

MATERIAL SUPLEMENTAR

EXTRATOS PIROLENHOSOS DE CASCA DE COCO, ACÁCIA NEGRA E EUCALIPTO: CARACTERIZAÇÃO FÍSICO-QUÍMICA E AVALIAÇÃO *IN VITRO* COMO POTENCIAIS INIBIDORES DA UREASE

Núbia Rangel Cândido^a, Luzia Valentina Modolo^b, Vânia Márcia Duarte Pasa^a e Ângelo de Fátima^{a,*} 

^aDepartamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, 31270-901 Belo Horizonte – MG, Brasil

^bDepartamento de Botânica, Universidade Federal de Minas Gerais, 31270-901 Belo Horizonte – MG, Brasil

*e-mail: adefatima@qui.ufmg.br

Tabela 1S. Compostos identificados nas análises de GC/MS das três amostras de EP com os tempos de retenção e as respectivas similaridades com a biblioteca, porcentagem de área e área absoluta

N°	Tempo de retenção (min)	Nome do composto	EPEU			EPCC			EPAN		
			Similar.	Área (%)	Área absoluta	Similar.	Área (%)	Área absoluta	Similar.	Área (%)	Área absoluta
1	4,239	Ciclopentanona	92	0,04	208919	97	0,18	5624847			
2	5,73	Acetoína; 3-hidroxi-2-butanona	94	0,06	291957	90	0,18	5660464	95	0,06	231230
3	6,005	Acetol; 1-hidroxi-2-propanona	97	0,09	463520	98	0,11	3345450	96	0,09	358128
4	6,339	Éster metílico do ácido láctico				96	0,04	1188621	96	0,03	138986
5	7,208	2-ciclopenten-1-ona	95	0,42	2141649	94	0,77	24012885	93	0,18	744366
6	7,499	1-hidroxi-2-butanona				98	0,30	9432913			
7	7,517	1,5-hexadien-3-ol									
8	7,6	2-hidroxibutanoato de metila	90	0,11	577636						
9	8,198	Dihidro-2 <i>H</i> -piran-3(4 <i>H</i>)-ona				92	0,05	1419111			
10	8,748	Ácido acético	99	36,04	$1,84 \times 10^8$	98	13,88	$4,32 \times 10^8$	99	27,59	$1,16 \times 10^8$
11	9,451	Furfural; 2-furancarboxaldeído	99	1,62	8304355	99	3,66	$1,14 \times 10^8$	98	0,58	2448032
12	9,544	1-(acetiloxi)-2-propanona	98	0,93	4776408	98	1,19	37153093	98	0,91	3838036
13	10,04	3,4-dimetil-ciclopent-2-enona				94	0,08	2595612			
14	10,452	1-(furan-2-il)-etanona; 2-acetilfurano				95	0,57	17834702			
15	10,503	Álcool tetrahidrofurfurílico	92	1,58	8092605	93	1,78	55577720	94	3,18	13347105
16	10,881	3-metil-2-ciclopenten-1-ona	98	0,54	2747443				97	0,50	2105972
17	11,055	3,3-dimetil-2-butanona	93	0,54	2751025				92	0,48	2033241

Tabela 1S. Compostos identificados nas análises de GC/MS das três amostras de EP com os tempos de retenção e as respectivas similaridades com a biblioteca, porcentagem de área e área absoluta

