ANDRADE, E. H. A.; NETO, A. M. J. C.; CARVALHO JUNIOR, R. N. Phytochemical profile, antioxidant activity, inhibition of acetylcholinesterase and interaction mechanism of the major components of the *Piper divaricatum* essential oil obtained by supercritical CO₂. **The Journal of Supercritical Fluids**, v. 145, p. 74-84, 2019.

DONATO, R.; SACCO, C.; PINI, G.; BILIA, A.R. Antifungal activity of different essential oils against *Malassezia* pathogenic species. **Journal of Ethnopharmacology**, v, 249, p. 112376, 2020.

DURANT-ARCHIBOLD, A. A.; SANTANA, A. I.; GUPTA, M. P. Ethnomedical uses and pharmacological activities of most prevalent species of genus *Piper* in Panama: A review. **Journal of Ethnopharmacology**, v. 217, p. 63-82, 2018.

DYER, L. A.; PALMER, A. D. N (Ed.). *Piper*: a model genus for studies of phytochemistry, ecology, and evolution. **New York: Kluwer academic/Plenum publishers**, 2004.

FANELA, T. L. M.; BALDIN, E. L. L.; PANNUTI, L. E.; CRUZ, P. L.; CROTTI, A. E. M.; TAKEARA, R.; KATO, M. J. Lethal and Inhibitory Activities of Plant-Derived Essential Oils Against *Bemisia tabaci* Gennadius (Hemiptera: Aleyrodidae) Biotype B in Tomato. **Neotropical entomology**, v. 45, p. 201-210, 2016.

FIGUEIREDO, A. C.; PEDRO, L. G.; BARROSO, J. G. voláteis e óleos essenciais. **Agrotec**, v. 24, p. 14-17, 2017.

FIRMO, W. C. A.; MENEZES, V. J. M.; PASSOS, C. E. C.; DIAS, C. N.; ALVES, L. P. L.; DIAS, I. C. L.; NETO, M. S.; OLEA, R. S. G. contexto histórico, uso popular e concepção científica sobre plantas medicinais. **Cadernos de Pesquisa**, v. 18, p. 90-95, 2011.

GARCÍA, B et al. **Flora medicinal de Colombia Botánica médica**. Tercer Mundo, 1992.

GHARAGHEIZI, F.; ESLAMIMANESH, A.; MOHAMMADI, A. H.; RICHON, D. Determination of critical properties and acentric factors of pure compounds using the artificial neural network group contribution algorithm. **Journal of Chemical & Engineering Data**, v. 56, p. 2460-2476, 2011.

GOBBO-NETO, L.; LOPES, N. P. PLANTAS MEDICINAIS: FATORES DE INFLUÊNCIA NO CONTEÚDO DE METABÓLITOS SECUNDÁRIOS. **Quim. Nova**, v. 30, p. 374-381, 2007.

GONÇALVES, R.; AYRES, V. F. S.; MAGALHÃES, L. G.; CROTTI, A. E. M.; CORRÊA, G. M.; GUIMARÃES, A. C.; TAKEARA, R. Chemical Composition and Schistosomicidal Activity of Essential Oils of Two *Piper* Species from the Amazon Region. **Journal of Essential Oil Bearing Plants**, v. 22, p. 811-820, 2019.

GUIMARÃES, E. F.; CARVALHO-SILVA, M.; MONTEIRO, D.; MEDEIROS, E. S.; QUEIROZ, G. A. Piperaceae in **Lista de Espécies da Flora do Brasil**. Jardim Botânico do Rio de Janeiro. 2015. Disponível em: <http://floradobrasil.jbrj.gov.br/jabot/floradobrasil/FB12772>. Acesso em: 20 jan. 2019.

HAO, C.; ZHAO, X.; YANG, P. GC-MS and HPLC-MS analysis of bioactive pharmaceuticals and personal-care products in environmental matrices. **TrAC - Trends in Analytical Chemistry**, v. 26, p. 569-580, 2007.

