

Uso de LC/MS/MS para análise de p-fenilenodiamina e resorcinol em água potável e tintura de cabelo

Felipe F. Hudari¹(PG), Thalita B. Zanoni²(PG), Bianca Ferreira da Silva (PQ), Lucio C. de Almeida¹(PQ), Maria V.B. Zanoni¹(PQ)*

¹Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", Araraquara, SP, Brasil

²Faculdade de Ciências Farmacêuticas, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, SP, Brasil

*email: boldrinv@yahoo.com.br

Palavras Chave: p-fenilenodiamina, Resorcinol, Corante de cabelo, LC-MS/MS.

Introdução

Os corantes de cabelo do tipo permanentes são responsáveis por 80% do mercado mundial da tintura de cabelo e muitos problemas relacionados com alergia, toxicidade e mutagenicidade^{1,2} tem sido reportado. O processo tem por princípio reações de oxidação entre substâncias precursoras (Ex. amina) e agentes acopladores (Ex. fenol) em meio alcalino e agente oxidante, gerando espécies coloridas dentro do fio de cabelo. A química envolvida neste processo de tintura é complexa e métodos analíticos capazes de determinar estes corantes e seus precursores em meio aquoso ou formulações comerciais é escassa. O presente trabalho tem por objetivo desenvolver um método analítico baseado na técnica de LC-ESI-MS-MS QTrap para identificar e quantificar os diferentes produtos formados em uma tintura envolvendo mistura de p-fenilenodiamina (PPD) e resorcinol (RSN) em meio amoniacal com peróxido de hidrogênio.

Resultados e Discussão

Medidas de LC-MS/MS foram realizadas em um Cromatógrafo Líquido de Alta Performance 1200 Agilent Technologies acoplado a um Espectrômetro de Massas 3200 QTRAP (Linear Ion Trap Quadrupole LC-ESI-MS/MS). Espectros na região do UV-Vis foram obtidos em um espectrofotômetro Hewlett-Packard 8453 UV-Vis em célula de quartzo de 1 cm de caminho ótico. Soluções de PPD e RSN antes e após reação em 1% peróxido de hidrogênio em tampão amônia 0,1 mol L⁻¹ (pH 8,0) foram analisadas por UV-Vis e LC-MS-MS. PPD apresenta espectros de UV-Vis com dois picos em 307 e 474 nm e cromatogramas com pico intenso em 1,76 min com m/z de $[M+H]^+$ = 109,2. RSN caracteriza-se por um pico intenso em 281 nm na região do UV e pico de baixa intensidade no LC-MS-MS no tempo de retenção ($t_{ret.}$) de 6,88 min com m/z $[M+H]^+$ = 111,0. Após 30 min de reação em tampão

amoniacal observa-se a diminuição destes picos e um pico extra em 424 nm atribuído ao intermediário reativo, p-quinonediimina (PQD), caracterizado por um pico no tempo de retenção de 2,22 min e m/z de $[M+H]^+$ = 107,0. Concomitantemente observa-se um pico extra em 604 nm, atribuído á formação da base de Bandrowski base (BB), identificado por um pico no tempo de retenção de 8,23 min com m/z de $[M+H]^+$ = 319,4. O produto final observado após 1 h de reação apresenta coloração verde identificado no tempo de retenção de 5,37 min com uma m/z $[M+H]^+$ = 321,3, o qual é denominado como corante verde indoanilinao. O método foi aplicado na determinação de PPD e RSN em amostras de água potável fortificadas com 2.74 mg L⁻¹ de PPD e RSN e apresentaram uma média de recuperação de 97 % a 100% (n=3) e desvio padrão inferior a 3.5%. A ocorrência do precursor PPD e agente acoplador RSN foi identificada em tintura de cabelo comercial EMBELLEZE MAXTON® (2.0 preto natural). A análise mostrou a presença de 24.10 mg de PPD e 10.34 mg de RSN por grama de tintura de cabelo (n= 3). Não foi observada na amostra comercial nenhuma ocorrência dos intermediários formados apenas após a reação com peróxido de hidrogênio em meio amoniacal. No entanto, amostras de PPD expostas ao peróxido de hidrogênio apresentaram preponderância do intermediário PQD e BB, mesmo sem resorcinol na reação.

Conclusões

O método de LC-MS/MS pode ser utilizado com sucesso na determinação analítica de PPD e RSN em amostras de água potável e tintura de cabelo comercial, bem como no monitoramento de produtos de reação gerado em meio oxidante, assinalados como possíveis mutagênicos.

Agradecimentos

CAPES, CNPq e FAPESP

¹ Chen, Y. H.; Liu, Y.-Y.; Lin, R.-H. e Yen, F.-S. J. Hazard. Mater. 2009, 163, 973.

² Yin, H.; Zhang, Q.; Zhou, Y.; Ma, Q.; Liu, T.; Zhu, L. e Ai, S. Electrochim. Acta. 2011, 56, 2748.