CZU: 547.913:635.711:543.42 https://doi.org/10.59295/mabt2026.22

STUDIU AL COMPOZIȚIEI ULEIURILOR ESENȚIALE A DOUĂ SPECII DE CIMBRU: SATUREJA SUBSPICATA BARTL. EX. VIS. ȘI SATUREJA MONTANA L. PRIN SPECTROSCOPIE ÎN INFRAROȘU

Diana ȘEPELI

Institutul de Chimie al USM

Rezumat

Uleiurile esențiale de *Satureja subspicata bartl. ex. vis.* și *Satureja montana L.* au fost izolate și studiate. Componentele predominante sunt carvacrolul, al cărui conținut variază de la 49,73% până la 37,22%, și p-cimenul - de la 27,15% până la 6,94%. De asemenea, au fost detectați terpenoizi: γ-terpinen, alcoolul nerol, aldehidele (E)-citral și (Z)-citral; sescviterpene: (+)-β-bisabolen, β-cariofilen, germacren B și germacren D. Spectroscopia IR a fost utilizată pentru a studia compoziția uleiurilor esențiale. Întreaga compoziție a uleiurilor esențiale a fost studiată utilizând GC-MS, datele acesteia fiind utilizate pentru descifrarea spectrelor IR. În spectrele IR s-au găsit benzi de absorbție ale p-cimenului și carvacrolului, legate de grupările funcționale OH, C-H, -CH_3, -$CH(CH_3)_2$, C-C (vibrațiile scheletice ale hidrocarburilor ciclice și aciclice), C-O, C=O (aldehidele și cetonele) și C=C (alchenele). Cea mai mare diferență în spectrele IR se observă în regiunea de 1620 - 1670 cm^{-1}, responsabilă de prezența aldehidelor în uleiuri.

Cuvinte-cheie: spectroscopie IR, cimbru, carvacrol, p-cimen, terpenoids, ulei esențial.

STUDY OF THE COMPOSITION OF ESSENTIAL OILS OF TWO SPECIES OF SAVORY: SATUREJA SUBSPICATA BARTL. EX. VIS. AND SATUREJA MONTANA L. BY INFRARED SPECTROSCOPY

Abstract

The essential oils of *Satureja subspicata bartl. ex. vis.* and *Satureja montana L.* were isolated and studied. The predominant components are carvacrol, the content of which varies from 49.73% to 37.22%, and p-cymene, from 27.15% to 6.94%. Terpenoids were also detected: γ-terpinene, the alcohol nerol, aldehydes (E)-citral and (Z)-citral; sesquiterpenes: (+)-β-bisabolene, β-caryophyllene, germacrene B and germacrene D. IR spectroscopy was used to study the composition of the essential oils. The full composition of the essential oils was studied using GLC-MS, the data from which were used to interpret of IR spectra. The IR spectra revealed absorption bands of p-cymene and carvacrol, which correspond to the functional groups OH, C-H, CH3, -CH(CH3)2, C-C (skeletal vibrations of cyclic and acyclic hydrocarbons), C-O, C=O (aldehydes and ketones), and C=C (alkenes). The greatest difference in the IR spectra is observed in the range of 1620–1670 cm-1, which is responsible for the presence of aldehydes in the oils.

Keywords: IR spectroscopy, *Satureja*, carvacrol, p-cymene, terpenoids, essential oil.

Introducere

Uleiurile esențiale (UE) sunt cele mai importante produse pentru multe industrii și medicină. Sunt un amestec complex de substanțe cu structuri variate.

Scopul cercetării noastre a fost analizarea uleiurilor esențiale de cimbru de munte violet (*Satureja subspicata Bartl. ex. Vis.)* și cimbru de munte (*Satureja montana L.),* cultivate în Republica Moldova la Institutul Grădinii Botanice din Republica Moldova, utilizând spectroscopia IR și o analiză comparativă a compoziției acestora folosind date GC-MS.

Uleiurile esențiale de *Satureja subspicata Bartl. ex. Vis și Satureja montana L.* reprezintă o sursă potențială de ingrediente antimicrobiene pentru industria alimentară și farmaceutică. Ele au fost obținute prin distilare într-un aparat Neo-Clevenger [1,2].

