

**INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E  
TECNOLOGIA DO SERTÃO PERNAMBUCANO  
CAMPUS PETROLINA ZONA RURAL**

**CURSO DE BACHARELADO EM AGRONOMIA**

**CARACTERIZAÇÃO QUÍMICA E POTENCIAL ANTIMICROBIANO  
DOS ÓLEOS ESSENCIAS DO BAMBURRAL E MARMELEIRO  
FRENTE A PATÓGENOS DE IMPORTÂNCIA NA MASTITE EM  
PEQUENOS RUMINANTES**

**BRUNA WALLESKA CAMPOS NASCIMENTO**

**PETROLINA, PE  
2022**

**BRUNA WALLESKA CAMPOS NASCIMENTO**

**CARACTERIZAÇÃO QUÍMICA E POTENCIAL ANTIMICROBIANO  
DOS ÓLEOS ESSENCIAS DO BAMBURRAL E MARMELEIRO  
FRENTE A PATÓGENOS DE IMPORTÂNCIA NA MASTITE EM  
PEQUENOS RUMINANTES**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao  
IFSertãoPE *Campus* Petrolina Zona Rural, exigido  
para a obtenção de título de Engenheiro  
Agrônomo, sob orientação do professor Rodolfo  
de Moraes Peixoto.

**PETROLINA, PE  
2022**

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

---

N244 Nascimento, Bruna Walleska Campos.

Caracterização química e potencial antimicrobiano dos óleos essenciais do bamburral e marmeleiro frente a patógenos de importância na mastite em pequenos ruminantes / Bruna Walleska Campos Nascimento. - Petrolina, 2022.  
35 f.: il.

Trabalho de Conclusão de Curso (Agronomia) -Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sertão Pernambucano, Campus Petrolina Zona Rural, 2022.  
Orientação: Prof. Dr. Rodolfo de Moraes Peixoto.

1. Ciências Agrárias. 2. Mastite. 3. Atividade antibacteriana. 4. Composto químico. 5. Docking Molecular. I. Título.

CDD 630

---

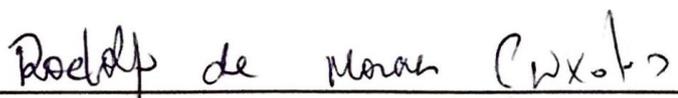
**BRUNA WALLESKA CAMPOS NASCIMENTO**

**CARACTERIZAÇÃO QUÍMICA E POTENCIAL ANTIMICROBIANO  
DOS ÓLEOS ESSENCIAIS DO BAMBURRAL E MARMELEIRO  
FRENTE A PATÓGENOS DE IMPORTÂNCIA NA MASTITE EM  
PEQUENOS RUMINANTES**

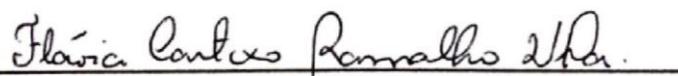
Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao  
IFSertãoPE *Campus* Petrolina Zona Rural, exigido  
para a obtenção de título de Engenheiro  
Agrônomo, sob orientação do professor Rodolfo  
de Moraes Peixoto.

Aprovada em: 15 de junho de 2022.

**Banca Examinadora**



Rodolfo de Moraes Peixoto (IFSertãoPE)



Flávia Cartaxo Ramalho Vilar (IFSertãoPE)



Márcio Rennam Santos Tavares (IFSertãoPE)

## RESUMO

A caprinovinocultura tem grande potencial econômico, social e cultura no semiárido brasileiro. No entanto, os produtores rurais enfrentam sérios entraves de origem sanitário, para o crescimento da atividade na região Nordeste. Destaca-se a mastite, sendo ocasionada principalmente por diversas bactérias do gênero *Staphylococcus* spp. A utilização de antibióticos de forma abusiva causa preocupação para Saúde Pública, devido a seleção de bactérias resistentes aos antibióticos convencionais. Por essas razões, novos estudos na área do desenvolvimento de agentes antimicrobianos são necessários e a pesquisa de atividade biológica em espécies do bioma caatinga podem subsidiar novas alternativas para o tratamento da mastite. Portanto, este trabalho objetivou avaliar *in vitro* o potencial do óleo essencial obtidos a partir das folhas do marmeleiro e bamburral frente aos isolados de relevância aos casos de mastite subclínica. O experimento foi realizado no laboratório de Microbiologia do IFSertãoPE, *campus* Petrolina Zona Rural. O material vegetal foi coletado e identificado, produzindo exsiccatas. Em seguida foi realizado o processamento destas espécies vegetais para a obtenção do óleo essencial, logo após, fez-se a caracterização química por meio da cromatografia gasosa. A pesquisa da atividade biológica utilizou as técnicas da CIM e CBM. Também empregou-se a técnica do Docking Molecular visando identificar o potencial dos óleos. Os óleos essenciais não apresentaram atividade antimicrobiana em nenhuma concentração. Os principais compostos presentes no *Croton blanchetianus* Baill. foram o espatulenol,  $\beta$ -Felandreno, eucaliptol e bisabolol. Em relação a *Mesosphaerum suaveolens* os compostos majoritários foram o eucaliptol e cariofileno. O resultado do Docking Molecular indicou que compostos ligantes possuem energia de ligação próxima aquela observada para gentamicina, sugerindo que estes compostos naturais podem ao longo do tempo promover a redução da produção de biofilme nos isolados testados.

**Palavras-chave:** Mastite, Atividade antibacteriana, Composto químico e Docking Molecular.

## **AGRADECIMENTOS**

A Deus pela saúde, força e coragem para superar os obstáculos e atingir os meus objetivos.

A minha família pela dedicação, apoio, carinho e amor durante toda minha trajetória na faculdade.

Ao CNPq pela concessão da bolsa e ao IFSertãoPE Campus Petrolina Zona Rural.

Ao meu orientador, professor Rodolfo de Moraes Peixoto, por todo ensinamento, paciência e dedicação.

A equipe do Laboratório Química no acompanhamento da extração do óleo essencial das espécies avaliadas. Agradeço em especial a técnica Giovanna Nogueira da Silva Avelino Oliveira Rocha e o professor Márcio Rennan Santos Tavares.

A futura mestrande Maura Marinete de Sousa por toda ajuda, ensinamento e amizade em todas as etapas da pesquisa.

A todos os colaboradores da pesquisa, os alunos Rayhane Ferreira Mulico, Ana Júlia Rodrigues e Gilmar Amaro Pereira no momento da coleta do material botânico.

Ao botânico do NEMA da UNIVASF na realização da identificação e depósito das espécies.

Ao professor da UNIVASF, Mateus Matiuzzi, por disponibilizar os isolados testados.

Ao professor Márcio Rennan Santos Tavares por realizar o Docking Molecular.