HEMMATI-SARAPARDEH, A.; AMELI, F.; VARAMESH, A.; SHAMSHIRBAND, S.; MOHAMMADI, A. H.; DABIR, B. Toward generalized models for estimating molecular weights and acentric factors of pure chemical compounds. **international journal of hydrogen energy**, v. 43, p. 2699-2717, 2018.

JALALI-HERAVI, M.; PARASTAR, H. Recent trends in application of multivariate curve resolution approaches for improving gas chromatography-mass spectrometry analysis of essential oils. **Talanta**, v. 85, p. 835-49, 2011.

JARAMILLO-COLORADO, B.; PINO-BENITEZ, N.; GONZÁLEZ-COLOMA, A. Volatile composition and biocidal (antifeedant and phytotoxic) activity of the essential oils of four Piperaceae species from Choco-Colombia. **Industrial Crops and Products**, v. 138, p.111463, 2019.

KUBECZKA, K. H.; FORMACEK, V. **Essential Oils Analysis by Capillary Gas Chromatography and Carbon-13 NMR Spectroscopy**, 2nd, Completely Revised, Edition, 2002.

LAWAL, O. A.; OGUNWANDE, I. A. Essential Oils from the Medicinal Plants of Africa. Medicinal Plant Research in Africa: **Pharmacology and Chemistry**, p. 203-224, 2013.

LI, J.; XIA, L.; XIANG, S. A new method based on elements and chemical bonds for organic compounds critical properties estimation. **Fluid Phase Equilibria**, v. 417, p. 1-6, 2016.

LIMA, C.C.; CRIDDLE, D. N.; COELHO-DE-SOUZA, A. N.; MONTE, F. J. Q.; JAFFAR, M.; LEAL-CARDOSO, J. H. Relaxant and antispasmodic actions of methyleugenol on guinea-pig isolated ileum. **Planta medica**, v. 66, p. 408-411, 2000.

LUBEC, G.; AFJEHI-SADAT, L. Limitations and pitfalls in protein identifications by mass spectrometry. **Chemical Reviews**, v. 107, p. 3568-3584, 2007.

MAIA, J. G. S. M.; ANDRADE, E. H. A. Database of the Amazon aromatic plants and their essential oils. **Quimica Nova**, v. 32, p. 595-622, 2009.

MAIA, J. G. S.; GREEN, C. L.; MILCHARD, M. J. New sources of natural safrole. **Perfum Flavor**, v. 18, p. 20-22, 1993.

MAIA, J. G. S.; SILVA, M.; LUZ, A. I. R.; ZOGHBI, M. G. B.; RAMOS, L.S. Espécies de *Piper* da Amazônia Ricas em Safrol. **Quim. Nova**, v. 10, p. 200-204, 1987.

MAJOLO, C.; MONTEIRO, P. C.; NASCIMENTO, A. V. P.; CHAVES, F. C. M.; GAMA, P. E.; BIZZO, H. R.; CHAGAS, E. C. Essential Oils from Five Brazilian *Piper* Species as Antimicrobials Against Strains of *Aeromonas hydrophila*. **Journal of Essential Oil Bearing Plants**, v. 22, p. 746 – 761, 2019.

MARRERO, J.; GANI, R. Group-contribution based estimation of pure component properties. **Fluid Phase Equilibria**, v. 183-184, p. 183-2081, 2001.

MARRERO, J.; PARDILHO-FONTDEVILLA, E. New group contribution method for estimating properties of pure compounds. **AIChE Journal**, v. 40, 1999.

MARRIOTT, P. J.; SHELLIE, R.; CORNWELL, C. Gas chromatographic technologies for the analysis of essential oils. **Journal of Chromatography A**, v. 936, p. 1-22, 2001

MELO, S. A. B. V. **Cálculo de propriedades Termodinamicas em Sistemas Contendo Produtos Naturais e Fluido Supercrítico**. Dissertação de Mestrado. Programa de Engenharia Química, COPPE, UFRJ, Rio de Janeiro, p. 122, 1994.