N°	Tempo de retenção (min)	Nome do composto	EPEU			EPCC			EPAN		
			Similar.	Área (%)	Área absoluta	Similar.	Área (%)	Área absoluta	Similar.	Área (%)	Área absoluta
18	11,099	Ácido propanóico	95	2,72	13940734	87	2,25	69978343	93	1,99	8357134
19	11,19	2,3-pentanodiona				93	0,73	22780868			
20	11,417	2,3-dimetil-2-ciclopenten-1-ona	95	0,47	2398925	95	0,35	10756812	94	0,42	1751973
21	11,913	Ácido isobutírico; Ácido 2-metilpropiónico				86	0,09	2803147			
22	11,953	Éster metílico do ácido levulínico	96	0,50	2575272	98	0,32	10013626	96	0,49	2074414
23	12,079	5 metil-furfural	95	0,93	4740939	90	0,50	15486759	89	0,51	2142902
24	12,192	3,6-heptanodiona				88	0,19	5833291			
25	12,804	Di-hidro-5-metil-2(3H)-furanona				92	0,14	4438907			
26	13,08	Ácido acético, éster fenílico				95	0,09	2665469			
27	13,144	Butirolactona	92	0,40	2060720	96	0,82	25587646	96	0,76	3192864
28	13,288	Ácido butanóico; Ácido butírico	96	0,91	4674221	92	0,80	24831471	96	0,71	2962918
29	13,45	3-etilciclopent-2-en-1-ona	90	0,11	562667	90	0,13	4185984			
30	13,544	Éster 2-hidroxietílico do ácido acético				96	0,05	1432000			
31	13,732	2,5-dihidro-3,5-dimetil 2-furanona	95	0,51	2608738	93	0,33	10185963	93	0,38	1603277
32	14,051	2-furanmetanol; Álcool furfurílico	95	0,39	2003836	96	0,68	21283654	96	0,54	2275575
33	14,294	Ácido 3-metil-butanóico, ácido isovalérico				95	0,13	4061739			
34	14,35	5-metil-2(5H)-furanona							85	0,15	631861

Tabela 1S. Compostos identificados nas análises de GC/MS das três amostras de EP com os tempos de retenção e as respectivas similaridades com a biblioteca, porcentagem de área e área absoluta

N°	Tempo de retenção (min)	Nome do composto	EPEU			EPCC			EPAN		
			Similar.	Área (%)	Área absoluta	Similar.	Área (%)	Área absoluta	Similar.	Área (%)	Área absoluta
35	14,388	2-hidroxi-benzaldeído; salicilaldeído				81	0,09	2724512			
36	14,735	4-oxopentil acetato				81	0,11	3356504			
37	14,74	5-oxohexanoato de metila				80	0,05	1637872	86	0,07	288265
38	15,003	Éster dimetílico do ácido glutárico				80	0,08	2490008	86	0,11	459683
39	15,277	2-metil-2-pentenal	90	0,25	1275482	89	0,13	4117297	88	0,21	866213
40	15,507	4,5-dimetil- 4-hexen-3-ona	92	0,20	1002936	90	0,24	7417910	87	0,11	464299
41	15,838	Ácido valérico ; Ácido pentanóico	90	0,12	610182	97	0,12	3888672	90	0,09	397429
42	16,014	2(5 <i>H</i>)-furanona	90	0,10	532403	86	0,11	3314359			
43	16,226	5-etil-2(5 <i>H</i>)-furanona									
44	16,45	2-hidroxi-2-ciclopenten-1-ona									
45	16,461	Levoglucosenona				79	0,06	1826369			
46	16,471	2-metil-ciclopentanona							81	0,07	294094
47	16,597	Ácido 2-butenóico; Ácido crotônico	89	0,19	972774	76	0,29	9168394	84	0,18	766295
48	17,083	3,5-dimetil ciclopentenolona	91	0,23	1173405	86	0,22	6924970	91	0,28	1157315
49	17,306	Tetrahydro-2 <i>H</i> -piran-2-ona; 5-valerolactona				90	0,18	5700996			
50	17,793	2-hidroxi-3-metil-2-ciclopenten-1-ona	96	2,56	13103807	95	1,39	43443905	96	3,41	14318597
51	18,066	3,4-dimetil ciclopentenolona				90	0,06	1747617			

Tabela 1S. Compostos identificados nas análises de GC/MS das três amostras de EP com os tempos de retenção e as respectivas similaridades com a biblioteca, porcentagem de área e área absoluta