A turma Ag 13 por todo acolhimento e carinho em sala de aula, em especial as minhas amigas Danyla Coelho, Emanuela Souza e Jerce Cavalcante por todo companheirismo, carinho e ajuda durante o período da faculdade

## LISTA DE TABELAS

<b>Tabela 1.</b> Identificação dos isolados avaliados.....	28
<b>Tabela 2.</b> Rendimentos dos óleos essenciais do marmeleiro ( <i>Croton blanchetianus</i> Baill) e bamburral ( <i>Mesosphaerum suaveolens</i> (L.) Kuntze) .....	29
<b>Tabela 3.</b> Caracterização química de <i>Croton blanchetianus</i> Baill.....	30
<b>Tabela 4.</b> Caracterização químico do <i>Mesosphaerum suaveolens</i> (L.) Kuntze.....	31
<b>Tabela 5.</b> Principais compostos apresentados nas espécies vegetais analisadas.....	32
<b>Tabela 6.</b> Isolados avaliados nos testes da Concentração Bactericida Mínima (CBM) e da Concentração Inibitória Mínima (CIM).....	33
<b>Tabela 7.</b> Energias de ligação dos PDB's com os compostos químicos e o antimicrobiano Gentamicina.....	34

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 1:</b> Docking Molecular dos compostos químicos e as PDB'S .....	35
--	----

## SÚMARIO

<b>1 INTRODUÇÃO</b> .....	9
<b>2 MATERIAL E MÉTODOS</b> .....	9
<b>2.1 Local de realização do experimento</b> .....	9
<b>2.1.1 Obtenção e identificação do material botânico</b> .....	9
<b>2.1.2 Extração do óleo essencial</b> .....	11
<b>2.1.3 Caracterização Química dos óleos essenciais</b> .....	10
<b>2.2 Atividade antibacteriana</b> .....	12
<b>2.2.1 Isolados avaliados</b> .....	12
<b>2.2.2 Preparo do inóculo</b> .....	11
<b>2.2.3 Preparo da diluição do óleos essencial</b> .....	13
<b>2.2.4 Determinação da Concentração Bactericida Mínima (CBM) e da Concentração Inibitória Mínima (CIM)</b> .....	13
<b>2.3 Docking Molecular</b> .....	14
<b>3 RESULTADOS E DISCUSSÃO</b> .....	13
<b>3.1 Avaliação do rendimento das espécies vegetais</b> .....	13
<b>3.2 Avaliação da caracterização química das espécies vegetais</b> .....	14
<b>3.3 Avaliação da atividade antibacteriana</b> .....	18
<b>3.4 Avaliação do Docking Molecular</b> .....	16
<b>4 CONSIDERAÇÕES FINAIS</b> .....	19
<b>5 REFERÊNCIAS</b> .....	20
<b>ANEXOS</b> .....	27

## 1 INTRODUÇÃO

A mastite é uma enfermidade de grande impacto negativo para os rebanhos de cabras e ovelhas nas pequenas e médias propriedades rurais, sendo caracterizada como uma inflamação da glândula mamária. Tal enfermidade ocasiona alterações físico-químicas e bacteriológicas do leite, além de causar danos no tecido glandular mamário e até a morte do animal (BARROS et al., 2018). Ademais, são vários os aspectos que dificultam o controle da mastite como a resistência antimicrobiana, relação animal, patógeno e ambiente (GELASAKIS et al., 2015).

O principal microrganismo envolvido nessa enfermidade pertence ao gênero *Staphylococcus* (SALABERRY et al., 2016). Frequentemente, o *Staphylococcus aureus* possui ampla resistência aos antibióticos convencionais empregados no controle da mastite (LIMA et al., 2019). Em relação a sintomatologia, tem-se a mastite clínica (sinais visíveis) e subclínica, cujo diagnóstico é realizado por meio de exames físicos e, também testes específicos, como o *California Mastitis Tests* (CMT) e Contagem eletrônica de Células Somáticas (CCS). Desta forma, vale ressaltar que a subclínica implica em grande prejuízo ao produtor de leite, por não apresentar sinais clínicos aparentes, elevar CCS no leite e aumentar os custos de produção (COSTA et al., 2017).

Nos rebanhos leiteiros a mastite reduz a produção e compromete a composição nutricional do leite, o que culmina perdas econômica significativas para os produtores rurais e as indústrias laticínios (ZHAO et al., 2015; VIAN et al., 2019). Para o tratamento dessa enfermidade bacteriana, comumente faz-se a utilização de drogas antimicrobianas, com a aplicação intramamária na glândula mamária do animal (MASSOTE et al., 2019).

Esta utilização contínua de antibióticos e, muitas vezes, sem a devida orientação técnica, tem contribuído para a seleção de bactérias resistentes aos antimicrobianos convencionais. Esta utilização desenfreada também resulta na presença de resíduos antimicrobianos no leite e seus derivados (SANTOS JUNIOR et al., 2019). Tais problemas acarretam riscos de infecções para

os humanos (RAMOS & NASCIMENTO, 2019), por meio do consumo de leite cru e produtos lácteos, além de não garantir o sucesso do tratamento da mastite e causar danos para a saúde do próprio animal (SALABERRY et al., 2016; CUNHA et al., 2016).

Dessa maneira, cada vez mais grupos de pesquisa no Brasil e no mundo buscam novas alternativas, como a utilização de plantas medicinais, por meio da investigação das suas propriedades terapêuticas. Dentre as plantas já estudadas pela literatura, pode-se citar o bamburral (*Mesosphaerum suaveolens* (L.) Kuntze) e marmeleiro (*Croton blanchetianus* Baill.), que apresentam na sua composição químicas várias substâncias benéficas para a medicina, sendo já empregadas de forma popular (CÂMARA et al., 2017; FERNANDES et al., 2021).

O marmeleiro (*Croton blanchetianus* Baill.), pertencente à família Euphorbiaceae, sendo popularmente conhecida como “marmeleiro preto”, uma planta nativa e endêmica do Brasil, com ocorrência, principalmente, no Nordeste. Outra espécie fortemente aromática, e bastante utilizada na medicina tradicional, é o Bamburral (*Mesosphaerum suaveolens* (L.) Kuntze), pertencente à família Lamiaceae. Tal espécie é nativa do Brasil, encontrada em diversos biomas, sendo conhecida como “alfava-brava”, “alfavacão”, “carrapicho” entres outros (CORADIN et al., 2018).

Diante da problemática exposta, objetivou-se avaliar os compostos químicos e a atividade antibacteriana de dois óleos essenciais obtidos de plantas do bioma caatinga frente a patógenos de importância na mastite em pequenos ruminantes.

## 2 MATERIAL E MÉTODOS

### 2.1 Local de realização do experimento

Os experimentos foram conduzidos nos laboratórios do IFSertãoPE Campus Petrolina Zona Rural, destacando-se o laboratório de Química e de Análises Microbiológicas. A composição química dos óleos essenciais foram determinados no Instituto de Química da USP.

#### 2.1.1 Obtenção e identificação do material botânico

As folhas do Marmeleiro (*Croton blanchetianus* Baill) e Bamburral (*Mesosphaerum suaveolens*) foram coletadas no municípios de Petrolina-PE, tendo as seguintes coordenadas: 09°19'27,117" S, 40°33'38,054" W e 09°10'04,2" S, 040°39'04,5", respectivamente. Foram coletadas amostras de cada espécie seguindo as normas usuais empregadas na taxonomia vegetal. As amostras foram depositadas para identificação na coleção botânica do Núcleo de Ecologia e Monitoramento Ambiental (NEMA) da UNIVASF- Centro de ciências agrárias. Os números de registro das espécies marmeleiro e bamburral na coleção botânica do NEMA correspondem a 16037 e 16034, respectivamente.

