

Óleos Essenciais – Abordagem Química, Biossíntese e Importância Ecológica

José Galberto Martins da Costa.

Abordagem Química

Os óleos essenciais são misturas de compostos orgânicos voláteis e lipofílicos, produzidos por plantas como parte de seus metabólitos secundários. Esses compostos são responsáveis por aromas característicos e volatilidade, sendo comumente obtidos por técnicas que separam as frações voláteis da matéria vegetal (KHAN *et al.*, 2023).

Os compostos voláteis das plantas podem ser encontrados em diversas de suas partes, incluindo folhas, caules, flores, raízes e sementes, especialmente em estruturas especializadas, tais como tricomas glandulares, glândulas de óleo, ductos resinosos, bolsões oleosos ou cavidades secretoras. Estudos anatômicos recentes (OCTAVIA *et al.*, 2023) detalham as características morfológicas dessas glândulas em *Mentha piperita* e *Mentha spicata*, sua localização, tamanho e densidade, que influenciam no rendimento e composição química (OCTAVIA *et al.*, 2023).

Na expressiva maioria, a composição química dos óleos essenciais é baseada em isoprenóides, que compõem sistema complexo devido à presença de substâncias altamente funcionalizadas pertencentes a diferentes classes químicas, como fenóis, aldeídos, cetonas, ésteres, éteres, entre outras. Dentre os principais grupos presentes, destacam-se os monoterpenóides, sesquiterpenóides e fenilpropanóides. Não obstante, raríssimos óleos essenciais apresentam isotiocianatos, que tem por característica estrutural a presença de enxofre na sua composição química. De modo geral, a síntese e a quantidade dos compostos presentes nos óleos essenciais são influenciadas por fatores genéticos, ambientais e fisiológicos, como; luz, água, estresse, fenologia (TSITLAKIDOU *et al.*, 2023).

De forma ampla, a classificação dos terpenóides é feita com base nas cadeias homólogas de unidades isoprenóides presentes em sua estrutura, sendo classificados em monoterpenóides, sesquiterpenóides, diterpenóides, sesterpenóides, triterpenóides e tetraterpenóides (Tabela 1). Os óleos essenciais e os oleorresinas contêm, como constituintes básicos da composição química, monoterpenóides (C10, correspondentes a duas unidades isoprenóides) e/ou sesquiterpenóides (C15, correspondentes a três unidades isoprenóides), nos quais os blocos isoprenóides estão condensados na forma “cabeça-cauda” (regra do isopreno), formando grande grupo de produtos naturais (DUBEY *et al.*, 2003; PAGE *et al.*, 2004).

Na Figura 1 está ilustrada a estrutura do 2-metilbutano, que determina o esqueleto base para a “regra do isopreno” (com a conveniência ou não das ligações duplas). Em destaque verde (carbonos 1, 2 e 5) está representada a “Cabeça”, e em destaque vermelho (carbonos 3 e 4) a representação da “Cauda”. Também, abaixo, nas estruturas do mirceno e limoneno, observa-se ligações tracejadas, representando as condensações “Cabeça-Cauda”, entre as unidades de isopreno.

Figura 1. Representação estrutural da unidade isoprenóide segundo a orientação “cabeça-cauda” no esqueleto do 2-metilbutano, com exemplos aplicados ao isopreno, mirceno e limoneno.

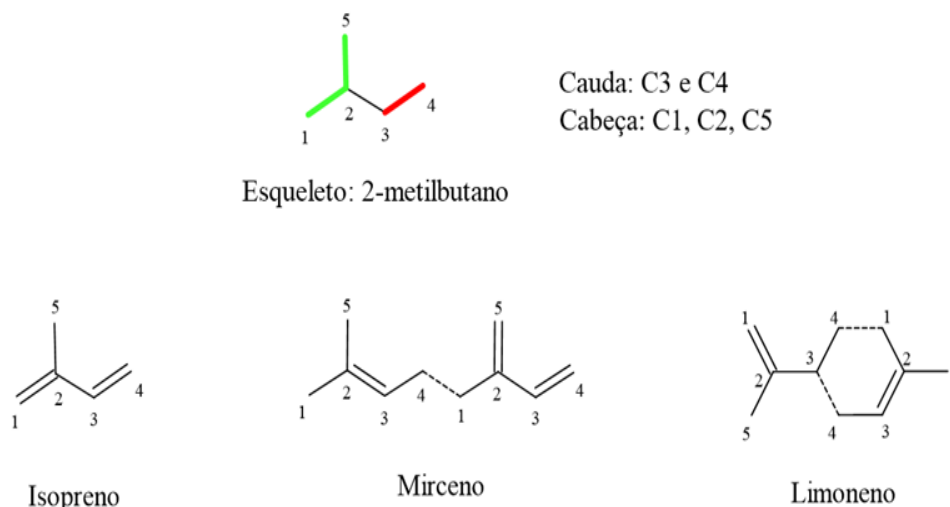


Tabela 1: Principais classes de terpenóides conforme a quantidade de unidades isoprenóides, condensadas de acordo com a regra do isopreno.

