

# Síntese e atividade anticorrosiva de feniltiouréias em meio ácido frente ao aço carbono AISI 1020

**Arthur Valbon** (PG), **Aurea Echevarria\*** (PQ)

arthur-valbon@hotmail.com

Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro.

Palavras Chaves: Tiouréia, Inibidores de Corrosão, Modelagem Molecular, Impedância Eletroquímica.

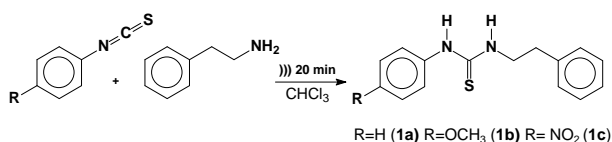
## Introdução

Tiouréias pertencem a uma classe de compostos orgânicos que são utilizadas como fármacos, além de herbicidas e pesticidas<sup>1</sup> e, também, como inibidores de corrosão<sup>2</sup>. A boa eficiência das tiouréias como inibidores orgânicos de corrosão é atribuída à presença de N e S, que possuem elétrons livres, favorecendo sua adsorção na superfície metálica<sup>2</sup>.

Neste trabalho foram sintetizadas três tiouréias derivadas da fenetilamina e avaliado o potencial anticorrosivo através das técnicas de Resistência de Polarização Linear (RPL) e Espectroscopia de Impedância Eletroquímica (EIE). As eficiências de inibição experimentais foram confrontadas com dados obtidos por cálculos teóricos.

## Resultados e Discussão

A síntese das tiouréias **1a-1c** foi realizada usando-se irradiação em banho de ultrassom a partir dos isotiocianatos de fenila substituídos e a fenetilamina, Figura 1. Os pontos de fusão (PF) e rendimentos podem ser observados na Tabela 1.



**Figura 1.** Síntese das tiouréias **1a-c**.

**Tabela 1.** Rendimentos e PF das tiouréias obtidas.

| Compostos | Rendimento (%) | PF (°C) |
|-----------|----------------|---------|
| <b>1a</b> | 90             | 99-102  |
| <b>1b</b> | 98             | 111-113 |
| <b>1c</b> | 95             | 142-144 |

Os cálculos teóricos foram feitos utilizando o método semi-empírico PM3 do programa SPARTAN-PRO, sendo calculados a Energia de Ionização ( $E_i$ ), Momento Dipolo ( $\mu$ ) e Carga de Mulliken no átomo de enxofre (CM). A avaliação do efeito inibidor da corrosão foi realizada utilizando técnicas eletroquímicas (RPL e EIE) com eletrodo de trabalho de aço carbono AISI 1020, Ag/AgCl como referência e de platina como auxiliar. Os ensaios foram feitos em HCl 1 mol.L<sup>-1</sup>. No ensaio de RPL foram realizadas varreduras entre  $\pm 10$  mV em torno do potencial de circuito aberto.

38ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

As medidas de EIE foram realizadas em um intervalo de frequência de 10 kHz-100 mHz e amplitude de 10 mV. A Tabela 2 mostra os resultados da eficiência de inibição da corrosão (EI) e das avaliações teóricas.

**Tabela 2:** Resultados das análises.

| Comp.     | $E_i$<br>(eV) | $\mu$<br>(debie) | CM<br>(eV) | Conc.<br>(mol.L <sup>-1</sup> ) | EI (%) |     |
|-----------|---------------|------------------|------------|---------------------------------|--------|-----|
|           |               |                  |            |                                 | EIE    | RPL |
| <b>1a</b> | 8,61          | 5,90             | -0,336     | 7,5x10 <sup>-5</sup>            | 90     | 83  |
|           |               |                  |            | 1,0x10 <sup>-4</sup>            | 92     | 87  |
|           |               |                  |            | 2,5x10 <sup>-4</sup>            | 93     | 90  |
|           |               |                  |            | 5,0x10 <sup>-4</sup>            | 94     | 92  |
| <b>1b</b> | 8,57          | 6,06             | -0,332     | 7,5x10 <sup>-5</sup>            | 91     | 86  |
|           |               |                  |            | 1,0x10 <sup>-4</sup>            | 93     | 90  |
|           |               |                  |            | 2,5x10 <sup>-4</sup>            | 94     | 90  |
|           |               |                  |            | 5,0x10 <sup>-4</sup>            | 95     | 90  |
| <b>1c</b> | 9,00          | 2,00             | -0,297     | 7,5x10 <sup>-5</sup>            | 77     | 67  |
|           |               |                  |            | 1,0x10 <sup>-4</sup>            | 78     | 68  |
|           |               |                  |            | 2,5x10 <sup>-4</sup>            | 75     | 61  |
|           |               |                  |            | 5,0x10 <sup>-4</sup>            | 75     | 61  |

As feniltiouréias (R=OCH<sub>3</sub>, H) que apresentaram menores valores teóricos de  $E_i$ , maiores CM e  $\mu$ , mostraram melhor eficiência de inibição da corrosão pelas técnicas de EIE e RPL. Na tiouréia com substituinte retirador de elétrons (R=NO<sub>2</sub>) foram observados menores  $\mu$ , CM e maior  $E_i$ , quando comparado com as anteriores e, assim, apresentando menor eficiência na inibição da corrosão. Os resultados deste trabalho quando comparados com os obtidos para as correspondentes benziltiouréias<sup>3</sup> indicaram a importância do aumento da cadeia alquílica que favoreceu a interação das feniltiouréias com a superfície do metal.

## Conclusões

As tiouréias foram obtidas em bons rendimentos e, mostraram boa eficiência na inibição da corrosão em meio ácido. Os resultados teóricos correlacionaram com os experimentais, indicando sua importância como ferramenta para o estudo do potencial anticorrosivo de inibidores orgânicos.

## Agradecimentos

UFRRJ, CNPq, CAPES e PETROBRAS.

<sup>1</sup>Khan, K.M. *et al. Eur. J. Med. Chem.* **2014**, 74, 314. <sup>2</sup>Goulart, C.M. *et al. Corros. Sci.* **2013**, 67, 281. <sup>3</sup>Valbon, A. *et al.* 37ª RA da SBQ, **2014**.