Spectroscopia IR este considerată insuficientă pentru analiza amestecurilor și compușilor complexi. Prin urmare, datele GC-MS au fost utilizate pentru a studia spectrele IR, oferind informații complete despre compoziția uleiului esențial. Analiza GC-MS a uleiurilor esențiale a fost efectuată pe un instrument Agilent Technologies 7890A cu un detector cuadripol selectiv de masă Agilent Technologies MSD 5975C [3]. Analiza GC-MS a uleiurilor esențiale a relevat prezența:

1 - 36 componente *în S. subspicata* - 95,07% (din cantitatea totală de uleiuri esențiale);
2 - 27 componente în *S. subspicata* (formă nouă) - 96,05%;
3 - 26 componente în *S. montana* - 98,16%;
4 - 16 componente în *S. montana* (lotul original 2015) - 97,91%.

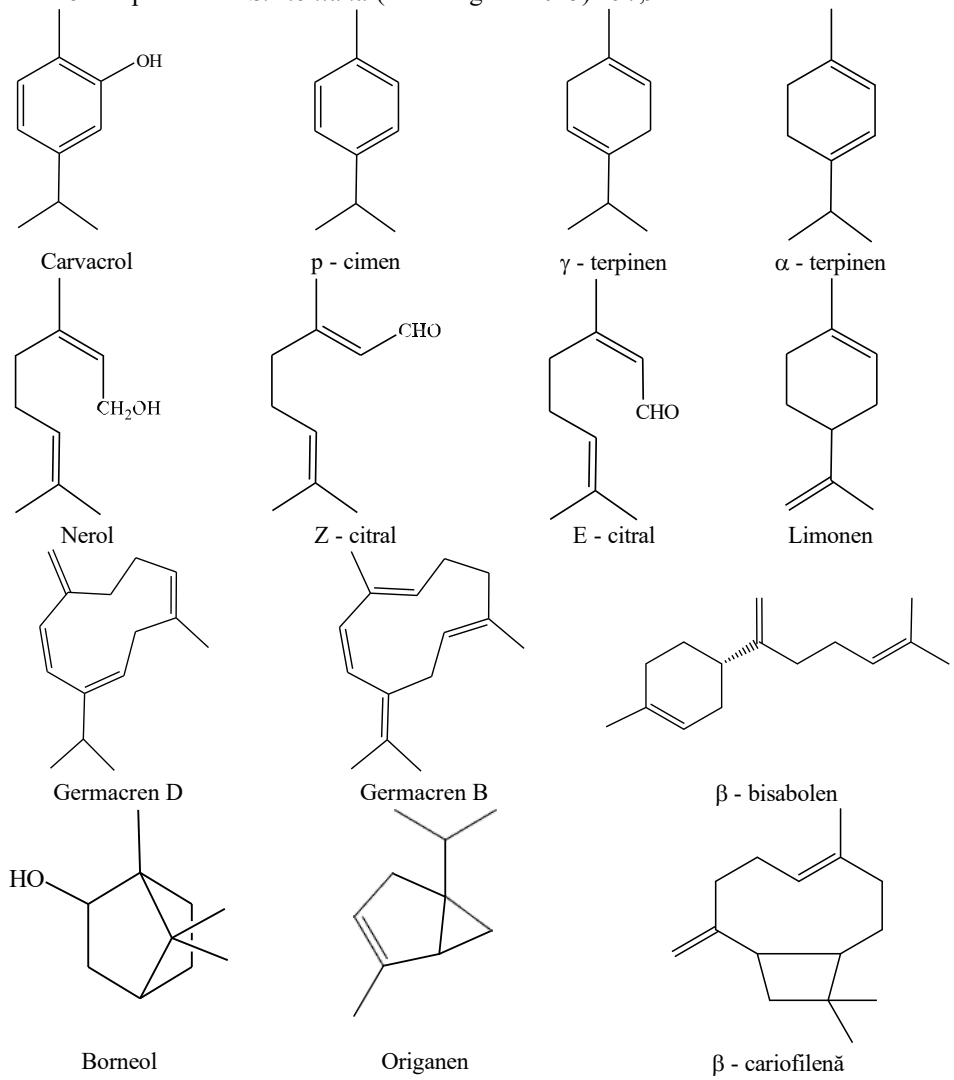


Figura 1. Structura chimică a componentelor principale ale uleiurilor esențiale de *Satureja subspicata bartl.* ex. vis. și *Satureja montana L.*

