

Erros na identificação dos constituintes de óleos essenciais: persistência e propagação

Humberto R. Bizzo

Embrapa Agroindústria de Alimentos - Av. das Américas, 29501 Rio de Janeiro, Brasil
humberto.bizzo@embrapa.br

Palavras-chave: cromatografia gasosa, espectrometria de massas, índices de retenção.

Não há inteligência artificial que funcione sem alguma inteligência natural por trás. A introdução dos computadores e sistemas informatizados acelerou expressivamente a velocidade e a confiabilidade no processamento de dados em geral, bem como naqueles associados à identificação de constituintes de óleos essenciais (OE). A análise de OE, porém, continua sendo uma “tarefa complexa” (1). A espectrometria de massas, empregada como detector após a cromatografia em fase gasosa (CG-EM), é a principal ferramenta utilizada na identificação dos constituintes de OE, mas possui severa limitação na diferenciação de isômeros e, para infortúnio dos que trabalham na área, a maioria das relações estruturais entre os constituintes de OE é isomérica. Não se trata de uma “pegadinha” da natureza, mas antes uma característica evolutiva das plantas. É fato que o uso de índices de retenção, sejam os de Kováts (2) ou os de van den Dool e Kratz (3), desenvolvidos antes mesmo ou simultaneamente à hifenação CG-EM, ajudam (e muito!) na identificação, mas limitações existem e persistem. O erro, porém, só aparece quando se insiste na identificação com uma avaliação incompleta, ainda que faltem informações, ou quando se efetua a análise sem uma avaliação crítica das evidências (dados) disponíveis para comparação, por exemplo, quando a identificação é feita apenas com o resultado da busca automática nas bibliotecas de espectros. Não se pode culpar o *software*, já que ele faz o que nós o mandamos fazer. O erro é sempre do fator humano. A literatura científica está repleta de identificações erradas. Até mesmo nos melhores textos (4), erros existem. Ao se consultar esses dados e aplicá-los sem critério e senso crítico, propaga-se o erro. Serão apresentados e discutidos exemplos desses erros, bem como o papel dos revisores e editores na sua propagação. Como já ensinou Kant: *A culpa do erro, temos que no-la atribuir a nós mesmos (...) A isto induziu-nos nosso pendor a julgar e a decidir até mesmo nas situações em que, por causa de nossa limitação, não estamos capacitados a julgar e a decidir* (5). Soluções e alternativas existem, desde que se deixem de lado a preguiça em pensar e a pressa em publicar.

1. Bicchi et al., Flavour & Fragrance Journal, 2008, 23, 382-391.
2. Kováts, Helvetica Chimica Acta, 1958, 41, 1915-1932.
3. van den Dool, H. and Kratz, P.D. Journal of Chromatography, 1963, 11, 463-471.
4. Adams, R.P., Identification of essential oil components by gas chromatography / mass spectrometry. 4th ed. Carol Stream, IL: Allured Publishing Co., 2007.
5. Kant, I., Lógica. Rio de Janeiro: Tempo Brasileiro, 1992.

Agradecimentos: FAPERJ, CAPES, CNPq