Classes de terpenoides	Unidades de isopreno	Quantidade de carbonos
Monoterpenóide	2	10
Sesquiterpenóide	3	15
Diterpenóide	4	20
Sesteterpenóide	5	25
Triterpenóide	6	30
Tetraterpenóide	8	40

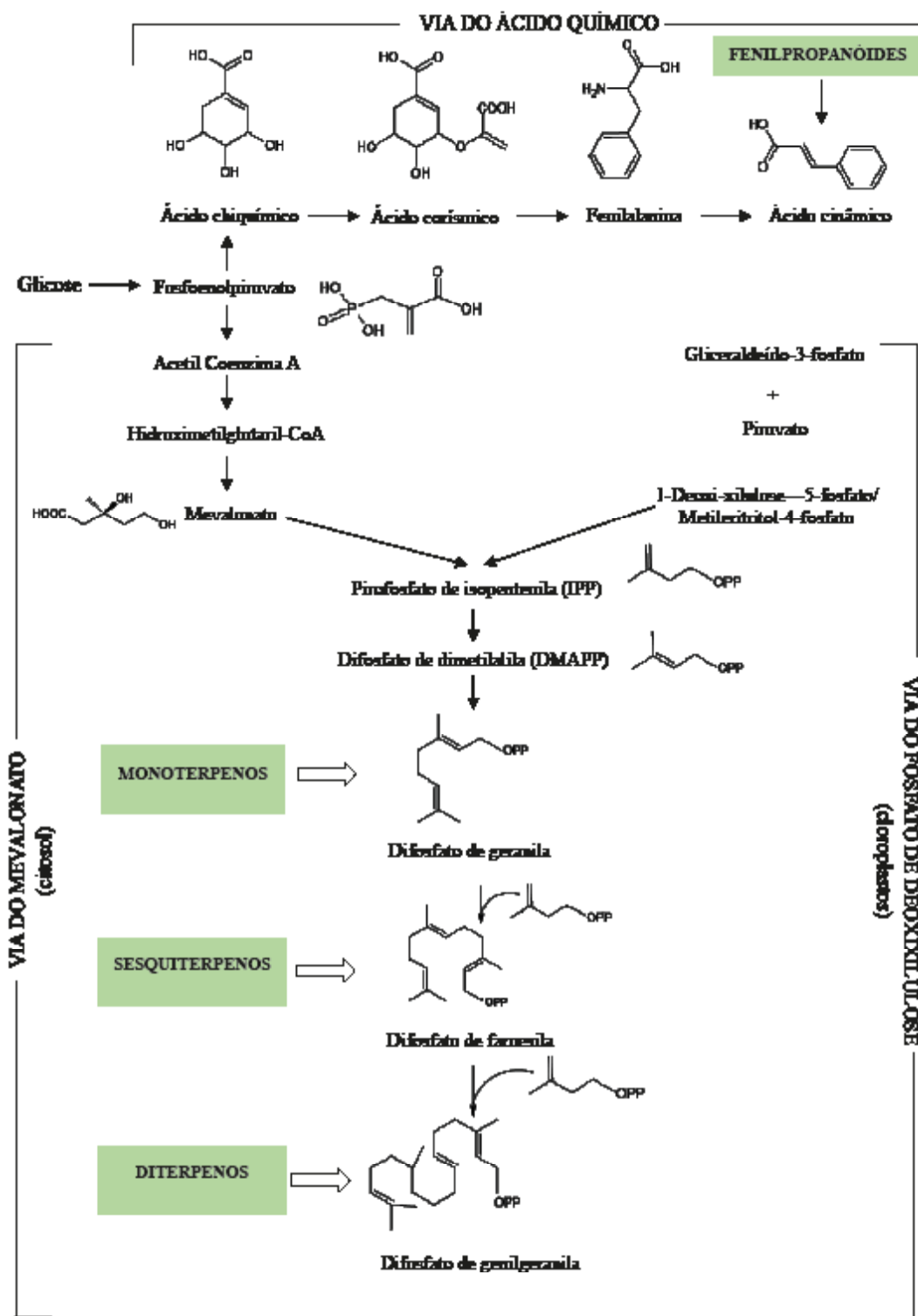
Biossíntese

A biossíntese de terpenóides envolve dois precursores isoméricos: isopentenil pirofosfato (IPP) e dimetilalil difosfato (DMAPP), ambos estruturados pela unidade de isopreno C5 ativo. As unidades de IPP e DMAPP são biossintetizadas por duas vias diferentes. A via clássica do mevalonato (MVA), operada no citosol, biossintetiza IPP a partir de acetil-CoA e a via plastidial 2-C-metileritritol 4-fosfato (MEP) leva à formação de IPP e DMAPP a partir de gliceraldeído-3-fosfato e piruvato (Figura 2).

Os fenilpropanóides, outra classe importante em óleos essenciais, são sintetizados pela via do ácido chiquímico (Figura 2), tendo como principais precursores o ácido cinâmico e o ácido *p*-hidroxicinâmico, originados dos aminoácidos aromáticos fenilalanina e tirosina, respectivamente (DEWICK *et al.*, 2002; SANGWAN *et al.*, 2001). O ácido chiquímico é sintetizado a partir de eritrose 4-fosfato e fosfoenolpiruvato. A eliminação de um dos álcoois do anel do ácido chiquímico e a reação com fosfoenolpiruvato produzem ácido corísmico. Este composto forma o esqueleto do