Conform analizei GC-MS componetul de bază al uleiului esențial de *S. subspicata* **(1)** este terpenul fenolic carvacrolul (47,56%), urmat de hidrocarburile monoterpenice: p-cimen (6,94%) și γ-terpinen (5,54%); nerol (2,15%); aldehidele (E)-citral (7,23%) și (Z)-citral (5,73%); sesquiterpene (+)-β-bisabolen (5,80%), β-cariofilenă (2,61%), germacren B (1,78%) și germacren D (1,42%). Compoziția uleiului esențial al unei alte specii de cimbru, *Satureja subspicata Bartl. ex Vis*., o formă nouă **(2),** este diferită. Aceasta conține carvacrol 37,22%, p-cimen (11,90%), γ-terpinen (5,50%), alcool nerolic (4,34%), (E)-citral (10,83%), (Z)-citral (9,49%), (+)-β -bisabolen (5,23%) și β -cariofilen (2,27%). Cimbrul *Satureja montana L.* **(3)** se caracterizează, de asemenea, printr-un conținut ridicat de carvacrol (45,13%), p-cimen (17,03%), γ -terpinen (13,35%), α-terpinen (2,49%), limonen (1,69%), origanen (1,45%), alcool borneolic (1,21%), β-cariofilenă (3,96%), (+)-β-bisabolen (1,43%). O altă specie de cimbru de munte *Satureja montana L.* (lotul original din 2015) **(4),** conține carvacrol (49,73%), p-cimen (27,15%), γ - terpinen (7,75%), α - terpinen (2,08%), borneol (1,36%), β - cariofilen (3,34%). Aldehidele sunt absente în uleiurile esențiale ale celor două specii de cimbru de munte studiate.

Metode și materiale aplicate

Pentru descifrarea spectrelor IR și atribuirea benzilor grupurilor funcționale corespunzătoare, au fost utilizate diverse baze de date electronice cu spectre IR ale substanțelor individuale, atlase spectrale IR și alte lucrări de referință privind spectroscopia IR [4-8]. Spectrele IR au fost descifrate pe baza caracteristicilor spectrale ale principalelor componente conținute în uleiurile esențiale.

Spectrele au fost înregistrate pe un spectrometru Spectrum 100 FT-IR (Perkin Elmer, SUA) cu transformată Fourier și un dispozitiv de reflexie internă totală atenuată (ATR). La înregistrarea spectrelor IR, analitul (o picătură de ulei esențial) este plasat în contact direct cu un cristal de ZnSe (încorporat în dispozitiv) și fixat în poziție folosind un dispozitiv de prindere. Radiația IR este apoi trecută prin cristal la un unghi special selectat, a cărui intensitate este înregistrată la ieșirea cristalului. Intervalul de înregistrare a spectrului IR a fost de 4000–650 cm^{-1} [9, 10].

Rezultate obținute și discuții

Principalele componente ale uleiului esențial de S. Subspicata sunt terpenele aromatice carvacrol (5-izopropil-2-metilfenol, CAS 499-75-2) și p-cimen (5-izopropiltoluen, CAS 99-87-6). Spectrele IR ale acestor substanțe conțin benzi de absorbție legate de grupările funcționale OH, C-H, CH_3, $-CH(CH_3)_2$, C-C (vibrațiile scheletice ale hidrocarburilor ciclice și aciclice), C-O. [6, 8].

Din spectrele IR este clar că acești compuși și grupările funcționale înrudite cu acești compuși sunt prezente în uleiurile esențiale studiate, izolate din diferite tipuri de cimbru (*Satureja*) (Fig. 2-3).

Uleiurile esențiale de *Satureja subspicata* **(1)** și **(2)** conțin o cantitate mare de componente care conțin gruparea aldehidică: mirtanal, 2,2-dimetilocta-3,4-dienal, Z-citral și E-citral. Conținutul lor total este de 13,57% pentru 1 și 21,36% pentru 2. Spectrele IR ale acestor două uleiuri esențiale prezintă un vârf intens în regiunea de 1661 cm^{-1}, care este legat de absorbția grupării C=O a aldehidelor și cetonelor și a alchenelor C=C (Fig. 2).