#### 2.1.2 Extração do óleo essencial

A extração de óleo essencial das folhas frescas do marmeleiro e bamburral foram encaminhadas para o Laboratório de química do IFSertãoPE Campus Petrolina Zona Rural, no período de outubro de 2021 e março de 2022, respectivamente. Em seguida, foi realizado cortes nas folhas frescas em duas partes, e pesado o material vegetal do marmeleiro (904 g) e bamburral (1000 g). O material vegetal das espécies foram introduzidos individualmente em um balão de fundo redondo com capacidade de 6000 mL, sendo adicionado 1/3 de água destilada. O óleo essencial foi extraído pelo método de hidrodestilação à vapor em um aparelho do tipo Clevenger, por 2 horas e 30 minutos, a uma temperatura de 180°C. Posteriormente, o

óleo foi acondicionado em um frasco de vidro e armazenado em geladeira, até a realização das análises. O cálculo do rendimento dos extratos foi realizado através da fórmula: Rendimento (%) = (volume do óleo obtido (mL)/massa do material vegetal fresco (g)) x 100.

### 2.1.3 Caracterização Química dos óleos essenciais

A caracterização dos componentes químicos do óleo essencial de cada espécie foi determinada por meio de uma Cromatografia Gasosa acoplada à Espectrometria de Massas (CG/EM), com o intuito de identificar e quantificar os constituintes químicos majoritários presentes. Esta análise foi realizada no Instituto de Química da USP, tendo em vista a parceria previamente aprovada.

O cromatógrafo utilizado foi da marca Shimadzu, com detector de massa modelo GCMS-QP2020. A coluna foi aquecida a partir da temperatura inicial de 50° C até a temperatura final de 280°C. Os constituintes foram identificados comparando-se os espectros e os fragmentos de massa obtidos na análise cromatográfica com os bancos de dados da bibliotecas espectrais NITI4s.bi, disponível no software do equipamento.

## 2.2 Atividade antibacteriana

### 2.2.1 Isolados avaliados

Foram utilizadas cepas padrão de *Staphylococcus aureus* (ATCC 25923), *Staphylococcus aureus* (ATCC 33591), *Klebsiella pneumoniae* (ATCC 13883), *Escherichia coli* (ATCC 25922) e *Salmonella enterica* subsp. entérica serovar Choleraesuis (ATCC 10708), originárias de culturas do “American Type Culture Collection” (ATCC), obtidas na UNIVASF-Centro de ciências agrárias. E avalia também 3 isolados de *Staphylococcus* spp. de acordo com a presença de biofilme (Fraco, Moderado e Forte), obtidos de casos de mastite subclínica em caprinos pertencentes aos rebanhos leiteiros localizados em municípios dos estados de

Pernambuco e Bahia (**Tabela 1**). Estas cepas já foram identificadas e classificadas no trabalho de SOUSA et al. (2020), sendo armazenadas no Laboratório de Análise Microbiológicas do IFSertãoPE Campus Petrolina Zona Rural.

### **2.2.2 Preparo do inóculo**

Foram cultivados do estoque bacteriano 5  $\mu\text{L}$  em 10 mL de caldo MH a 37° C por 18h. Em seguida, foi medido no espectrofotômetro a D.O. a 600 nm, e logo após ajustou-se, em microtubo, para  $1,5 \times 10^6$  UFC/mL em MH, resultando em um volume final de 1,5 mL.

### **2.2.3 Preparo da diluição do óleos essencial**

Para realizar a diluição dos óleos essenciais, pesou-se 640 mg do óleo e foi diluído em metanol até atingir  $640 \text{mg} \cdot \text{mL}^{-1}$ , sendo representado como solução estoque. Em seguida, realizou-se a diluição 1:100 em caldo MH, obtendo-se a concentração de  $6400 \mu\text{g} \cdot \text{mL}^{-1}$  (Solução II).

### **2.2.4 Determinação da Concentração Bactericida Mínima (CBM) e da Concentração Inibitória Mínima (CIM)**

Foram realizadas as determinações da Concentração Bactericida Mínima (CBM) e da Concentração Inibitória Mínima (CIM), de acordo com o protocolo M7-A9 (CLSI, 2014). Inicialmente foram distribuídos 100  $\mu\text{L}$  de caldo MH em todos os 96 poços das placas de microdiluição. Posteriormente, 100  $\mu\text{L}$  da Solução II, foi distribuída ao primeiro poço, em triplicata. Em seguida, foi realizado uma diluição seriada obtendo as concentrações finais de 3200, 1600, 800, 400, 200, 100, 50 e 25  $\mu\text{L} \cdot \text{mL}^{-1}$ . Para o controle negativo, foi utilizado o caldo MH estéril e como controle positivo para cada isolado, foi utilizado caldo MH juntamente com o inóculo bacteriano testado. Por fim, foi adicionado 10  $\mu\text{L}$  do inóculo na microplaca em todos

os poços referente ao óleo essencial, diluente e controle positivo. As placas de microdiluição foram incubadas a 37 °C por 24 horas. Após esse período, alíquotas de 10 µL, de cada poço das placas de microdiluição, foram inoculadas em placas contendo ágar MH com posterior incubação a 37 °C durante 24 horas. Tal procedimento foi feito com o auxílio de um replicador estéril. A CBM foi determinada a partir da leitura visual, considerando a menor concentração da substância capaz de matar a bactéria. Para o teste de determinação da CIM, foram adicionados 20 µL de Cloreto de 2,3,5-trifeniltetrazólio (CTT), diluído a 1% em cada poço da placa de microdiluição incubada a 37 °C por 1 hora. A mudança de coloração para a tonalidade avermelhada será considerada como indicativo de viabilidade bacteriana. A CIM foi determinada como a menor concentração capaz de inibir o crescimento bacteriano, ou seja, dentre os poços não corados de vermelho, aqueles de menor concentração caracterizam a CIM. Neste teste foram realizados os controles do óleo essencial e do potencial de inibição do Metanol sobre os isolados testados.

### 2.3 Docking Molecular

As moléculas de beta-feladreno, eucaliptol (CID 2758), espatulenol (CID 6432640), bisabolol (CID 10586) e o antimicrobiano convencional gentamicina foram desenhadas através da extensão do MarvinSketch, parte do pacote JChem da ChemAxon (<https://www.chemaxon.com/>). As estruturas das proteínas associadas a produção de biofilmes (*Staphylococcus aureus* Bap-C1: PDB-6M3A; *Staphylococcus aureus* proteína - domínio B: PDB- 7C7R; *Staphylococcus aureus* proteína - domínio BSP: PDB- 7C7U; *Staphylococcus aureus* proteína - região C: PDB-7DM0 e *Escherichia coli*: PDB- 5X5I) foram obtidas no Protein Data Bank (<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>). A energia de ligação entre as moléculas e as proteínas foram calculadas conforme a configuração de padronização.

