

# Preparação de Tiouréias *N*-fenetil e *N*-benzil Substituídas Utilizando Banho de Ultrassom

Roberta Franca Guimarães\* (IC), Andressa Esteves-Souza (PQ), Aurea Echevarria (PQ)

robertafranca@ufrj.br

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

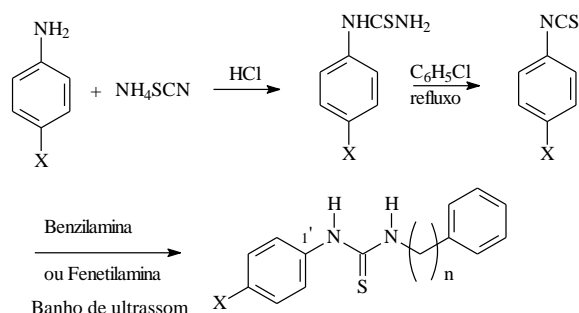
Palavras Chave: Tiouréias, ultrassom, correlações de Hammett.

## Introdução

As tiouréias são substâncias que apresentam ampla aplicação na medicina, na indústria e outras áreas da química. Atualmente, se destaca a promissora aplicação destes compostos na capacidade de inibição da corrosão em chapas metálicas de diferentes tipos de aço, cobre e zinco, variando este efeito de acordo com os grupos substituintes, especialmente nos átomos de nitrogênio. Essa característica está relacionada à propriedade química das tiouréias atuarem como ligantes na complexação com metais impedindo sua oxidação.<sup>1</sup> Nosso grupo de pesquisa tem desenvolvido estudos visando metodologias modernas e a síntese de novas tiouréias visando essas aplicações. Sendo assim, este trabalho tem como objetivos a síntese e caracterização de duas novas séries: *N*-benzil-*N'*-(*p*-X-fenil) e *N*-fenetil-*N'*-(*p*-X-fenil)-tiouréias.

## Resultados e Discussão

A partir do estudo realizado anteriormente, e apresentado na 33ª RA da SBQ,<sup>2</sup> a metodologia utilizando banho de ultrassom foi escolhida para a etapa final da obtenção das tiouréias. Assim, as tiouréias foram obtidas em 3 etapas de síntese, conforme esquema a seguir.



$n = 1$  e  $2$ ;  $X = \text{H}, \text{CH}_3, \text{OCH}_3, \text{NO}_2, \text{Cl}, \text{CN}$  e  $\text{F}$

A metodologia utilizando banho de ultrassom como fonte de energia (Ultracleaner 1400A com aquecimento, modelo Unique) foi eficiente com tempo de reação de 20 minutos, usando-se tolueno anidro como solvente e, possibilitou a obtenção dos produtos com maior facilidade de isolamento, pois os mesmos precipitaram ao fim da reação com rendimentos satisfatórios (Tabela 1).

**Tabela 1:** Rendimentos e pontos de fusão para as tiouréias obtidas com o banho de ultrassom.

Tiouréia	Benzil		Fenetil	
	%	P.F. (°C)	%	P.F. (°C)
H	96	102-104	95	155-156
CH <sub>3</sub>	71	111-113	90	120-123
CH <sub>3</sub> O	86	142-144	89	108-109
NO <sub>2</sub>	93	113-115	90	113-116
CN	64	177-180	40	173-175
Cl	63	129-132	45	122-124
F	52	145-148	52	177-179

A caracterização das tiouréias foi realizada utilizando-se a espectroscopia de IV, RMN <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C. Os espectros de RMN <sup>1</sup>H mostraram sinais na faixa de  $\delta$ 8,17-6,75, referentes aos deslocamentos químicos de hidrogênios aromáticos e sinais entre  $\delta$ 8,26-7,61, referentes aos hidrogênios ligados ao nitrogênio. Nos espectros de RMN <sup>13</sup>C, observou-se sinais do carbono ligado ao enxofre (C=S) em torno de  $\delta$ 179,5-183,0 e sinais relativos aos carbonos alifáticos em torno de  $\delta$ 46,0 e  $\delta$ 34,0 (fenetilamina), e  $\delta$ 49,00 para a benzilamina.

Foi realizado o estudo da correlação do efeito eletrônico dos substituintes com os deslocamentos químicos de <sup>13</sup>C de C=S e do C-1'. Observou-se correlação múltipla com os valores de  $\sigma_R$  e  $\sigma_I$ ,<sup>3</sup> indicando maior contribuição do efeito de ressonância apenas para o C-1' ( $R = 0,9447$ ).

## Conclusões

A metodologia sintética para a obtenção das tiouréias, utilizando banho de ultrassom foi eficiente, e através da análise espectroscópica foi possível caracterizar os produtos obtidos, e observar os efeitos eletrônicos em regiões coerentes com a natureza dos substituintes.

## Agradecimentos

UFRRJ, CNPq.

<sup>1</sup>Bolzan, A.E.; Haseeb, P.L.; Schilardi, R.C.V.; Piatti, R.C.; Salvezza, Arvia, A.J.; *J. Electroanal. Chem.* **2001**, *500*, 533. <sup>2</sup>Guimarães, R. F. *Et al*, 33ª RA SBQ – QO-001, **2010**. <sup>3</sup>Isaacs, N.S.; *Physical Organic Chemistry*, Longman Scientific & Technical, Belfast, 1987, pg.134.