În spectrele IR ale uleiurilor esențiale de *Satureja montana* (**3**) și (**4**), intensitățile vârfurilor în aceeași regiune de 1655 și 1621 cm^{-1} sunt foarte scăzute (Fig. 3). În aceste uleiuri, conținutul de compuși aromatici în suma p-cimenului și carvacrolului este de 62,16% - **3** și 76,88% - **4**. Nu există componente care să conțină o grupare aldehidă. Prin urmare, se poate concluziona că cea mai mare diferență în spectrele IR ale uleiurilor esențiale de *Satureja subspicata* și *Satureja montana* se observă în regiunea 1620 - 1670 cm^{-1}, responsabilă de prezența aldehidelor în uleiuri (Fig. 2-3).

Interpretarea unor benzi de absorbție IR ale uleiurilor esențiale studiate este prezentată în Tabelul 1.

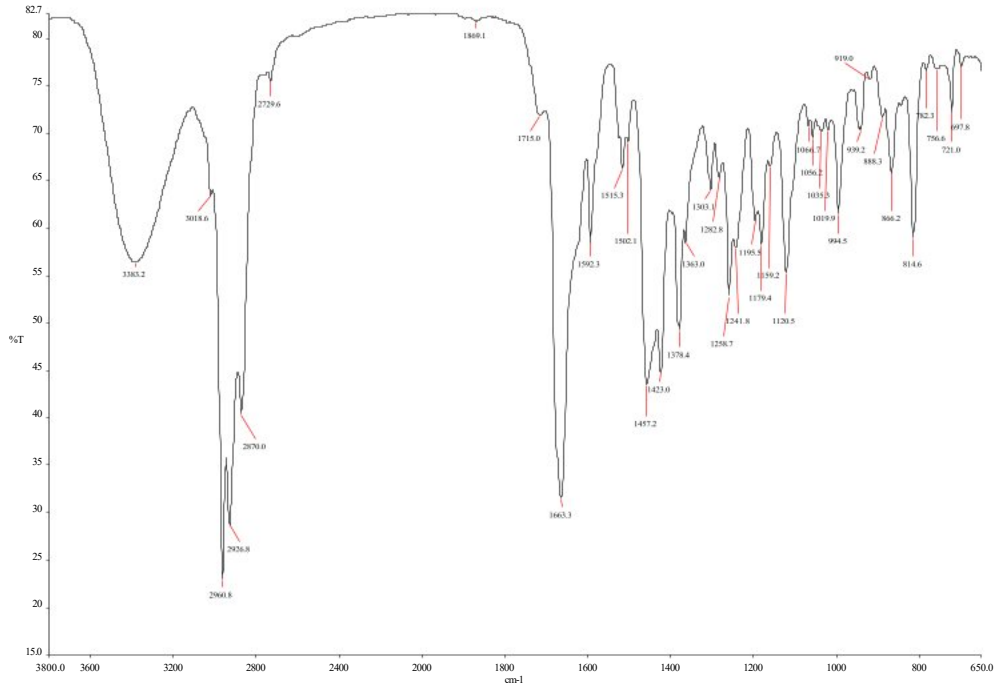


Figura 2. Spectrul IR al uleiului esențial de Satureja subspicata Bartl. ex Vis. (formă nouă) (2).