ácido fenilpropionico. A aminação e a redução da função cetona produzem o aminoácido fenilalanina, enquanto a redução e a eliminação levam ao ácido cinâmico, que produz o ácido cítrico e o ácido malônico. Os compostos fenilpropanóides contêm um ou mais fragmentos C6-C3, sendo a unidade C6 um anel benzênico. De forma que, por exemplo, a aromatização do ácido chiquímico produz derivados do ácido benzoico, presentes em diversos óleos essenciais (BASER; BUCHBAUER, 2015).

Figura 2: Biossíntese de terpenóides e fenilpropanóides em plantas.

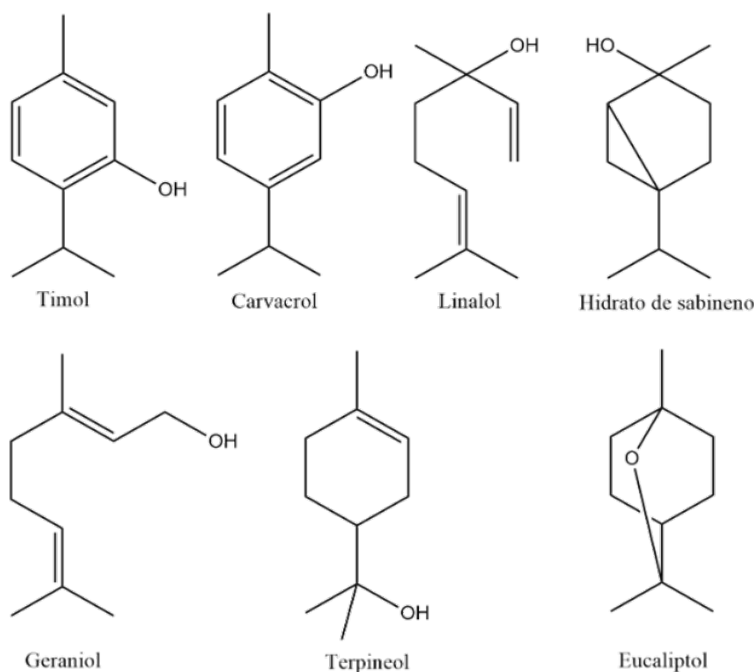


Quimiotipos

Quimiotipos referem-se a subespécies de uma planta que possuem as mesmas características morfológicas (relacionadas à forma e estrutura), mas produzem diferentes quantidades de componentes químicos em seus óleos essenciais. Quando os óleos essenciais são descritos apenas por seus nomes comuns, eles não apenas excluem a importância da espécie como também não levam em conta o quimiotipo (HOSSEIN *et al.*, 2015).