### 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

#### 3.1 Avaliação do rendimento das espécies vegetais

Os óleos essenciais extraídos das folhas do *Croton blanchetianus* Baill e *Mesosphaerum suaveolens* apresentaram, respectivamente os rendimentos de 0,14% e 0,16% (**Tabela 2**). O trabalho de RIBEIRO et al. (2018) observou a diferença de rendimento na extração de óleo essencial das folhas entre três espécies de *Croton* spp. (*C. blanchetianus*, *C. nepetifolius* e *C. zehntneri*), nas quais o *Croton blanchetianus* apresentou o menor rendimento na interação das espécies e no horário da coleta de 8h, 12h e 20h. No estudo destes autores, não foi observada diferença entre o *C. blanchetianus* e *C. nepetifolius* em períodos chuvosos e secos. Desta forma, apenas a espécie *C. zehntneri* apresentou o maior rendimento no horário da coleta de 12h e época de seca, com 1,7933% e 1,3%, respectivamente.

CAVALCANTE et al. (2022) demonstraram que os rendimentos dos óleos essenciais extraídos das folhas frescas de diversas espécies do gênero *Croton* pode variar entre 0,02% e 0,22%. No mesmo trabalho observou que o maior rendimento foi o *C. blanchetianus*, fornecendo 1.113 mg de óleo, com 0,22%.

LUZ et al. (2020) evidenciaram no seu estudo o rendimento do óleo essencial das partes aéreas de *Mesosphaerum suaveolens* nas diferentes épocas do ano durante a colheita, sendo possível demonstrar que o período mais promissor representa a época seca. De acordo com os autores isso pode estar relacionado com o nível de radiação solar.

Essa diferença de resultados no rendimento das duas espécies avaliadas relacionadas com outras pesquisas pode ser atribuído as variações de temperatura, umidade, pluviosidade e nutrição (ALENCAR, 2021).

### 3.2 Avaliação da caracterização química das espécies vegetais

A análise da caracterização química do óleo essencial das folhas frescas do *Croton blanchetianus* Baill coletadas no mês de outubro de 2021 evidenciou a presença de 25 constituintes (**Tabela 3**), nos quais revelou como compostos majoritários o Epatulenol,  $\beta$ -Felandreno, Eucaliptol e Bisabolol, com 20,41%, 16,74%, 12,19% e 6,41%, respectivamente. É importante salientar que as concentrações dos compostos químicos avaliadas neste estudo foram valores superiores a 5 % (**Tabela 5**).

De acordo com o trabalho de RODRIGUES et al. (2019), dentre os compostos voláteis presentes nas folhas frescas de *C. blanchetianus* por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas, destacam-se o eucaliptol (16,9%),  $\beta$ -cariofileno (15,9%) e germacreno-D (14,5%). Já no estudo de RIBEIRO et al. (2018), foi analisada a composição química dos óleos essenciais das folhas de *C. blanchetianus*, *C. nepetifolius* e *C. zehntneri*, sendo observada influência dos diferentes horários de coleta e estações específicas.

Em relação aos compostos químicos presente na espécie *Mesosphaerum suaveolens*, foi possível observar a presença de 25 constituintes (**Tabela 4**). Na **tabela 5**, destaca-se os compostos voláteis das folhas frescas de maiores concentrações os Eucaliptol (39,81%), Cariofileno (6,62%), 1,1-Dimetil-2-(3-metil-1,3-butadienil) ciclopropano (5,29%) e dodecanoato de isopropilo (5,16%).

No trabalho de LIMA et al. (2022), os constituintes químicos predominantes no óleo essencial de *Mesosphaerum suaveolens* foram o bicilogermacreno (23,5%), 1,8- cineol (23,0%), germacreno D (17,2%) e (E)-cariofileno (10,4%).

Enquanto na pesquisa de BEZERRA et al. (2020), identificaram maior concentração de compostos  $\beta$ -cariofileno, sabineno e espatulenol, através da extração de óleos essenciais das folhas de bamburral. Conforme argumentaram estes autores, tais substâncias apresentaram uma ação antibacteriana contra cepas de *S. aureus* e antioxidante para *Candida tropicalis*.

Na literatura o composto químico eucaliptol, pertencente a classe de terpenos, apresentam atividades biológicas, como ação anti-inflamatória e antioxidante em diversas doenças, incluindo doenças respiratórias, pancreatite, danos no cólon e doenças cardiovasculares e neurodegenerativas (SEOL & KIM, 2016). Na mesma citação, foi evidenciado que o eucaliptol atravessa a barreira hematoencefálica, e assim atua como transportador no fornecimento de drogas ao cérebro.

O Epatulenol é o composto utilizados em diversas áreas, descatando-se alimentos, cosméticos e medicamentos, e tem potencial anticancerígeno (PAKSOY et al., 2016). Além de colaborar para o uso etnofarmacológico, por apresentar atividade anti-inflamatória (NASCIMENTO et al., 2018).

O cariofileno, um sesquiterpeno bicíclico natural, tem o potencial inflamatório nos animais, relacionados as doenças degenerativas, que envolvem o sistema nervoso central como doença de Parkinson, doença de Alzheimer, esclerose múltipla, esclerose lateral amiotrófica. Além de apresentar em estudos pré-clínicos atividades biológicas em infecções por *Streptococcus*, osteoporose, esteato-hepatite e desempenha efeitos anticonvulsivantes, analgésicos, miorrelaxantes, sedativos e antidepressivos (FRANCOMANO et al., 2019).

De acordo com o estudo de EDDIN et al. (2022), o composto químico Bisabolol é um dos importantes sesquiterpenos monocíclicos, que demonstraram propriedades farmacológicas, com atividades terapêuticas e protetoras. Em linhagens celulares ou modelos animais, pode ser um nutracêutico e fitoterápico promissor. Nessa literatura observaram diversas atividades biológicas supostamente propícias para aplicações clínicas, como anticancerígenas, anti-inflamatórias e antimicrobianas.

A concentração e a composição química dos óleos essenciais são influenciadas por fatores relacionados com a parte da planta utilizada, o período de coleta, a região geográfica, o método de extração e análise química do produto (MENDES et al., 2017).

Os óleos essenciais possuem na sua composição mais de 100 compostos distintos, sendo assim, é importante destacar que os componentes majoritários geralmente determinam sua atividade biológica (PORTO et al., 2021). No entanto, alguns autores revelaram a importância das interações entre as composições químicas de baixa concentração, por exemplo a presença de p-cimeno e  $\gamma$ -terpineno aumenta a ação antimicrobiana de compostos majoritários como o eucaliptol (SILVA et al., 2010; CAVALCANTE et al., 2022).

### 3.3 Avaliação da atividade antibacteriana

Os testes de avaliação da atividade antimicrobiana pelo método de Concentração Inibitória Mínima (CIM) e Concentração Bactericida Mínima (CBM), com os óleos essenciais de *Croton blanchetianus* Baill e *Mesosphaerum suaveolens*, nas concentrações de 3200, 1600, 800, 400, 200, 100, 50 e 25  $\mu\text{L}\cdot\text{ml}^{-1}$ , indicaram ausência de atividade antibacteriana contra os isolados testados (**Tabela 6**).