N°	Tempo de retenção (min)	Nome do composto	EPEU			EPCC			EPAN		
			Similar.	Área (%)	Área absoluta	Similar.	Área (%)	Área absoluta	Similar.	Área (%)	Área absoluta
52	18,349	Guaiacol; 2-metoxi-fenol	98	2,64	13483524	98	6,43	2×10^8	98	2,13	8948289
53	18,659	2-metoxi-3-metilfenol	78	0,08	432522	92	0,09	2786152			
54	19,036	4-metil-5 <i>H</i> -furan-2-ona				83	0,06	1829079			
55	19,218	3-etil-2-hidroxi-2-ciclopenten-1-ona	97	0,60	3083623	87	0,67	21017069	96	0,75	3135388
56	19,448	2,6-dimetil-Fenol; 2,6-xilenol				94	0,05	1709197			
57	19,574	Ácido 5-hexenóico				83	0,10	3049049			
58	20,135	2-metoxi-5-metilfenol; 5-metil-guaiacol	88	0,11	548055	96	0,12	3868688	84	0,19	787654
59	20,414	2-metoxi-4-metilfenol; 4-metil-guaiacol	97	2,02	10337880	97	1,45	45293523	96	1,40	5894502
60	20,71	1,2,3-trimetoxibenzeno	79	0,14	738245						
61	20,791	3-hidroxi-2-metil-4 <i>H</i> -piran-4-ona; maltol				95	0,33	10352115	93	0,42	1743634
62	20,876	2-hidroxi-3-propil-2-ciclopenten-1-ona	85	0,36	1865667				83	0,47	1954098
63	21,323	Fenol	91	2,31	11816726	86	33,98	$1,06 \times 10^9$	92	2,48	10397674
64	21,697	2,3-dihidro-1 <i>H</i> -inden-1-ona	73	0,21	1091134	75	0,17	5183372			
65	21,927	4-etil-2-metoxi-fenol; etil-guaiacol	93	0,98	5009454	92	0,77	23846557	92	0,57	2383032
66	22,486	1,2,3-trimetoxi-5-metil-benzeno	92	0,14	714184				85	0,09	392052
67	22,75	Ácido octanóico, ácido caprílico				86	0,50	15474220			
68	22,912	4-metil-fenol, <i>p</i> -cresol	95	0,68	3482972	97	1,43	44578344	93	0,62	2589000

Tabela 1S. Compostos identificados nas análises de GC/MS das três amostras de EP com os tempos de retenção e as respectivas similaridades com a biblioteca, porcentagem de área e área absoluta

N°	Tempo de retenção (min)	Nome do composto	EPEU			EPCC			EPAN		
			Similar.	Área (%)	Área absoluta	Similar.	Área (%)	Área absoluta	Similar.	Área (%)	Área absoluta
69	23,05	3-metil-fenol; <i>m</i> -cresol	96	0,97	4960602	97	1,02	31914862	95	0,86	3615229
70	23,207	3,4-dimetoxifenol	81	0,15	746202	88	0,11	3543954	85	0,18	765192
71	23,322	Éster metílico do ácido 4-metoxibenzóico				95	0,13	3925487			
72	23,5	2-metoxi-4-propil-fenol	90	0,15	770191	89	0,06	1796158	84	0,09	370348
73	24,238	2,5-dimetil-fenol; 2,5-xilenol				92	0,04	1240091	83	0,11	469423
74	24,608	2-metoxi-4-(1-propenil)-fenol; Isoeugenol	77	0,07	344725	79	0,05	1685626			
75	24,741	3,4-dimetil-fenol	92	0,27	1372573				90	0,30	1241088
76	24,744	4-etil-fenol				96	0,27	8379247			
77	24,876	3-etil-Fenol; <i>m</i> -etilfenol	72	0,21	1080982	70	0,06	1986268			
78	24,912	Butirato de alilo				95	2,72	84659993			
79	25,287	1,6-heptadieno-4-ol	83	0,37	1890680				82	0,74	3122764
80	25,604	3,4-dimetil-fenol; 3,4-xilenol	90	0,13	641517	81	0,11	3567732	85	0,20	860489
81	25,996	Glicerol monoacetato				92	0,06	1718401			
82	26,115	Palmitato de metila	93	0,29	1480574	97	0,18	5656360	88	0,19	807565
83	26,532	2,6-dimetoxi-fenol; Siringol	96	12,89	65955149	96	6,61	2,06 × 10 ⁸	96	20,31	85266420
84	27,72	Ácido levulínico	84	0,18	941971	86	0,30	9201340	84	0,36	1516429
85	28,129	Metil-siringol	83	7,64	39108782	83	1,30	40466900	83	9,70	40729618

