

## Toxicidade de derivado do corante C.I. Disperse Violet 93 para o microcrustáceo *Daphnia similis*

Natália G. Camparotto\*, Josiane A. S. Vendemiatti, Patrícia Prediger

### Resumo

O projeto refere-se a síntese de derivado do corante C.I. Disperse Violet 93, sua caracterização e avaliação da toxicidade dos produtos sintetizados.

### Palavras-chave:

Ecotoxicidade, síntese orgânica, corantes dinitrofenilazos

### Introdução

Fenilbenzotriazóis podem ser formados a partir de reações de redução de azo corantes da classe dinitrofenilazo. O processo de redução ocorre nas etapas de pós-tingimento da indústria têxtil, através de agentes redutores utilizados para retirar o excesso de corantes não aderidos às fibras de tecido, o qual promove a ciclização e formação do anel benzotriazol<sup>1</sup>.

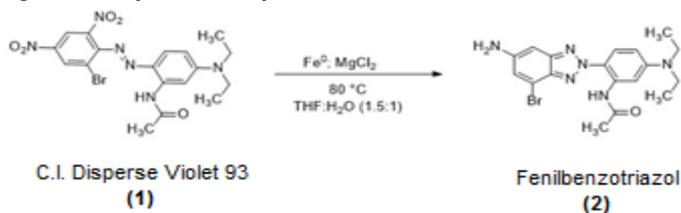
Corantes da classe azo já foram detectados em regiões sob influência de despejos de indústrias têxteis no Brasil, indicando que a maior parte dos tratamentos convencionais de efluentes não são eficientes na remoção desses compostos<sup>2</sup>. A mutagenicidade de compostos desse grupo já foi descrita na literatura, mas não existem dados sobre sua toxicidade para organismos aquáticos<sup>3</sup> que possam auxiliar na avaliação de risco para a proteção da vida aquática.

O objetivo desse trabalho foi caracterizar quimicamente um recém-sintetizado fenilbenzotriazol derivado do corante C.I. Disperse Violet 93 e avaliar sua toxicidade aguda para o microcrustáceo *Daphnia similis*.

### Resultados e Discussão

A reação de redução para a formação do anel benzotriazol (Figura 1) foi realizada com ferro metálico sob aquecimento<sup>4</sup>.

Figura 1. Reação de formação do fenilbenzotriazol.



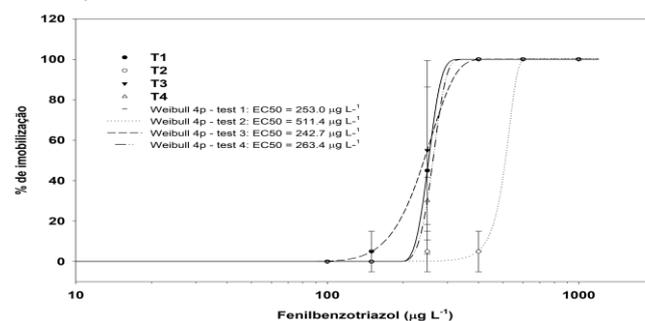
A reação foi acompanhada por cromatografia de camada delgada (CCD). O fenilbenzotriazol foi revelado com ninhidrina e isolado por cromatografia em sílica gel com cerca de 7% de rendimento. A estrutura do composto foi confirmada por Ressonância Magnética Nuclear de hidrogênio (<sup>1</sup>H RMN) e de carbono (<sup>13</sup>C RMN) e Espectrometria de Massas de alta resolução (HRMS).

A HRMS revelou que a massa molecular [M H<sup>+</sup>] do 2-fenilbenzotriazol **2** (para C<sub>18</sub>H<sub>21</sub>BrN<sub>6</sub>O) foi 419,1040 próximo da massa teórica de 419,1020 com um erro calculado de 4.77 ppm.

Os testes de toxicidade aguda para *Daphnia similis* foram realizados de acordo com o protocolo OECD guia n° 202<sup>5</sup> e ABNT/NBR 12713<sup>6</sup>. Foram realizados quatros

testes independentes com quatro réplicas e cinco neonatas (<24h) cada um. Após 48 horas de exposição a concentração de efeito (CE50) global baseada nos 4 testes independentes e calculada por regressão logística Anova one-way, Weibull 4 parâmetros (Figura 2), foi de 300 ± 13 µg L<sup>-1</sup>. Este valor se encontra abaixo do limite de solubilidade e diferente da toxicidade aguda predita pelo modelo *in silico* do ECOSAR estimada em 58,675 mg L<sup>-1</sup> para microcrustáceos.

Figura 2. Curvas de dose resposta dos testes de toxicidade aguda com *Daphnia similis*<sup>7</sup>



### Conclusões

O novo composto foi sintetizado e quimicamente caracterizado com êxito. Através do cálculo da CE50, o fenilbenzotriazol sintetizado pode ser classificado como Categoria I, muito tóxico para a vida aquática, de acordo com a classificação do GHS<sup>8</sup> (*Globally Harmonized System*). Portanto, quando lançados no ambiente, podem ser classificados como uma nova classe de contaminantes emergentes.

### Agradecimentos

Processo FAPESP 2015/07033-7; CAPES; CNPq; FAEPEX. Laboratório de Ecotoxicologia e Genotoxicidade (LAEG)/FT.

<sup>1</sup>Shiozawa, T. et al. *Chem. Research in toxicology*. **1998**, *11*, 375-380.

<sup>2</sup>VACCHI, Francine Inforçato et al (submetido). Quantifying the contribution of dyes to the mutagenicity of environmental samples from textile activities, *Science of the Total Environment*. **2017**.

<sup>3</sup>Ohe, T. et al. *Mutation Research/Fundamental and Molecular Mechanisms of Mutagenesis*. **1999**, *429*, 189-198.

<sup>4</sup>Nukaya, H. et al. *Mutation Research/Genetic Toxicology and Environmental Mutagenesis*. **2001**, *492*, 73-80.

<sup>5</sup>OECD, Test No. 202: *Daphnia sp. Acute Immobilisation Test*, OECD Publishing, Paris. **2004**.

<sup>6</sup>ABNT. NBR 12713: *ecotoxicologia aquática: toxicidade aguda – método de ensaio com Daphnia spp (Cladocera, Crustacea)*. Rio de Janeiro, **2009**. 23 p.

<sup>7</sup>Vendemiatti, J. A. S., Tese de Doutorado. Faculdade de Tecnologia, Universidade Estadual de Campinas, Limeira. **2018**.

<sup>8</sup>Occupational Safety and Health Administration (OSHA). *Globally harmonized system of classification and labelling of chemicals (GHS)*. **2003**.