Na literatura foi possível observar que o gênero *Croton* possui diversas espécies com atividade biológica. Na pesquisa de CAVALCANTI et al. (2020), ficou evidenciado que as espécies *Croton heliotropiifolius*, *Croton sonderianus* e *Croton grewioides* possuem ação antiparasitária, especificamente carrapaticida. A ação acaricida também foi observada por (CÂMARA et al., 2017). É importante destacar que essas espécies avaliadas apresentam uma toxicidade de moderada à grave.

VASCONCELOS et al. (2022) observaram atividade antimicrobiana dos compostos voláteis do óleo essencial das folhas secas de *C. blanchetianus* frente as cepas de importância

na deterioração de produtos cárneos (*W. viridescens* ATCC 12706 e *L. mesenteroides* ATCC 8293), por meio do método de Dose Mínima Inibitória (DMI). Isso pode estar relacionado com a concentração dos compostos majoritários e a atuação do eucaliptol (32,94%) e D- $\alpha$ -pineno (29,43%).

O óleo essencial presente no bamburral é considerado bioativo, apresentando múltiplos usos na indústria de produtos sanitários, cosméticos e alimentícios (CORADIN et al., 2018). Um estudo já identificou a presença de atividade antifúngica (gênero *Candida*) além da potencialização do efeito do fluconazol (COSTA et al., 2020).

NASCIMENTO et al. (2007) analisaram vários fatores que influenciam na atividade antimicrobiana nos óleos essenciais, destaca-se a técnica empregada, o meio de cultura utilizado, o uso de controles positivos e negativos, o número da linhagem do isolado testado, o tempo de exposição do microrganismo ao óleo, a composição química do óleo e o emulsificador utilizado.

### 3.4 Avaliação do Docking Molecular

Os resultados apresentados na **Tabela 7** indicam que os compostos espatulenol e bisabolol possuem mais afinidade nas estruturas produtoras de biofilme de cepas *Staphylococcus aureus* e *Escherichia coli*, quando comparado ao ligante  $\beta$ -felandreno e eucaliptol.

Além disso, é importante salientar que por meio do Docking Molecular o antimicrobiano gentamicina avaliado, gasta uma menor energia de ligação, em relação aos outros ligantes, comprovando sua eficiência para o tratamento de mastite (**Tabela 7**).

Na **Figura 1**, tem-se a demonstração da atuação entre os composto químicos e as PDB's, sendo possível identificar a sobreposição dos compostos, e assim uma ação de sinergismo.

#### 4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os compostos químicos majoritários do óleo essencial das folhas frescas da espécie *Croton blanchetianus* Baill e *Mesosphaerum suaveolens* não apresentaram atividade antibacteriana para bactéria da mastite, além de não apresentar rendimento satisfatório. No entanto, seguindo os estudos relacionados a essa caracterização química de forma separada, observou-se sua relevância para outros fins terapêuticos e farmacológicos, tais como atividade anti-inflamatória e antioxidante.

Além disso, o Docking Molecular demonstrou uma ação das moléculas dos compostos químicos sob as proteínas associadas ao biofilme de cepas *Staphylococcus aureus* e *Escherichia coli*. Desta forma, sugere-se a realização de testes futuros com a finalidade de comprovar a inibição de biofilme das bactérias causadoras da mastite.

## 5 REFERÊNCIAS

ALENCAR, R. F. Ação antifúngica in vitro do óleo essencial de Alfazema Brava (*Mesosphaerum suaveolens* (L.) Kuntze) frente a fungos fitopatogênicos. 2021. 61 f. Dissertação (Mestrado Profissional em Sistemas Agroindustriais) - Programa de Pós-Graduação em Sistemas Agroindustriais, Centro de Ciências e Tecnologia Agroalimentar, Universidade Federal de Campina Grande, Pombal, Paraíba, Brasil, 2021.

BARROS, A. F.; ALVES, E. S. do A.; SILVA, J. M. DA; SANTOS, T. M. C. dos. Diagnóstico e etiologia de mastite subclínica em caprinos leiteiros. *Ciência Agrícola*, v. 16, p. 1-3, 2018. Disponível em: <<https://www.seer.ufal.br/index.php/revistacienciaagricola/article/view/6602>>. Acesso em: 01 jun., 2022. DOI: <https://doi.org/10.28998/rca.v16i0.6602>

BEZERRA, J. W. A et al.. *Mesosphaerum suaveolens* (Lamiaceae): Source of antimicrobial and antioxidant compounds. *Research, Society and Development*, v. 9, n. 8, p. 01-23, 2020. Disponível em: <<https://rsdjournal.org/index.php/rsd/article/view/6161>>. Acesso em: 02 jun., 2022. DOI: 10.33448/rsd-v9i8.6161.

COSTA ET AL., 2020. In vitro Antibiotic and Modulatory Activity of *Mesosphaerum suaveolens* (L.) Kuntze against *Candida* strains. *Antibiotics*, v. 9, n. 2, p. 01-13, 2020. Disponível em: < <https://doi.org/10.3390/antibiotics9020046> >. Acesso em: 05 jun., 2022. DOI: 10.3390/antibiotics9020046

CÂMARA, C. A. G., MORAES, M. M., MELO, J. P. R. Chemical Composition and Acaricidal Activity of Essential Oils from *Croton rhamnifolioides* Pax and Hoffm. in Different Regions of a Caatinga Biome in Northeastern Brazil. *Journal of Essential Oil-Bearing Plants*, v. 6, n. 20, p. 1434-1449. 2017. Disponível em: < <https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/0972060X.2017.1416677> > Acesso em: 01 jun., 2022. DOI: <https://doi.org/10.1080/0972060X.2017.1416677>.

CAVALCANTI, D.F.G.; SILVEIRA, D.M da & SILVA, G.C. da. Biological aspects and potentialities of the genus *Croton* (Euphorbiaceae). *Brazilian Journal of Development Braz. J. of Develop*, 6: p.45931-45946, 2020. DOI: 10.34117/bjdv6n7-280. Disponível em: <<https://www.brazilianjournals.com/index.php/BRJD/article/view/13079>>. Acesso em: 01 jun., 2022. DOI:10.34117/bjdv6n7-280

CAVALCANTE, Y. P.; AMARO, B. O.; SILVA FILHO, F. A. e. Bioprospection of volatile constituents of species of the genus *Croton* l. from the Delta do Parnaíba. *Research, Society and Development*, v. 11, n. 7, p. e3011729639, 2022. Disponível em: <<https://rsdjournal.org/index.php/rsd/article/view/29639>>. Acesso em: 6 jun. 2022. DOI: 10.33448/rsd-v11i7.29639.

CORADIN, L.; CAMILLO, J.; PAREYN, F. G. C. Espécies nativas da flora brasileira de valor econômico atual ou potencial: plantas para o futuro: região Nordeste. Brasília, DF: MMA, 2018.

