

AVALIAÇÃO DA TOXICIDADE DE CORANTES DISPERSOS ANTRAQUINONAS PARA *D. SIMILIS*

Palavras-Chave: CORANTES-1, ANTRAQUINONAS-2, TOXICIDADE-AGUDA-3

Autores/as:

NATHALIA OLIVEIRA DA COSTA, FT - UNICAMP

ANJAINA FERNANDES DE ALBUQUERQUE, FT - UNICAMP

GABRIELA ALMEIDA, FT - UNICAMP

Prof. Dr. NELSON R VINUEZA, NCSU

Prof. ^a Dr. ^a GISELA DE ARAGÃO UMBUZEIRO (orientadora), FT - UNICAMP

INTRODUÇÃO:

A Max Weaver Dye Library (MWDL) é um acervo com 98.000 amostras de corantes sintéticos doados à North Carolina State University em 2014. Aproximadamente 2.200 corantes do acervo tiveram suas estruturas digitalizadas e curadas por ferramentas de quimioinformática, compondo uma base de dados. Esta base representa um vasto conjunto a ser explorado quanto a possibilidades de aplicações, bem como para avaliações do perigo ao ambiente aquático. Neste trabalho foram estudados corantes dispersos do grupo das antraquinonas, que apesar de serem menos populares que os do tipo azo, tem uma vasta aplicação industrial.

OBJETIVO:

Avaliar a toxicidade aguda de corantes dispersos, do grupo antraquinona, da MWDL

utilizando um organismo aquático e comparar os resultados em função da sua similaridade estrutural.

METODOLOGIA:

Os corantes foram selecionados a partir de um corante modelo (de toxicidade conhecida) usando o índice de Tanimoto para determinar as similaridades estruturais entre eles. Quanto mais próximo de 1, maior a similaridade entre as estruturas. Os testes de toxicidade aguda foram realizados com o microcrustáceo de água doce, *Daphnia similis* de acordo com a Guideline nº 202 da OCDE (OCDE, 2004). Em cada um dos quatro tubos de vidro empregados no teste, cinco neonatos ≤ 24 h foram expostos por 48 h em 10 mL de solução teste, sob condições estáticas a 21°C, sob fotoperíodo de 16/8h (claro/escuro), sem alimentação durante a exposição. Foram avaliadas cinco concentrações de teste para cada corante, sendo a máxima concentração

equivalente a 0,01% v/v da solução estoque em DMSO conforme recomendado pela OCDE (2019). Controles foram incluídos em cada teste e consistiram em meio sintético, MS, (controle negativo) e DMSO 0,01% v/v em meio MS (controle solvente). Após 48 horas de exposição, os organismos imobilizados foram contados. Para os corantes que apresentaram toxicidade foi calculada a concentração efetiva (imobilidade) mediana (CE50), com limites de confiança de 95%, por meio do método de regressão logística.



fig 1: *D. similis* após exposição ao corante disperso

RESULTADOS E DISCUSSÃO:

Foram selecionados 17 corantes dispersos do grupo antraquinonas com índices de similaridade que variam de 0,972 a 0,075. A faixa foi determinada de modo a obter respostas positivas e negativas, considerando

que quanto maior a similaridade entre as estruturas maior será a resposta toxicológica. O corante modelo (X-9525-9) apresentou uma CE50 de 0,36 mg L⁻¹ (0,20 – 0,48 mg L⁻¹) para o organismo *D. similis*. Dos 17 corantes adicionais testados, apenas o corante X-9525-102 apresentou toxicidade com uma CE50 de 0,31 mg L⁻¹ (0,19 - 0,41 mg L⁻¹) e apresentou um índice de similaridade de 0,462. Já para os demais corantes, apesar de apresentarem índices de similaridades mais elevados quando comparados ao X-9525-102, não apresentaram toxicidade frente ao organismo-teste. Os testes foram validados após obterem dados de imobilidade inferior ou igual a 10% no controle negativo e controle solvente (0,01% DMSO). Os valores dos parâmetros físico-químicos de condutividade elétrica, oxigênio dissolvido e pH permaneceram estáveis após o final do teste agudo (48 horas), tendo uma variação menor que 1,5 unidades para pH, obtendo concentração de oxigênio dissolvido maior ou igual a 3 mg L⁻¹ e condutividade elétrica em torno de 260 µS/ cm, estando em conformidade com a OCDE (2004). O uso do índice de Tanimoto foi uma ferramenta para a obtenção de um conjunto amostral representativo das antraquinonas da base de aproximadamente 2200 corantes curados do acervo da Max Weaver Dye Library (MWDL). Porém, tendo conhecimento somente da similaridade estrutural não foi suficiente para corroborar com os efeitos observados.

Tabela 1: Valores de concentração letal de 50% (CL50) obtidos nos testes de toxicidade aguda com *D. similis*.

Amostra	CL50a (I.C.) b (mg L-1)	Concentração máxima (mg L-1)
065	0,36 (0,20 - 0,48)	0,44
066	Não tóxico	0,12
067	Não tóxico	0,25
068	Não tóxico	0,44
069	Não tóxico	0,5
070	Não tóxico	0,43
071	Não tóxico	0,44
072	Não tóxico	0,91
073	Não tóxico	0,58
074	Não tóxico	1,15
075	Não tóxico	0,65
076	Não tóxico	0,29
077	Não tóxico	0,91
078	Não tóxico	0,44
079	Não tóxico	0,28
080	Não tóxico	0,29
081	0,31 (0,19 - 0,41)	0,39

a Concentração letal 50%; b Intervalo de confiança.

CONCLUSÕES:

Não foi possível correlacionar a toxicidade aguda dos corantes testados com base nas similaridades obtidas pelo índice de Tanimoto. Os dados gerados contribuíram para a caracterização do perigo para este conjunto de corantes da MWDL. A aquisição de dados de toxicidade aquática para novos corantes é muito importante uma vez que os resultados podem auxiliar na seleção de compostos menos nocivos pelos setores industriais, evitando efeitos adversos à biota aquática. Além disso, os dados gerados contribuem com a literatura provendo dados de caracterização do perigo de corantes dispersos sintéticos do grupo das antraquinonas.

BIBLIOGRAFIA

ABNT - Associação Brasileira de Normas Técnicas. Ecotoxicologia aquática - Toxicidade

aguda - **Método de Ensaio com *Daphnia spp*** (Cladocera, Crustacea). Norma ABNT - NBR 12713. 27p. 2022.

OECD (2004) Test No. 202: ***Daphnia sp. acute immobilisation test***. OECD guidelines for the testing of chemicals, Section, OECD Publishing, Paris, v. 2.

OECD (2019), **Guidance Document on Aquatic Toxicity Testing of Difficult Substances and Mixtures**, OECD Series on Testing and Assessment, OECD Publishing, Paris.

KUENEMANN, Melaine A. et al. **A coleção histórica acessível de corantes sintéticos de Weaver: uma análise quimioinformática**. *Ciência Química*, v. 8, n. 6, pág. 4334-4339, 2017.

UMBUZEIRO, G. A., ALBUQUERQUE, A. F., VACCHI, F. I. et al. **Towards a reliable prediction of the aquatic toxicity of dyes**. *Environmental Sciences Europe*, v. 76, n. 31, 2019.