

# Síntese e avaliação teórica da atividade anti-corrosão de novas tiossemicarbazonas aril-substituídas

Camilla Moretto dos Reis\* (PG), Aurea Echevarria (PQ)

quimicamilla@gmail.com

Departamento de Química, ICE, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ

Palavras Chave: Tiossemicarbazonas, microondas, atividade anti-corrosão, modelagem molecular.

## Introdução

As tiossemicarbazonas são compostos de considerável interesse científico, devido as suas importantes propriedades químicas e biológicas, tais como antitumoral, antibacteriana, antiviral, antiprotozoária, citotóxica, dentre outras<sup>1</sup>.

Estes compostos são conhecidos por formarem complexos organometálicos, comportando-se como agentes quelantes e atuando como inibidores de corrosão<sup>2</sup>.

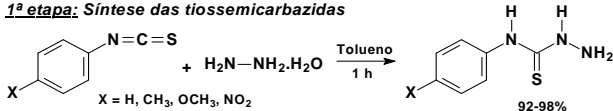
Assim, esta comunicação tem como objetivo a síntese e a avaliação teórica da atividade anti-corrosão de 12 tiossemicarbazonas aril-substituídas.

## Resultados e Discussão

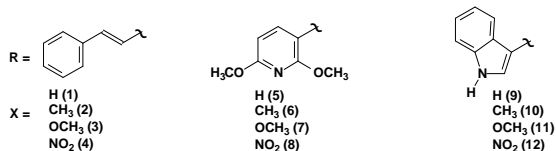
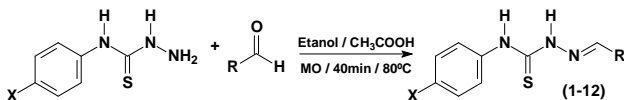
As tiossemicarbazonas foram sintetizadas em duas etapas que estão apresentadas no esquema abaixo. Os compostos, na última etapa, foram obtidos, sob irradiação de microondas, com alto grau de pureza e rendimentos satisfatórios, conforme indicado na tabela. As tiossemicarbazonas **5-12** estão sendo relatadas pela primeira vez nesta comunicação.

### Esquema

#### 1ª etapa: Síntese das tiossemicarbazidas



#### 2ª etapa: Síntese das tiossemicarbazonas



A avaliação da eficiência como inibidores de corrosão das tiossemicarbazonas sintetizadas foi feita a partir da Modelagem Molecular utilizando o hamiltoniano AM1 do programa SPARTAN-PRO. Foram calculadas as energias do HOMO e do LUMO e estas usadas para determinar o  $\Delta E_{(LUMO - HOMO)}$  de cada tiossemicarbazona, além do momento de dipolo ( $\mu$ ). Quanto menor o valor de

$\Delta E_{(LUMO - HOMO)}$ <sup>3</sup> e maior o momento de dipolo<sup>4</sup> mais favorável é a atuação de um composto como inibidor de corrosão. Os resultados teóricos obtidos foram comparados aos resultados, também teóricos, de um potente inibidor de corrosão já utilizado na indústria, a di-orto-toliltiouréia (**14**).

**Tabela.** Pontos de fusão, rendimentos e avaliação teórica da atividade anti-corrosão.

Compostos	PF (°C)	Rend (%)	$\Delta E$ (eV)	$\mu$ (Debie)
1	172-174	86	7,886	3,75
2	193-194	79	7,861	4,16
3	173-175	71	7,804	4,39
4	198-200	88	7,697	3,21
5	211-212	82	7,874	4,63
6	187-188	70	7,860	5,01
7	189-190	78	7,839	5,22
8	209-211	82	7,624	3,21
9	207-209	62	7,906	2,18
10	189-191	93	7,899	2,48
11	202-203	76	7,897	2,95
12	210-212	82	7,453	5,19
14	***	***	7,880	4,60

Todos os compostos estudados neste trabalho apresentaram valores de  $\Delta E_{(LUMO - HOMO)}$  e momento de dipolo próximos aos da di-orto-toliltiouréia indicando que esses derivados apresentam uma promissora atividade anti-corrosão. O derivado **12** apresentou menor  $\Delta E_{(LUMO - HOMO)}$  e maior momento de dipolo, sugerindo que a atuação deste composto como inibidor da corrosão seria mais eficiente que as demais tiossemicarbazonas testadas.

## Conclusões

A metodologia sintética utilizando a irradiação de microondas para a obtenção das tiossemicarbazonas aril-substituídas se mostrou eficiente com produtos apresentando alto grau de pureza e bons rendimentos. A avaliação da atividade anti-corrosão por modelagem molecular indicou que os compostos estudados podem atuar como eficientes inibidores de corrosão.

## Agradecimentos

UFRRJ, CNPq, PETROBRAS

<sup>1</sup>Beraldo, H.; *Quim. Nova*, **2004**, 27, 3, 461. <sup>2</sup>Casas, J. S.; Tasende, M.S. G.; Sordo, J.; *Coord. Chem. Rev.* **2000**, 209, 197. <sup>3</sup>Ashassi-Sorkhabi, H.; Shaabani, B.; Seifzadeh, D.; *Eletrochimica Acta* **2005**, 50, 3446. <sup>4</sup>Arab, S. T.; *Materials Research Bulletin*, **2008**, 43, 510.