MGBEAHURUIKE, E. E.; YRJÖNEN, T.; VUORELA, H.; HOLM, Y. Bioactive compounds from medicinal plants: Focus on *Piper* species. **South African Journal of Botany**, v. 112, p. 54-69, 2017.

MONDEJAR, M. E.; CIGNITTI, S.; ABILDSKOV, J.; WOODLEY, J. M.; HAGLIND, F. Prediction of properties of new halogenated olefins using two group contribution approaches. **Fluid Phase Equilibria**, v. 433, p. 79-96, 2017.

MONDELLO, L. **Mass Spectra of Flavors and Fragrances of Natural and Synthetic Compounds**. Wiley Blackwell, 2015.

NANNOOLAL, Y. **Development and critical evaluation of group contribution methods for the estimation of critical properties, liquid vapour pressure and liquid viscosity of organic compounds**. 2006. Tese de Doutorado (Chemical engineering) – University of Kwazulu-Natal, Durban Campus For the degree Doctor of Philosophy, p. 483, 2006.

NANNOOLAL, Y.; RAREY, J.; RAMJUGERNATH, D. Estimation of Pure Component Properties Part 3. Estimation of The Vapor Pressure of Non-Electrolyte Organic Compounds via Group Contributions and Group Interactions. **Fluid Phase Equilibria**, v. 269, p. 117–133, 2008.

OLIVEIRA DE SOUZA, L. I.; BEZZERA-SILVA, P. C.; DO AMARAL FERRAZ NAVARRO, D. M.; DA SILVA, A. G.; DOS SANTOS CORREIA, M. T.; DA SILVA, M. V.; DE FIGUEIREDO, R. C. B. Q. The chemical composition and trypanocidal activity of volatile oils from Brazilian Caatinga plants. **Biomedicine and Pharmacotherapy**, v. 96, p. 1055-1064, 2017.

ORDAZ, G.; D'ARMAS, H.; YÁÑEZ, D.; MORENO, S. Chemical composition of essential oils from leaves of *Helicteres guazumifolia* (Sterculiaceae), *Piper tuberculatum* (Piperaceae), *Scoparia dulcis* (Arecaceae) and *Solanum subinerme* (Solanaceae) from Sucre, Venezuela. **Revista de Biología Tropical**, v. 59, p. 585-595, 2011.

PARMAR, V. S.; JAIN, S. C.; BISHT, K. S.; JAIN, R.; TANEJA, P.; JHA, A.; TYAGI, O. D.; PRASAD, A. K.; WENGEL, J.; OLSEN, C. E.; BOLL, P. M. Phytochemistry of the genus *Piper*. **Phytochemistry**, v. 46, p. 597-673, 1997.

PARRA, J. E.; DELGADO, W. A.; CUCA, L. E. Cumanenic acid, a new chromene isolated from *Piper cf. cumanense* Kunth. (Piperaceae). **Phytochemistry letters**, v. 4, p. 280-282, 2011.

PARRA, J. E.; PATINO, O. J.; PRIETO, J. A.; DELGADO, W. A.; CUCA, L. E. A new benzoic acid derivative isolated from *Piper cf. cumanense* Kunth (Piperaceae). **Phytochemistry Letters**, v. 6, p. 590-592, 2013.

PEREIRA, A. I. S.; PEREIRA, A. G. S.; SOBRINHO, O. P. L.; CANTANHEDE, E. K. P.; SIQUEIRA, L. F. S. Antimicrobial activity in fighting mosquito larvae *Aedes aegypti*: Homogenization of essential oils of linalool and eugenol. **Educacion Quimica**, v. 25, p. 446-449, 2014.

PICARD, G.; VALADEAU C.; ALBAN-CASTILLO J.; ROJAS R.; STARR J.R.; CALLEJAS-POSADA R.; BENNETT S.A.L.; ARNASON J.T. Assessment of *in vitro* pharmacological effect of Neotropical Piperaceae in GABAergic bioassays in relation to plants traditionally used for folk illness by the Yanasha (Peru). **Journal of Ethnopharmacology**, v. 155, p. 1500-1507, 2014.