Tabela 1S. Compostos identificados nas análises de GC/MS das três amostras de EP com os tempos de retenção e as respectivas similaridades com a biblioteca, porcentagem de área e área absoluta

N°	Tempo de retenção (min)	Nome do composto	EPEU			EPCC			EPAN		
			Similar.	Área (%)	Área absoluta	Similar.	Área (%)	Área absoluta	Similar.	Área (%)	Área absoluta
86	28,291	1,3-di- <i>O</i> -acetilpentopirranose				83	0,12	3633603			
87	28,776	1,4: 3,6-dianidro- α -d-glucopirranose				74	0,23	7239855			
88	29,102	4-etil-2,6-dimetoxifenol	83	4,95	25343564	82	0,63	19587873	82	4,42	18575870
89	29,399	2,4-diacetoxipentano				83	0,11	3468783			
90	29,781	Ácido benzóico	87	0,12	592002	92	0,20	6180496	93	0,46	1914772
91	29,887	Estearato de metila	95	0,49	2518175	95	0,25	7808073	91	0,50	2118537
92	30,153	Oleato de metila	96	0,75	3850995	97	0,40	12338455	94	0,56	2331614
93	30,657	5-hidroximetilfurfural	83	0,14	729676				83	0,30	1260858
94	30,909	Linoleato de metila	95	0,49	2510176	95	0,20	6245581	93	0,46	1913297
95	31,346	4-alil-2,6-dimetoxifenol	90	0,26	1321537	83	0,09	2838406	84	0,24	991705
96	31,637	Vanilina; 4-hidroxi-3-metoxi-benzaldeído	91	0,25	1277670	96	0,15	4577127	89	0,41	1731032
97	32,156	Ácido heptanoico				82	0,35	10979151	80	0,41	1740978
98	32,315	Vanilato de metila	72	0,20	1015955	86	0,21	6540811	73	0,41	1710546
99	32,881	1- (4-hidroxi-3-metoxifenil)-Etanona, Acetovanilona	90	0,23	1159683	96	0,20	6105448	92	0,33	1384383
100	33,142	1- (4-hidroxi-3-metoxifenil) -2-propanona	88	0,55	2835684	91	0,89	27671754	90	0,91	3826987
101	34,477	4-alil-2,6-dimetoxifenol							80	0,20	819165

Tabela 1S. Compostos identificados nas análises de GC/MS das três amostras de EP com os tempos de retenção e as respectivas similaridades com a biblioteca, porcentagem de área e área absoluta

Nº	Tempo de retenção (min)	Nome do composto	EPEU			EPCC			EPAN		
			Similar.	Área (%)	Área absoluta	Similar.	Área (%)	Área absoluta	Similar.	Área (%)	Área absoluta
102	37,228	Ácido 3-hidroxi-4-metilbenzóico				80	0,26	8060610			
103	38,333	ácido n-hexadecanóico; Ácido palmítico	91	0,45	2301313				80	0,16	687541
104	38,466	Éster metílico do ácido 4-hidroxibenzóico				97	0,50	15451691			
105	38,685	4-hidroxi-3,5-dimetoxi-benzaldeído; Siringaldeído	91	0,41	2106754	90	0,12	3729141	83	0,30	1250899
106	39,989	2-metil-1,4-benzenodiol; metilhidroquinona				87	0,45	13959336			
107	40,012	1-(4-hidroxi-3,5-dimetoxifenil)-etanona	92	0,80	4114696				80	0,85	3562385
108	40,584	1-(2,4,6-trihidroxifenil)-2-pentanona	79	1,32	6761653				77	1,22	5121327
109	40,642	hidroquinona; 1,4-benzenediol				79	1,33	41286066			
110	41,703	1- (2,4-dimetil-3-furanil)-etanona				79	0,11	3400483			
111	43,275	6-hidroxi-2H-1-benzopiran-2-ona				81	0,03	1083750			
112	44,884	Estearato de dietilenoglicol	81	0,26	1353618	74	0,06	1943310			
113	45,917	Ácido 8-heptadecenóico	83	0,37	1899370	86	0,07	2245702			

Similar. = Similaridade.



This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Licence.