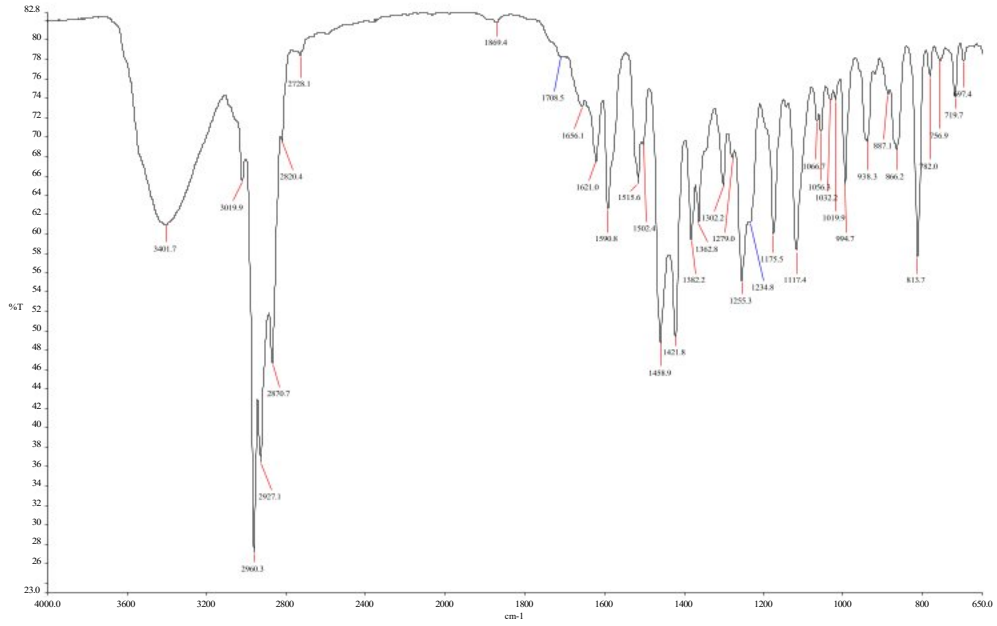


Figura 3. Spectrul IR al uleiului esențial de *Satureja montana L.* (3).

Tabelul 1. Interpretarea unor benzi de absorbție ale spectrelor IR ale uleiurilor esențiale de *Satureja subspicata Bartl. ex Vis.* și *Satureja montana L.*

Denumirea uleiului esențial	Fragmente structurale	Maxime de absorbție, cm-1	Tipuri de oscilații
S. subspicata (mostrele 1 și 2)	C-H C-H (inel aromatic)	3019, 2961, 2927, 2870, 1457, 1423, 1056, 815	ν δ
	C-H (-C(CH3)3)	1179	δ
	-CH2-CH2-CH2-	2927, 2870, 1457, 721	ν δ
	-CH2-	994	δ
	-CH3	2961, 2870, 1457, 1378	ν δ
	≡C-CH3, >C(CH3)2, -C(CH3)3	2961, 2927, 2870, 1457, 1378	ν δ
	R – OH R : alchil, fenil	3383 1303, 1282, 1241, 721	ν δ
	C-O (alcooli, eteri)	1257	ν
	C=O (grupare ceto – aldehidă –COH sau >C=O)	2729, 1715, 1663	ν δ
	-C=C- (alchene)	1663	ν
	C-C (inel aromatic)	1592, 1515, 1502, 1457	δ
Satureja montana (mostrele 3 și 4)	C-H C-H (inel aromatic)	3020, 2960, 2927, 2870, 1459, 1421, 1175, 1117, 1056, 1020, 994, 814	ν δ δ
	C-H (-C(CH3)3)	1175	δ
	-CH2-	994	δ
	-CH3	2960, 2870, 1459, 1382	ν δ
	≡C-CH3, >C(CH3)2, -C(CH3)3	2960, 2927, 2870, 1459, 1382	ν δ
	O-H (Ar – OH)	3401 1302, 1279, 720	ν δ
	C-O (alcooli, eteri)	1255	ν
	-C=C- (alchene)	1655, 1621	ν
	C-C (inel aromatic)	1591, 1515, 1459	δ

Concluzii

Au fost izolate și studiate uleiuri esențiale din două soiuri de cimbru de munte violet și două soiuri de cimbru de munte. Componentele predominante au fost carvacrolul și p-cimenul. De asemenea, au fost detectate terpenoidele γ-terpinen, alcoolul nerol, aldehidele (E)-citral și (Z)-citral, precum și sescviterpenele (+)-β-bisabolen, β-cariofilen, germacren B și germacren D.

Evaluarea posibilității de analiză uleiurilor esențiale folosind spectroscopia IR a relevat că, deși această metodă nu oferă informații complete, este totuși una dintre cele mai bune metode analitice pentru amestecuri complexe de substanțe, cum ar fi uleiurile esențiale. Această lucrare propune o abordare pentru studierea compoziției uleiurilor esențiale folosind spectroscopia IR cu transformare Fourier cu atașament ATR în intervalul de lungimi de undă 4000-650 cm^{-1}.