PITZER, K.S.; LIPPMAN, D.Z.; CURL-Jr., HUGGINS, C.M.; PATERSEN. The volumetric and Thermodynamic Properties of Fluids I. Theoretical Basis and Virial Coefficients II. Compressibility Factor, Vapor Pressure and Entropy of Vaporization. **Journal of The American Chemists' Society**, v.77, p.3427-3440, 1955.

REGASINI, L. O.; COTINGUIBA, F.; SIQUEIRA, J. R.; BOLZANI, V. S.; SILVA, D. H. S.; FURLAN, M.; KATO, M. J. Radical scavenging capacity of *Piper arboreum* and *Piper tuberculatum* (Piperaceae). **Latin American Journal of Pharmacy**, v. 27, p. 900-903, 2008.

SANDLER, S.I. Chemical and Engineering Thermodynamics. Third Ed. John Wiley & Sons, New York, 1999.

SANGWAN, N. S.; FAROOQI, A. H. A.; SHABIH, F.; SANGWAN, R. S. Regulation of essential oil production in plants. **Plant Growth Regulation**, v. 34, p. 3-21, 2001.

SANTOS, P. R. D. D.; MOREIRA, D. D. L.; GUIMARÃES, E. F.; KAPLAN, M. A. C. Essential oil analysis of 10 Piperaceae species from the Brazilian atlantic forest. **Phytochemistry**, v. 58, p. 547-551, 2001.

SANTOS, T. G.; FUKUDA, K.; KATO, M. J.; SARTORATO, A.; DUARTE, M. C. T.; RUIZ, A. L. T. G.; DE CARVALHO, J. E.; AUGUSTO, F.; MARQUES, F. A.; SALES MAIA, B. H. L. N. Characterization of the essential oils of two species of Piperaceae by one- and two-dimensional chromatographic techniques with quadrupole mass spectrometric detection. **Microchemical Journal**, v. 115, p. 113-120, 2014.

SAYYAH, M.; VALIZADEH, J.; KAMALINEJAD, M. Anticonvulsant activity of the leaf essential oil of *Laurus nobilis* against pentylenetetrazole- and maximal electroshock-induced seizures. **Phytomedicine**, v. 9, p. 212-216, 2002.

SCHUBERT, H. K.; TAYLOR, M. S.; SMITH, J. F.; BORNSTEIN, A. J. A. Systematic Revision of the Genus *Manekia* (Piperaceae). **Systematic Botany**, v. 37, p. 587-598, 2012.

SILVA, J. A.; OLIVEIRA, F. F.; GUEDES, E. S.; BITTENCOURT, M. A. L.; OLIVEIRA, R. A. Antioxidant activity of *Piper arboreum*, *Piper dilatatum*, and *Piper divaricatum*. **Rev. bras. plantas med**, v.16, 2014.

SILVA, J.; ABEBE, W.; SOUSA, S. M.; DUARTE, V. G.; MACHADO, M. I. L.; MATOS, F. J. A. Analgesic and anti-inflammatory effects of essential oils of Eucalyptus. **Journal of ethnopharmacology**, v. 89, p. 277-283, 2003.

SILVA, R. J. F.; DE AGUIAR-DIAS A. C. A.; FAIAL K. C. F.; DE MENDONCA M. S. Morphoanatomical and physicochemical profile of *Piper callosum*: Valuable assessment for its quality control. **Brazilian Journal of Pharmacognosy**, v. 27, p. 20-33, 2017.

SILVEIRA, J. C.; BUSATO, N. V.; COSTA, A. O. S. DA; COSTA JÚNIOR, E. F. DA. Levantamento e análise de métodos de extração de óleos essenciais. **Enciclopédia Biosfera**, v. 8, p. 2038–2052, 2012.

SIMÕES, C. M. O.; SCHENKEL, E. P.; MELLO, J. C. P.; MENTZ, L. A.; PETROVICK, P. R. **Farmacognosia: da planta ao medicamento**. Porto Alegre: Artmed, 2017.

