

Síntese de (Tio)semicarbazonas e Avaliação da Atividade Anti-corrosão

Carla Marins Goulart (PG)^{*a}, Carlos A. Martinez Huitle (PQ)^b, Andressa Esteves-Souza (PQ)^a, Aurea Echevarria (PQ)^a cgoulart@ufrj.br

^aDepartamento de Química, ICE, UFRJ, Seropédica, RJ; ^bDepartamento de Química, CCET, UFRN, Natal, RN

Palavras Chave: Semicarbazonas, Tiosemicarbazonas, Polarização Potenciodinâmica, Modelagem Molecular

Introdução

Inibidores orgânicos de corrosão são substâncias que, quando adicionadas ao meio corrosivo, evitam ou diminuem o desenvolvimento das reações de corrosão. Tais inibidores atuam via adsorção na superfície metálica, formando uma barreira ao ambiente corrosivo. Neste grupo estão incluídas substâncias que apresentam grupos fortemente polares, contendo átomos de oxigênio, nitrogênio e/ou enxofre na estrutura¹.

Neste trabalho, foi avaliada a eficiência de quatro semicarbazonas e quatro tiosemicarbazonas como inibidores de corrosão por Modelagem Molecular e por Polarização Potenciodinâmica.

Resultados e Discussão

As tiosemicarbazonas (compostos **1a-d**) foram preparadas a partir dos aldeídos correspondentes e a tiosemicarbazida em etanol e gotas de H₂SO₄. As semicarbazonas (compostos **2a-d**) também foram preparadas a partir de aldeídos, entretanto, na presença de semicarbazida, água e acetato de sódio. A Figura 1 ilustra a reação de síntese destes compostos.

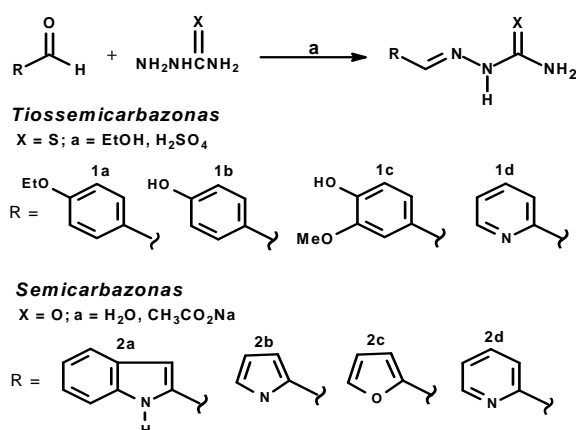


Figura 1. Preparação das (tio)semicarbazonas.

A Modelagem Molecular foi realizada utilizando o hamiltoniano AM1 do programa SPARTAN-PRO. Foram calculadas as energias do HOMO, do LUMO e o momento de dipolo (μ)². Os ensaios de Polarização Potenciodinâmica foram feitos à temperatura ambiente em célula de três eletrodos, sendo o eletrodo de referência de Ag/AgCl, o auxiliar

de Pt e o de trabalho em aço carbono AISI 1020. As amostras foram avaliadas nas concentrações 1×10^{-2} , 5×10^{-3} , 1×10^{-3} , 5×10^{-4} e 1×10^{-4} mol.L⁻¹ em solução 0,5% de HCl (pH 2). Foram realizadas varreduras de potencial entre -900 e 500 mV, a 25 mV/s, calculando-se os valores percentuais de eficiência de inibição da corrosão (*EI*). A Tabela 1 mostra os resultados obtidos por Modelagem e por Polarização Potenciodinâmica na concentração 1×10^{-2} mol.L⁻¹.

Tabela 1. Resultados das avaliações teórica e experimental da atividade anti-corrosão.

Compostos	$\Delta E_{\text{LUMO-HOMO}}$ (eV)	μ^a (Debie)	<i>EI</i> ^b (%)
1a	7,991	6,57	86,3
1b	7,970	6,70	96,0
1c	7,947	7,72	96,4
1d	7,900	3,73	91,2
2a	7,988	5,70	65,7
2b	8,491	5,89	83,8
2c	8,587	3,81	65,6
2d	8,800	2,49	91,0

^a μ : momento de dipolo; ^b*EI*: eficiência de inibição da corrosão.

Os resultados obtidos nas duas técnicas indicaram as tiosemicarbazonas como inibidores mais potentes que as semicarbazonas, provavelmente devido à maior polarizabilidade do enxofre, que facilita a adsorção na superfície metálica³. Analisando os compostos **1a**, **1b** e **1c** é possível notar que a presença de substituintes doadores de elétrons no anel aromático promove um aumento na eficiência de inibição, visto que estes aumentam a densidade eletrônica no centro de quelação (grupo C=N), facilitando a adsorção.

Conclusões

Todos os compostos atuaram como eficientes inibidores da corrosão de aço carbono AISI 1020. As duas metodologias utilizadas mostraram-se adequadas e coerentes para avaliação das tio e semicarbazonas como inibidores de corrosão.

Agradecimentos

UFRJ, CAPES, PETROBRAS.

¹ Souza, F. S.; Spinelli, A. *Corrosion Science* **2009**, *51*, 642. ² Ashassi-Sorkhabi, H.; Shaabani, B.; Seifzadeh, D. *Eletrochimica Acta* **2005**, *50*, 3446. ³ Yan, Y.; Li, W.; Cai, L.; Hou, B. *Eletrochimica Acta* **2008**, *53*, 5953.