De modo geral, os quimiotipos são frequentemente definidos pela substância química mais abundante produzida por aquele indivíduo, e esse conceito tem sido útil em trabalhos realizados por ecologistas químicos e químicos de produtos naturais. *Thymus vulgaris* (tomilho) é um exemplo de planta com muitos quimiotipos polimórficos. Embora em grande parte indistinguíveis na aparência, espécimes de *T. vulgaris* podem ser atribuídos a um dos sete quimiotipos diferentes, dependendo se o componente dominante do óleo essencial seja timol, carvacrol, linalol, geraniol, hidrato de sabineno (tuianol), α -terpineol ou eucaliptol. Tais quimiotipos (Figura 3) podem ser indicados como *T. vulgaris* qt. timol (tomilho vermelho), *T. vulgaris* qt. geraniol (tomilho doce) e assim por diante (KEEFOVER-RING, 2022).

Figura 3. Estruturas químicas de quimiotipos de *Thymus vulgaris* (tomilho).



Como os quimiotipos são definidos apenas pelo metabólito secundário mais abundante, eles podem ter pouco significado prático em grupo de organismos que compartilham a mesma característica. Indivíduos de um quimiotipo podem ter características muito diferentes. Isso significa que dois indivíduos do mesmo quimiotipo podem ter impactos diferentes sobre herbívoros, polinizadores e resistência a pragas, por exemplo (PATEL, 2016).

Importância Ecológica

Inquestionavelmente, os óleos essenciais cumprem papéis fundamentais nos ecossistemas. Além de conferirem aroma e sabor, esses produtos naturais exercem várias funções ecológicas críticas, por exemplo, atuam como defesas químicas contra herbívoros e agentes patogênicos, regulam interações planta-planta e planta-microrganismo, e servem de sinalização para polinizadores ou para indicar estresse ambiental (BOACHON *et al.*, 2024).

Estudos com óleos essenciais, como alternativas sustentáveis aos insumos sintéticos, estão cada vez focando em aplicações como biopesticidas, conservantes alimentares e agentes de preservação cultural. Para essa finalidade as pesquisas avançam e demonstram que certos óleos essenciais têm ação inseticida, antifúngica e antimicrobiana bastante eficaz contra pragas agrícolas, fungos patogênicos e microrganismos deteriorantes, com menor toxicidade para espécies não-alvo quando comparados a pesticidas convencionais (ASSADPOUR *et al.*, 2024).

A relevância de estudos com óleos essenciais aplicados ao controle ambiental perpassa pela necessidade de tendência de desenvolvimento de técnicas de extração mais sustentáveis, bem como de formulações avançadas (nanoemulsões, microcapsulação) que melhoram a estabilidade, biodisponibilidade e segurança dos óleos essenciais. Esses avanços permitem reduzir perdas, prolongar o efeito desejado e minimizar impactos ecológicos (KASPUTE *et al.*, 2025).

Por outro lado, o uso ecológico e sustentável dos óleos essenciais também enfrenta desafios. A produção exige terra, água e energia, e há variabilidade na composição química em função de fatores ambientais, genéticos e do método de cultivo ou extração. A elaboração de biopesticidas baseados em óleos essenciais necessita considerar os efeitos sobre espécies não-alvo, polinizadores e organismos benéficos. Estudos recentes apontam que embora muitos óleos essenciais causem baixo impacto ambiental comparado aos químicos sintéticos, existem casos de ecotoxicidade ou fitotoxicidade se usados em doses inadequadas ou sem avaliação de risco (GOSTIN POPESCU, 2023).

Nessa perspectiva, para que os benefícios ecológicos se concretizem, é necessário considerar limitações ou impactos potenciais. Vários estudos revisaram efeitos tóxicos de extratos vegetais e óleos essenciais sobre organismos aquáticos ou insetos não-alvo, em algumas situações, os óleos essenciais se mostram mais tóxicos que extratos vegetais menos concentrados (FERRAZ *et al.*, 2022).

A variabilidade e instabilidade química da composição dos óleos essenciais estabelece consideráveis diversidades com espécie, faixa geográfica, condições do solo/clima, estação, e práticas de cultivo. Isso dificulta padronização, eficácia previsível ou uso seguro (BEN MIRI, 2025). Além do fato de que plantas usadas para obtenção de óleos essenciais estão sujeitas à extração excessiva na natureza, coleta não sustentável, que pode ameaçar populações selvagens, o que está em desacordo com a necessidade de cadeia seja sustentável (FERRAZ *et al.*, 2022).

Referências

ALVES, Jorge Henrique *et al.* Mapeamento e análise da diversidade de sementes em Casas de Sementes do Cariri Cearense / Mapping and analysis of diversity in seed house in Cariri Cearense /

Mapeo y análisis de la diversidad en dasa de semillas en Cariri Cearense. **REVISTA NERA**, v. 27, n. 1, 13 dez. 2023.