SIMÕES, C. M. O.; SPITZER, V. Óleos voláteis. In: SIMÕES, C. M. O.; SCHENKEL, E. P.; GOSMANN, G.; MELLO, J. C. P. DE; MENTZ, L. A.; PETROVICK, P. R. (Orgs.). **Farmacognosia: da planta ao medicamento**. 6. ed. Porto Alegre: Editora da UFRGS, 2007. p.467–495.

SMITH, J.M.; VAN NESS, H.C.; ABBOTT, M.M. **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química**. Tradução: Eduardo Mach Queiroz; Fernando Luiz P. Pessoa. 7. Ed. Rio de Janeiro: Editora LTC, 2007.

SOUTO, R. N. P.; HARADA, A. Y.; ANDRADE, E. H. A.; MAIA, J. G. S. Insecticidal Activity of *Piper* Essential Oils from the Amazon Against the Fire Ant *Solenopsis saevissima* (Smith) (Hymenoptera: Formicidae). **Neotropical entomology**, v. 41, p. 510-517, 2012.

SOVOVÁ, H.; ALEKSOVSKI, S. A. Mathematical model for hydrodistillation of essential oils. **Flavour and fragrance journal**, v. 21, p. 881-889, 2006.

TAHAMI, S.; MOVAGHARNEJAD, K.; GHASEMITABAR, H. Estimation of the critical constants of organic compounds via a new group contribution method. **Fluid Phase Equilibria**, v 494, p. 45-60, 2019.

TAHAMI, S.; GHASEMITABAR, H.; MOVAGHARNEJAD, K. Estimation of the acentric factor of organic compounds via a new group contribution method. **Fluid Phase Equilibria**, v. 499, p. 112246, 2019.

TARIQ, S.; WANI S.; RASOOL, W.; SHAFI K.; BHAT, M.A.; PRABHAKAR, A.; SHALLA, A.H.; RATHER, M.A. A comprehensive review of the antibacterial, antifungal and antiviral potential of essential oils and their chemical constituents against drug-resistant microbial pathogens. **Microbial Pathogenesis**, v. 134, 2019.

TAVEIRA, F. S. N.; DE LIMA, W. N.; ANDRADE, E. H. A.; MAIA, J. G. S. Seasonal essential oil variation of *Aniba canelilla*. **Biochemical systematics and ecology**, v. 31, p. 69-75, 2003.

TEIXEIRA, A. M. R.; LIMA I. K. C.; XAVIER, M. R.; PEREIRA, R. L. S.; GONCALVES, B. G.; DE SENA, D. M.; DA COSTA, J. M.; FREIRE, P. T. C.; SARAIVA, G. D.; BENTO, R. R. F.; DE FARIA, J. L. B.; TOLEDO, T. A. Vibrational spectroscopy study of essential oils from *Plectranthus amboinicus* Lour. Spreng and *Vanillosmopsis arborea* Baker. **Vibrational Spectroscopy**, v. 98, p. 22-29, 2018.

TELES, R. M. Estudo analítico do linalol contido no óleo essencial extraído de galho da espécie *Aniba duckei kostermans* e sua aplicação como agente bactericida. **São Luís**, 2003.

TU, C. H. Group-Contribution Method for Estimation of Vapor Pressure. **Fluid Phase Equilibria**, v-99, p. 105-120, 1994.

UTTARA, B.; SINGH, A.V.; ZAMBONI, P.; MAHAJAN, R.T. Oxidative stress and neurodegenerative diseases: A review of upstream and downstream antioxidant therapeutic options. **Current Neuropharmacology**, v. 7, p. 65-74, 2009.

VAN DEN DOOL, H.; KRATZ, P. D. A generalization of the retention index system including linear temperature programmed gas-liquid partition chromatography. **Journal of Chromatography**, v. 11, p. 463-471, 1963.

VETERE, A. Predicting the Vapor Pressure of Pure Compounds by Using the Wagner Equation. **Fluid Phase Equilibria**, v. 62, p. 1-10, 1991.

