

Síntese de Cloridratos Meso-iônicos, Avaliação da Atividade Antioxidante e do Potencial de Inibição de Corrosão

Danilo Sousa Pereira* (IC), Camilla Moretto dos Reis (PG) e Aurea Echevarria (PQ)

sousadanilo90@hotmail.com

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

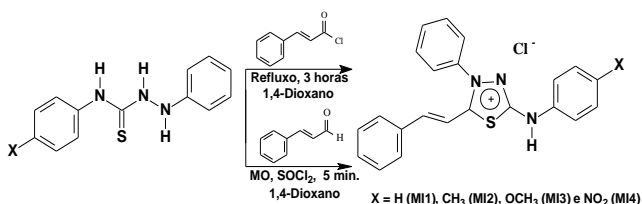
Palavras Chave: Meso-iônicos, micro-ondas, DPPH, inibidores de corrosão.

Introdução

A síntese de compostos meso-iônicos tem mostrado grande interesse, especialmente pela sua diversificada atividade biológica¹. As substâncias antioxidantes atuam na inibição dos radicais livres resultantes do metabolismo celular, contribuindo para a prevenção de doenças associadas ao envelhecimento². Essa propriedade pode estar envolvida, também, com a inibição da oxidação de materiais metálicos. Logo, esta comunicação tem como objetivo a síntese, a avaliação da atividade antioxidante e a avaliação teórica do potencial anticorrosivo dos cloridratos meso-iônicos da classe 1,3,5-tiadiazólio-2-aminida.

Resultados e Discussão

O presente trabalho visa à continuidade do estudo apresentado na 33^a RASBQ³. Os cloridratos meso-iônicos (MI) foram preparados por duas metodologias diferentes. Uma das metodologias consiste no refluxo do cloreto de ácido e da tiossemicarbazida devidamente substituída usando 1,4-dioxano como solvente orgânico. Na outra metodologia irradiou-se, em forno de micro-ondas científico, o cinamaldeído e a tiossemicarbazida 4-aryl-substituída na presença do cloreto de tionila, como ácido de Lewis, e 1,4-dioxano (Esquema). Os compostos foram obtidos com rendimentos satisfatórios e alto grau de pureza (Tabela).



Esquema: Preparação dos sais meso-iônicos (MI).

Os ensaios para avaliação da atividade antioxidante foram feitos pelo método do DPPH⁴ medindo a densidade óptica em 490nm.

A avaliação da eficiência como inibidores de corrosão foi realizada a partir do programa SPARTAN-PRO, com o hamiltoniano AM1 onde, calculou-se o $\Delta E_{(LUMO-HOMO)}$ de cada composto e da *di-orto-toliltiouréia* (5), inibidor de corrosão já utilizado na indústria. A tabela a seguir mostra os resultados obtidos para os compostos estudados.

Tabela: Pontos de fusão, rendimentos, CE₅₀ para a atividade antioxidante e avaliação teórica do potencial anticorrosivo.

MI	PF (°C)	Rendimento (%)		CE ₅₀ (µg.mL ⁻¹)	LUMO (eV)	HOMO (eV)	ΔE (eV)
		Trad.	MO				
1	264-265	51	100	240,9	-5,172	-11,714	6,542
2	164-166	93	100	243,39	-5,139	-11,515	6,376
3	266-270	73	100	56,75	-5,112	-11,241	6,129
4	290-293	54	100	89,5	-5,470	-12,062	6,592
5	***	***	***	***	-0,317	-8,375	8,058

Os sais meso-iônicos apresentaram valores de CE₅₀, para a atividade antioxidante, variando de 56,75 a 243,39 µg.mL⁻¹, sem distinção quanto ao efeito eletrônico dos substituintes do anel aromático. A maior atividade foi vista para o derivado metoxilado e a menor para o metil substituído.

Os resultados do ensaio teórico de inibição da corrosão indicaram baixa energia do HOMO, apontando para uma maior dificuldade na doação de elétrons a orbitais "d" desocupados do metal em que estariam adsorvidos e, no entanto, baixas energias do LUMO, o que facilitaria a recepção de elétrons provenientes do metal.

Logo, os sais meso-iônicos apresentaram menor diferença de energia entre o HOMO e o LUMO se comparados a *di-orto-toliltiouréia*, indicando uma promissora atuação destes como inibidores de corrosão, já que quanto menor o $\Delta E_{(LUMO-HOMO)}$, maior é o potencial de inibição⁵.

Conclusões

A síntese dos sais meso-iônicos mostrou-se mais eficiente via irradiação de micro-ondas, que é uma das metodologias consideradas promissoras dentro dos princípios da Química Verde.

Os ensaios de atividade antioxidante apresentaram maior atividade para o derivado metoxilado. Os sais meso-iônicos seriam possíveis inibidores de corrosão por apresentarem menor diferença de energia entre os orbitais moleculares de valência e melhores valores que o agente inibidor de controle.

Agradecimentos

UFRRJ e CNPq.

¹ Kier, L.B. e Roche, E.B; *J. Pharm. Sci.* **1967**, 56 (2), 149. ² Fang, J. e Li, J. *J. Mol. Struct. (Teochem)*, **2002**, 593, 179. ³ Pereira, D.S., et al. *33^a RASBQ*, **2010**, 1. ORG-002. ⁴ Mensor, L.L., et al. *Phytotherapy Res.* **2001**, 15, 127. ⁵ Ashassi-Sorkhabi, H.; Shaabani, B.; Seifzadeh, D. *Eletrochimica Acta* **2005**, 50, 3446.