ASSADPOUR, Elham *et al.* Application of essential oils as natural biopesticides; recent advances. **Critical Reviews in Food Science and Nutrition**, v. 64, n. 19, p. 6477–6497, 2024.

BASER, K. Husnu Can and BUCHBAUER, Gerhard. **Handbook of Essential Oils. Science, Technology, and Applications**, Second Edition. Boca Raton, 1128, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1201/b19393>. Acesso em: 16 out. 2025.

BEN MIRI, Yamina. Essential Oils: Chemical Composition and Diverse Biological Activities : A Comprehensive Review. **Natural Product Communications**, v. 20, n. 1, 1 jan. 2025.

BOACHON, Benoît *et al.* Natural fumigation as a mechanism for volatile transport between flower organs. **Nature Chemical Biology**, v. 15, n. 6, p. 583–588, 20 set. 2024.

DEWICK, PM. **Medicinal nature products: A biosynthetic approach**. 2nd edn, John wiley & Sons, New York, 2002.

DUBEY, Vinod Shanker, BHALLA, Ritu and LUTHRA, Rajesh. An overview of the non-mevalonate pathway for terpenoid biosynthesis in plants. **Journal of Biosciences**, 28:637-646. 2003. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/bf02703339>. Acesso em: 17 jul. 2025.

FERRAZ, Celso Afonso *et al.* Ecotoxicity of plant extracts and essential oils: A review. **Environmental Pollution**, v. 292, p. 118319, 1 jan. 2022.

GOSTIN, Irina Neta; POPESCU, Irinel Eugen. Evaluation of the Essential Oils Used in the Production of Biopesticides: Assessing Their Toxicity toward Both Arthropod Target Species and Beneficial Pollinators. **Agriculture** 2024, Vol. 14, Page 81, v. 14, n. 1, p. 81, 30 dez. 2023.

HOSSEIN, Sadeghi, ZAHRA, Robati and SAHARKHIZ, Mohammad Jamal. Variability in *Zataria multiflora* Bioss essential oil of twelve populations from Fars province, Iran. **Industrial Crops and Products**, 67, 221–226, 2015. doi:10.1016/j.indcrop.2015.01.021

KASPUTE, Greta *et al.* Enhancing essential oils: advanced extraction, sustainability, and nanotechnology for optimal use. **Planta**, v. 262, n. 3, p. 1–14, 1 set. 2025.

KEEFOVER-RING, Ken. The chemical biogeography of a widely distributed aromatic plant species shows spatial and temporal variation. **Ecology and Evolution**. 12:e9265, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/ece3.9265>. Acesso em: 16 jul. 2025.

KHAN, Sipper *et al.* Chapter 1 - Essential oils in plants: Plant physiology, the chemical composition of the oil, and natural variation of the oils (chemotaxonomy and environmental effects, etc.). **Essential Oils**. 1-36, 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/jsfa.12695>. Acesso em: 16 ago. 2025.<https://doi.org/10.1002/jsfa.12695>

MCGARVEY DJ and CROTEAU R, Terpenoid metabolism. **The Plant Cell**, 7:1015–1026, 1995.

OCTAVIA, Novi Dwi *et al.* Características da estrutura anatômica e glândulas sebáceas essenciais da folha de hortelã-pimenta (*Mentha piperita*) e hortelã (*Mentha spicata*). **Jornal de Ciência Mundial**,

2(9), 1314–1329, 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.58344/jws.v2i9.413>. Acesso em: 16 ago. 2025.<https://doi.org/10.58344/jws.v2i9.413>.

PAGE, Jonathan E *et al.* Functional analysis of the final steps of the 1-deoxy-D-xylulose 5-phosphate (DXP) pathway to isoprenoids in plants using virus-induced gene silencing. **Plant Physiology**. 134:1401-1413, 2004. Disponível em: <https://doi.org/10.1104/pp.103.038133>. Acesso em: 7 ago. 2025.

PATEL, Rajendra P. Differential response of genotype × environment on phenology, essential oil yield and quality of natural aroma chemicals of five *Ocimum* species. **Industrial Crops and Products**, 87, 210–217. 2016. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.indcrop.2016.04.001>. Acesso em: 10 out. 2025.

SANGWAN, NS *et al.* Regulation of essential oil production in plants. **Plant Growth Regul.** 34, 3-21, 2001.

TSITLAKIDOU, Petroula *et al.* Current status, technology, regulation and future perspectives of essential oils usage in the food and drink industry. **Journal of the Science of Food and Agriculture**, v. 103, p. 6727–6751, 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-91740-7.00016-5>. Acesso em: 9 set. 2025.