COSTA, F.G.; DIAS, L. P. C.; MARIGO, L. V.; SILVA, T. C.; FERNANDES, F. M. Incidência de *Staphylococcus aureus* em tetos de vacas leiteiras Girolandas. *Revista Científica da Faminas (RCFaminas)*, v. 13, n. 1, p. 12-16, 2017. Disponível em: <<https://docplayer.com.br/137390315-Incidencia-de-staphylococcus-aureus-em-tetos-de-vacas-leiteiras-girolandas.html>>. Acesso em: 26 de maio, 2021.

Clinical and Laboratory Standard Institute. CLSI (2014). *Methods for dilution antimicrobial susceptibility tests for bacteria that grow aerobically: Approved standards. Document CLSI M7-A7*, CLSI, Wayne, Pennsylvania.

CUNHA, A. F. et al. Prevalência, etiologia e fatores de risco de mastite clínica em rebanhos leiteiros de VIÇOSA-MG. *Acta Veterinaria Brasilica*, v.10, n.1, p.48-54, 2016. Disponível em: <<https://periodicos.ufersa.edu.br/acta/article/view/5476>>. Acesso em: 26 de maio, 2021. DOI: <https://doi.org/10.21708/avb.2016.10.1.5476>.

EDDIN, L.B.; JHA, N.K.; GOYAL, S.N.; AGRAWAL, Y.O.; SUBRAMANYA, S.B.; BASTAKI, S.M.A.; OJHA, S. Health Benefits, Pharmacological Effects, Molecular Mechanisms, and Therapeutic Potential of  $\alpha$ -Bisabolol. *Nutrients* 2022, v. 14, n.7, p.1370. Disponível em: < <https://doi.org/10.3390/nu14071370> >. Acessado em: 07 jun., 2022. DOI: 10.3390/nu14071370.

FERNANDES, L. C. B. et al. Sciatic nerve-conditioned medium with the addition of *Croton blanchetianus* Baill essential oil promotes morphological plasticity in spinal cord cultured cells. *Research, Society and Development*, v. 10, n. 5, p. 01-12, 2021. DOI: 10.33448/rsd-v10i5.14591. Disponível a partir: < <https://rsdjournal.org/index.php/rsd/article/view/14591> >. Acesso em: 26 de maio. DOI: 10.33448/rsd-v10i5.14591.

GELASAKIS, A. L. et al. Mastitis in sheep-The last 10 years and the future of research. *Veterinary Microbiology*, v. 181, n.1, p. 136-146, 2015. Disponível a partir: < <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/26216457/>>. Acesso em: 26 de maio. DOI: 10.1016/j.vetmic.2015.07.009.

LIMA, M.C.; LAGO, E.P. do; NETO, G.B. de M.; MOREIRA, M.A.S. Principais doenças de ovinos e caprinos. *Boletim de Extensão nº 72: Minas Gerais, Viçosa, 2019, 54p.*

LIMA, A. S. et al. Anthelmintic evaluation and essential oils composition of *Hyptis dilatata* Benth. and *Mesosphaerum suaveolens* Kuntze from the Brazilian Amazon. *Acta Tropica*. v. 228, n. ,2022. Disponível em: < <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/35063413/> >. Acesso em: 02 de jun., 2022. DOI: 10.1016/j.actatropica.2022.106321.

LUZ, T. R. S.A. et al. Seasonal variation in the chemical composition and biological activity of the essential oil of *Mesosphaerum suaveolens* (L.) Kuntz. *Industrial Crops & Products*, v. 153, n.5, 2020. Disponível em: < <https://agris.fao.org/agris-search/search.do?recordID=US202000237992> >. Acesso em: 01 jun.,2021.

MASSOTE, V.P.; ZANATELI, B. M; ALVES, G. V.; GONÇALVES, E. S.; GUEDES, E. DIAGNÓSTICO E CONTROLE DE MASTITE BOVINA: uma revisão de literature. Revista Agroveterinária do Sul de Minas, v. 1, n. 1, p. 41 - 54, 2019. Disponível em: < <https://periodicos.unis.edu.br/index.php/agrovetsulminas/article/view/265> >. Acesso em: 01 jun., 2021.

MENDES, K. R. et al. *Croton blanchetianus* modulates its morphophysiological responses to tolerate drought in a tropical dry forest. **Functional Plant Biology**, Austrália, v. 44, n. 10, p. 1039-1051, 2017. Disponível em: < <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/32480631/> >. Acessado em: 08 jun., 2022. DOI: 10.1071/FP17098.

NASCIMENTO, P. F. C.; NASCIMENTO, A. L. C.; RODRIGUES, C. S.; ANTONIOLLI, Â. R.; SANTOS, P. O.; JÚNIOR, A. M. B.; TRINDADE, R. C. Atividade antimicrobiana dos óleos essenciais: uma abordagem multifatorial dos métodos. Rev. bras. Farmacogn, v. 17, n. 1, p. 108-113, 2007. Disponível em: < <https://www.scielo.br/j/rbfar/a/pjSFydVRNTHtVw48qPPmZQN/abstract/?lang=pt> >. Acesso em: 01 jun., 2022. DOI: <https://doi.org/10.1590/S0102-695X2007000100020>.

NASCIMENTO et al. Antioxidant, anti-inflammatory, antiproliferative and antimycobacterial activities of the essential oil of *Psidium guineense* Sw. and spathulenol. Journal of Ethnopharmacology. v. 210, n. 10, p. 351-358, 2018. Disponível em: <<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/28844678/>>. Acesso em: 07 jun., 2022. DOI: 10.1016/j.jep.2017.08.030.

FRANCOMANO, F. et al.  $\beta$ -Caryophyllene: A Sesquiterpene with Countless Biological Properties. *Appl. Sci.* V. 9, n. 24, p.5420, 2019. Disponível em: < <https://doi.org/10.3390/app9245420> >. Acesso em: 07 jun., 2022. DOI:10.3390/app9245420.

PAKSOY, M. Y.; DIRAZ, E.; DIĞRAK, M.; TUTAR, E.; KARAMAN, Ş. Essential oil composition and antimicrobial activity of two endemic *Kundmannia* SCOP. species from Turkey. *Industrial Crops and Products*. v. 79, p. 39-46, 2016. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S092666901530474X>>. Acesso em: 07 jun., 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2015.10.027>.

PORTO, J. C. S.; COELHO, F. A.; OLIVEIRA, F. V. B.; LIMA, S. G.; MOBIN, M. Composição química e atividade antifúngica de plantas típicas da região nordeste do Brasil. *Rev Interd.*, v. 14, n. 1, p. 01-11, 2021. Disponível em: <<https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=7973380>>. Acessado em: 07 jun., 2022.

RAMOS, J. dos S.; NASCIMENTO, G.L.P.A. Quais os possíveis riscos no consumo de leite de cabra cru?. *Food Safety Brazil* (2019). Disponível: <<https://foodsafetybrazil.org/quais-os-possiveis-riscos-no-consumo-de-leite-de-cabra-cru/>>. Acesso em: 24 de jun. de 2021.

RIBEIRO, S. M.; BONILLA, O. H.; LUCENA, E. M. P. Influência da sazonalidade e do ciclo circadiano no rendimento e composição química dos óleos essenciais de *Croton* spp. da Caatinga. *Iheringia, Série Botânica*, v. 73, n. 1, p. 31–38, 2018. Disponível em: <<https://isb.emnuvens.com.br/iheringia/article/view/371>>. Acesso em: 24 jun., 2021.