VILHENA, C. S.; DO NASCIMENTO, L. A. S.; DE AGUIAR ANDRADE, E. H.; DA SILVA, J. K. R.; HAMOY, M.; TORRES, M. F.; BARBAS, L. A. Essential oil of *Piper divaricatum* induces a general anaesthesia-like state and loss of skeletal muscle tonus in juvenile tambaqui, *Colossoma macropomum*. **Aquicultura**, v. 510, p. 169-175, 2019.

ZELLNER, B. D.; DUGO, P.; DUGO, G.; MONDELLO, L. J. **Chromatogr. A**, v. 1186, p. 123, 2008.

APÊNDICES

APÊNDICE A

Tabela A1 – Avaliação dos Métodos de Predição para Fator Acêntrico de Álcoois

Métodos	Xrm(%)	S(%)	R(%)
VETERE (1991)	-0,60	3,46	13,10
TU (1994)	0,32	3,97	14,61
NANNOOLAL et al., (2008)	0,03	0,23	1,13

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

Tabela A2 – Avaliação dos Métodos de Predição para Fator Acêntrico de hidrocarbonetos

Métodos	Xrm(%)	S(%)	R(%)
VETERE (1991)	4,0425	2,4650	9,3901
TU (1994)	-8,5727	9,8413	28,4555
NANNOOLAL et al., (2008)	0,9480	2,0961	5,2952

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

APÊNDICE B

Tabela B1 – Avaliação dos Métodos de Predição para a Pressão Crítica (Pc) de Álcoois

Métodos	X_{rm}(%)	S(%)	R(%)
CONSTANTINOUC & GANI (1994)	6,49	3,98	29,40
MARRERO & PARDILLO (1999)	0,89	3,78	25,33
MARRERO & GANI (2001)	2,98	2,81	8,62

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

Tabela B2 – Avaliação dos Métodos de Predição para a Pressão Crítica (Pc) de hidrocarbonetos

Métodos	X_{rm}(%)	S(%)	R(%)
CONSTANTINOUC & GANI (1994)	4,13	8,19	37,05
MARRERO & PARDILLO (1999)	4,25	4,73	28,09
MARRERO & GANI (2001)	1,49	1,95	7,85

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

APÊNDICE C

Tabela C1 – Avaliação dos Métodos de Predição para a Temperatura Crítica (Tc) de Álcoois

Métodos	<i>X_{rm}</i>(%)	<i>S</i>(%)	<i>R</i>(%)
CONSTANTINO & GANI (1994)	1,71	2,46	18,01
MARRERO & PARDILLO (1999)	0,06	1,34	8,80
MARRERO & GANI (2001)	2,05	2,19	15,99

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

Tabela C2 – Avaliação dos Métodos de Predição para a Temperatura Crítica (Tc) de hidrocarbonetos

Métodos	<i>X_{rm}</i>(%)	<i>S</i>(%)	<i>R</i>(%)
CONSTANTINO & GANI (1994)	0,96	3,26	12,50
MARRERO & PARDILLO (1999)	1,75	4,44	22,52
MARRERO & GANI (2001)	0,15	1,65	8,85

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

APÊNDICE D

Tabela D1 – Avaliação dos Métodos de Predição para a Temperatura de Ebulição (T_b) de Álcoois

Métodos	X_{rm}(%)	S(%)	R(%)
CONSTANTINO & GANI (1994)	0,36	3,34	17,79
MARRERO & PARDILLO (1999)	0,80	1,62	7,23
MARRERO & GANI (2001)	3,26	4,46	7,84

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA

Tabela D2 – Avaliação dos Métodos de Predição para a Temperatura de Ebulição (T_b) de hidrocarbonetos

Métodos	X_{rm}(%)	S(%)	R(%)
CONSTANTINO & GANI (1994)	1,93	4,10	27,56
MARRERO & PARDILLO (1999)	1,32	4,61	17,48
MARRERO & GANI (2001)	3,26	5,34	9,48

Fonte: AUTORIA PRÓPRIA