Cea mai mare diferență în spectrele IR ale uleiurilor esențiale de *Satureja subspicata* și *Satureja montana* se observă în intervalul 1620–1670 cm^{-1}, acesta fiind responsabil pentru

prezența aldehidelor în uleiuri. Spectrele IR ale uleiurilor esențiale de *Satureja subspicata* prezintă un vârf intens la 1661 cm^{-1}, atribuit absorbției grupării C=O a aldehidelor și cetonelor și C=C a alchenelor. În spectrele IR ale uleiurilor esențiale de *Satureja montana*, intensitățile vârfurilor la 1655 și 1621 cm^{-1} sunt foarte scăzute, deoarece nu există componente care să conțină o grupare aldehidă.

Referinţe:

1. СИДОРОВ, И.И., ТУРЫШЕВА, Н.А., ФАЛЕЕВА, Л.П., ЯСЮКЕВИЧ, Е.И. Технология натуральных эфирных масел и синтетических душистых веществ. Москва: Легкая и пищевая промышленность, 1984. 368с. УДК: 665.52.011(075). Disponibil: https://djvu.online/file/TZUqhlUWyJO0w [Accesat: 25.03.2026]
2. TEPE, B., CILKIZ, M.A. Pharmacological and phytochemical overview on Satureja. In: Pharmaceutical Biology, 2016, vol. 54, nr. 3, pp. 375-412. ISSN 1388-0209. DOI: 10.3109/13880209.2015.1043560.
3. DRAGALIN, I., ARICU, A., CIOCARLAN, N., CIOCARLAN, A., CODITA, V. GC-MS analysis of the essential oil of Satureja subspicata Bartl. ex Vis. of Moldovan origin. In: Chemistry Journal of Moldova, 2016, nr. 11(2), pp. 105-108. ISSN 1857-1727. DOI: 10.19261/cjm.2016.11(2).06
4. ТАРАСЕВИЧ, Б.Н. ИК спектры основных классов органических соединений. Справочные материалы. Москва: МГУ имени М.В. Ломоносова, 2012. 54с. Disponibil: http://www.chem.msu.su/rus/teaching/tarasevich/Tarasevich_IR_tables_29-02-2012.pdf [Accesat: 25.03.2026]
5. ВАСИЛЬЕВ, А.В., ГРИНЕНКО, Е.В., ЩУКИН, А.О., ФЕДУЛИНА, Т.Г. Инфракрасная спектроскопия органических и природных соединений: Учебное пособие. Санкт-Петербург: СПбГЛТА, 2007. 54с. Disponibil: https://studfile.net/preview/3167118/ [Accesat: 25.03.2026]
6. Spectral Database for Organic Compounds SDBS. National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Japan. 2026. Disponibil: https://sdbs.db.aist.go.jp [Accesat: 25.03.2026]
7. NIST Chemistry WebBook, SRD 69. The National Institute of Standards and Technology of the U.S. Department of Commerce, USA. 2025. Disponibil: https://webbook.nist.gov/chemistry/#Documentation [Accesat: 25.03.2026]
8. SAMEIN, N.M., KAMEL, F.H. Extraction of compounds from thyme leaves and their antimicrobial activity. In: Diyala Agricultural Sciences Journal, 2019, vol. 11, nr. 2, pp. 18–24. ISSN 2073-9524. DOI:https://doi.org/10.52951/dasj.19110203
9. БЁККЕР Ю. Спектроскопия. Москва: Техносфера, 2009. 527 с. ISBN 978-5-94836-220-5 (в пер.).
10. ЕЖЕВСКАЯ, Т.Б., БУБЛИКОВ, А.В. Пробоподготовка и методы исследования различных объектов на ИК фурье-спектрометре с приставками, включая ИК микроскоп и МНПВО, при проведении криминалистических экспертиз. В: Эксперт-криминалист, 2006, №4, сс. 28-34. ISSN 2072-442X.

Date despre autori:



Diana ȘEPELI
Institutul de Chimie al USM
e-mail: dianashepel@gmail.com
ORCID: 0000-0002-0192-1085