RODRIGUES, O. G.; FALCÃO, B. R. M.; BARBOSA, B. C. ; PEREIRA, A. V.; AQUINO, V. V. F. In vitro biological activity of the *Croton blanchetianus* (Baill) essential oil against *Rhipicephalus (Boophilus) microplus* (Acari: Ixodidae). *Journal of Applied Biology & Biotechnology* Vol. 7(02), pp. 55-58, March-April, 2019. Disponível em: <<https://www.bibliomed.org/?mno=250800>>. Acesso em: 07 jun., 2022. DOI: 10.7324/JABB.2019.70210.

SALABERRY, S.R.S.; SAIDENBERG, A.B.S.; ZUNIGA, E.; GONSALES, F.F.; MELVILLE, P.A.; BENITES, N.R. Microbiological analysis and sensitivity profile of *Staphylococcus* spp. in subclinical mastitis of dairy goats. *Arq. Bras. Med. Vet. Zootec.*, v.68,

n.2, p.336-344, 2016. Disponível em: < <https://www.scielo.br/j/abmvz/a/ntHXqG8N9sFWKSCPZZzhkcf/?lang=en> >. Acesso em: 24 jun., 2021. DOI: <https://doi.org/10.1590/1678-4162-8205>.

SANTOS JÚNIOR, D. A., MATOS, R. A. T., MELO, D. B., JÚNIOR GARINO, F., SIMÕES, S. V. D., & MIRANDA, E. G. Etiologia e sensibilidade antimicrobiana in vitro de bactérias isoladas de cabras com mastite no Sertão e Cariri paraibano. *Ciência Animal Brasileira*, v. 20, p. 1-11, 2019. Disponível em:< <https://www.revistas.ufg.br/vet/article/view/44848> >. Acesso em: 24 jun., 2021. DOI: 10.1590/1089-6891v20e-44848.

SILVA, A. B.; OLIVEIRA, C. R. F. de; MATOS, C. H. C.; SANTOS, P. Érmerson M. dos; LIRA, C. R. I. de M. BIOATIVIDADE DO ÓLEO ESSENCIAL DE *Croton blanchetianus* Baill (Euphorbiaceae) SOBRE *Callosobruchus maculatus* Fabricius, 1775 (Coleoptera: Chrysomelidae). *Nativa*, v. 8, n. 4, p. 450-455, 2020. Disponível em: <https://periodicoscientificos.ufmt.br/ojs/index.php/nativa/article/view/8456>. Acesso em: 6 jun. 2022. DOI: 10.31413/nativa.v8i4.8456

SILVA, J. P. L., et al. (2010). Óleo essencial de orégano: interferência da composição química na atividade frente a *Salmonella enteritidis*. *Ciência e Tecnologia de Alimentos*, v. 30, p. 136-141. Disponível em: < <https://www.scielo.br/j/cta/a/f4rjWjZ4QtY6xmNQ6p7SLQC/?format=pdf&lang=pt> >. Acesso em: 06 jun., 2022. DOI: <https://doi.org/10.1590/S0101-20612010000500021>.

SEOL, G. H; KIM, K. Y. Eucalyptol and Its Role in Chronic Diseases. *Drug Discovery from Mother Nature*. v. 929, p. 389–398, 2016. Disponível em: < [https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-41342-6\\_18](https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-41342-6_18) >. Acesso em: 06 jun., 2022.

VASCONCELOS, E. C.; PAGANINI, C. C.; FIGUEIREDO, E. A. T. de; ARAGÃO, G. M. F. Antimicrobial action of volatile compounds in essential oil from dry leaves of *Croton blanchetianus* Baill. *Research, Society and Development*, v. 11, n. 1, p. 01-10, 2022. Disponível

em: <<https://rsdjournal.org/index.php/rsd/article/view/24785>>. Acesso em: 4 jun., 2022. DOI: 10.33448/rsd-v11i1.24785.

SOUSA, M. M. et al. Antimicrobial potential of Jurema preta and umburana, native species of the Caatinga biome, on *Staphylococcus* isolated from small ruminants with mastitis. *Semina: Ciências Agrárias*, v. 41, n. 5, p. 2231-2244, 2020. Disponível em: <<https://www.uel.br/revistas/uel/index.php/semagrarias/article/view/38628/27829>>. Acesso em: 6 maio, 2022. DOI: 10.5433/1679-0359.2020v41n5Supl1p2231.

VIAN, A.; GUERIOS, E. M. A.; BARATELA-SIMM, K. C. Avaliação de plantas com potencial inibitorio em bacterias causadoras da mastite bovina. *Arquivos Brasileiros de Medicina Veterinária FAG*, v. 2, n. 2, p. 186-191, 2019. Disponível em: <<http://www.themaetscientia.fag.edu.br/index.php/ABMVFAG/article/view/1125>>. Acesso em: 4 maio, 2022.

ZHAO, Y. et al. Shifted T Helper Cell Polarization in a Murine *Staphylococcus aureus* Mastitis Model. *PloS One*, v. 10, n. 7, 2015. Disponível: <<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/26230498/>>. Acesso em: 4 jun., 2022. DOI: 10.1371/journal.pone.0134797.

## ANEXOS

**Tabela 1.** Identificação dos isolados avaliados.

<b>Microrganismos</b>	<b>Isolados Avaliados</b>		<b>Biofilme</b>
<b>Gram positivo</b>	<b>Cepa Padrão</b>	<i>Staphylococcus aureus</i> (ATCC 25923)	*
		<i>Staphylococcus aureus</i> (ATCC 33591)	*
	<b>Cepa de Campo</b>	<i>Staphylococcus aureus</i> (n. 34)	Fraca
		<i>Staphylococcus aureus</i> (n. 06)	Moderada
		<i>Staphylococcus aureus</i> (n. 10)	Forte
<b>Gram negativo</b>	<b>Cepa Padrão</b>	<i>Klebsiella pneumoniae</i> (ATCC 13883)	*
		<i>Escherichia coli</i> (ATCC 25922)	*
		<i>Salmonella enterica</i> (ATCC 10708)	*

(\*): Não foi considerado na pesquisa. Fonte: Autoria própria.

**Tabela 2.** Rendimentos dos óleos essenciais do marmeleiro (*Croton blanchetianus* Baill) e bamburral (*Mesosphaerum suaveolens* (L.) Kuntze).

<b>Espécies vegetais</b>	<b>Parte utilizada da planta</b>	<b>Massa do material vegetal (g)</b>	<b>Volume do óleo (mL)</b>	<b>Rendimento (%)</b>
<i>Croton blanchetianus</i> Baill	Folhas	904	1,3	0,14
<i>Mesosphaerum suaveolens</i> (L.) Kuntze	Folhas	1000	1,6	0,16

Fonte: Autoria própria.

**Tabela 3.** Caracterização química de *Croton blanchetianus* Baill.

N	Compostos químicos	Área (%)
1	$\alpha$ -Pinoeno	3,15
2	Sabinene	1,35
3	$\beta$ -Mirceno	1,15
4	$\alpha$ -Felandreno	1,07
5	o-Cymene	1,56
6	$\beta$ -Felandreno	16,74
7	Eucaliptol	12,19
8	4-acetil-1-metilciclohexeno	2,17
9	Criptone	1,95
10	$\alpha$ -Terpineol	1,67
11	Canfenona, 6-	0,98
12	ciclohexano	2,24
13	Cariofileno	4,76
14	$\beta$ -Copaeno	2,24
15	Germacreno B	4,91
16	Espatuleno	20,41
17	Óxido de cariofileno	3,72
18	1,1,4,7-Tetrametildecahidro-1H-ciclopropa(e)azuleno-4,7-diol *	2,43
19	1,5,5-Trimetil-6-(3-metil-buta-1,3-dienil)-ciclohexeno	2,70
20	Tau -Cadinol	0,98
21	Bisabolol	6,41
22	1S,2R,5R)-2-Methyl-5-((R)-6-methylhept-5-en-2-yl)bicyclo[3.1.0] **	1,56
23	$\alpha$ -metilglucofuranosídeo	0,99
24	1,1,4,7-Tetrametildecahidro-1H-ciclopropa[e]azuleno-4,7-diol *	1,47
25	Globulol	1,00
<b>Total</b>	-	<b>100</b>

(\*): Repetição de composto; (\*\*): Composto não encontrado no Pubchem. Fonte: Autoria própria.

**Tabela 4.** Caracterização química do *Mesosphaerum suaveolens* (L.) Kuntze.

Número	Compostos químicos	Área (%)
1	2,4-Dimetil-1-hepteno	2,69
2	3-Etil-4-metilpentan-1-ol	3,53
3	Ciclohexano, etilmetil	1,24
4	Sabinene	2,03
5	$\beta$ -Pineno	2,46
6	1,1-Dimetil-2-(3-metil-1,3-butadienil)ciclopropano	5,29
7	Eucaliptol	39,81
8	2,4-Dimetil-1-deceno	1,50
9	Trifluoroacetil-3,7-dimetiloctanol	1,56
10	Ácido oxálico, éster 6-etil-3-il isohexílico	2,69
11	1-Undeceno, 7-metil-	3,57
12	Ácido oxálico, éster etílico de 6-etil-3-il	2,62
13	Cariofileno	6,62
14	1-etenil-1-metil-2-(1-metiletenil)-4-(1-metiletilideno)-ciclohexano	2,14
15	3,5-diterc-butilfenol	2,97
16	2-isopropil-5-metil-1-heptanol	1,14
17	1-hexeno, 3,5,5-trimetil-	1,33
18	Ácido oxálico, éster etílico de 6-etil-3-il	2,14
19	dodecanoato de isopropilo	5,16
20	Ácido sulfuroso, éster hexil octil	1,63
21	Ácido oxálico, éster etílico de 6-etil-3-il	1,45
22	Ácido dicloroacético, éster 6-etil-3-octil	2,37
23	2-isopropil-5-metil-1-heptanol	1,30
24	Bis(2-etilhexil)ftalato	1,43
25	Ácido ciclopropanocarboxílico, éster 3-metilbut-2-enílico	1,33
<b>Total</b>	-	<b>100</b>

Fonte: Autoria própria.

**Tabela 5.** Principais compostos apresentados nas espécies vegetais analisadas.

<b>Espécies</b>	<b>Compostos principais (%)</b>
<i>Croton blanchetianus</i> Baill	Espatuleno (20,41%), $\beta$ -Felandreno (16,74 %), Eucaliptol (12,19%) e Bisabolol (6,41%)
<i>Mesosphaerum suaveolens</i> (L.) Kuntze	Eucaliptol (39,81%), Cariofileno (6,62%), 1,1-Dimetil-2-(3-metil-1,3-butadienil) ciclopropano (5,29%) e dodecanoato de isopropilo (5,16%)

Fonte: Autoria própria.

**Tabela 6.** Isolados avaliados nos testes da Concentração Bactericida Mínima (CBM) e da Concentração Inibitória Mínima (CIM).

<b>Isolados Bacterianos</b>	<b>Concentração (<math>\mu\text{L}.\text{ml}^{-1}</math>)</b>	<b>CBM/CIM (<math>\mu\text{L}.\text{ml}^{-1}</math>)</b>
<i>Staphylococcus aureus</i> (ATCC 25923)	3200, 1600, 800, 400, 200, 100, 50 e 25	-
<i>Staphylococcus aureus</i> (ATCC 33591)	3200, 1600, 800, 400, 200, 100, 50 e 25	-
<i>Staphylococcus aureus</i> (n. 34)	3200, 1600, 800, 400, 200, 100, 50 e 25	-
<i>Staphylococcus aureus</i> (n. 06)	3200, 1600, 800, 400, 200, 100, 50 e 25	-
<i>Staphylococcus aureus</i> (n. 10)	3200, 1600, 800, 400, 200, 100, 50 e 25	-
<i>Klebsiella pneumoniae</i> (ATCC 13883)	3200, 1600, 800, 400, 200, 100, 50 e 25	-
<i>Escherichia coli</i> (ATCC 25922)	3200, 1600, 800, 400, 200, 100, 50 e 25	-
<i>Salmonella enterica</i> (ATCC 1070)	3200, 1600, 800, 400, 200, 100, 50 e 25	-

(-): Sem atividade. Fonte: Autoria própria.

**Tabela 7.** Energias de ligação dos PDB's com os compostos químicos e o antimicrobiano Gentamicina.

<b>Ligantes</b>	<b>Energia de ligação- PDB 6m3a</b>
Bisabolol	-153.954
Espatulenol	-142.546
Eucapiltol	-92.3716
Beta- Felandreno	-115.817
Gentamicina	-236.228

<b>Ligantes</b>	<b>Energia de ligação PDB 7md0</b>
Eucapiltol	-38.3264
Beta- Felandreno	-61.1093
Gentamicina	-154.89
Espatulenol	-84.0328
Bisabolol	-98.4231

<b>Ligantes</b>	<b>Energia de ligação PDB 7c7u</b>
Eucapiltol	-49.312
Beta- Felandreno	-62.3122
Gentamicina	-148.895
Espatulenol	-84.7121
Bisabolol	-84.4949

<b>Ligantes</b>	<b>Energia de ligação PDB 7r7c</b>
Eucapiltol	-47.4231
Beta- Felandreno	-61.8756
Gentamicina	-150.096
Espatulenol	-91.8055
Bisabolol	-81.7815

<b>Ligantes</b>	<b>Energia de ligação PDB 5x5i</b>
Eucapiltol	-50.1902
Beta- Felandreno	-56.3534
Gentamicina	-137.628
Espatulenol	-94.5784
Espatulenol	-78.2456
Bisabolol	-91.2307

**Figura 1.** Docking Molecular. Representação das ligações entre as estruturas de PDB's 3M6A (A), 7C7U (B), 7MD0 (C), 7C7R (D) e 5X5I (E) com os ligantes Beta- Felandreno (Verde), Bisabolol (Amarelo), Espatulenol (Azul claro), Eucaliptol (Roxo) e Gentamicina (Branco).

