

## Síntese e Avaliação da Atividade Anti-corrosiva de *N*-(*p*-X-fenil)-*N'*-benzil-tiouréias em aço carbono AISI 1020

Arthur Valbon\* (PG), Roberta Franca Guimarães (PG)<sup>†</sup>, Andressa Esteves-Souza (PQ), Aurea Echevarria (PQ)

arthur-valbon@hotmail.com

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

Palavras Chave: Tiouréia, Corrosão, Modelagem Molecular, Impedância Eletroquímica.

### Introdução

Os inibidores de corrosão são largamente utilizados para proteger materiais metálicos, retardando sua deterioração e evitando, assim, enormes prejuízos<sup>1</sup>. Os inibidores orgânicos que contêm átomos de N, O ou S são considerados eficientes, sendo os mais eficazes aqueles que apresentam N e S simultaneamente<sup>2</sup>. A tiouréia e seus derivados são compostos com N e S em suas estruturas, e há mais de 40 anos estudados como inibidores de corrosão<sup>1,2</sup>. Esses grupos polares são comumente chamados de centro de quelação, e fazem com que o composto seja adsorvido na superfície do metal através de ligação covalente coordenada<sup>3</sup>. Neste trabalho avaliou-se teórica e experimentalmente o potencial anticorrosivo de três tiouréias.

### Resultados e Discussão

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

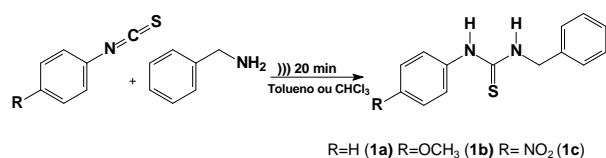


Figura 1. Síntese das tiouréias **1a-c**.

Tabela 1. Rendimentos e PF das tiouréias obtidas.

Compostos	Rendimento (%)	PF (°C)
<b>1a</b>	95	155-156
<b>1b</b>	89	108-109
<b>1c</b>	90	113-116

A avaliação teórica das tiouréias foi feita utilizando programa SPARTAN-PRO, com o método semi-empírico PM3, onde foi calculado a Energia de Ionização ( $E_i$ ), Momento Dipolo ( $\mu$ ) e a Carga de Mulliken (CM) no átomo de enxofre. A avaliação do efeito inibidor da corrosão foi feita pela técnica de espectroscopia de Impedância Eletroquímica (EIE) e Polarização Potenciodinâmica (PP). O eletrodo de trabalho foi aço carbono AISI 1020, Ag/AgCl como

referência e eletrodo de platina como auxiliar. Os ensaios foram feitos em meio ácido (HCl 1 mol.L<sup>-1</sup>). As medidas de EIE foram realizadas em um intervalo de frequência de 10 kHz - 100 mHz e amplitude de 10 mV. No ensaio de PP foram realizadas varreduras entre  $\pm 200$  mV em torno do potencial de circuito aberto a 1mV/s. Na Tabela 2 se encontram os resultados da eficiência de inibição (EI) e das avaliações teóricas.

Tabela 2: Resultados das análises teóricas e experimentais.

Comp.	$E_i$ (eV)	$\mu$ (debie)	CM (eV)	Conc. (mol.L <sup>-1</sup> )	EI (%)	
					EIE	PP
<b>1a</b>	8,58	6,40	-0,343	7,5x10 <sup>-5</sup>	83	72
				1,0x10 <sup>-4</sup>	85	74
				2,5x10 <sup>-4</sup>	88	78
<b>1b</b>	8,54	6,62	-0,347	7,5x10 <sup>-5</sup>	83	76
				1,0x10 <sup>-4</sup>	87	85
				2,5x10 <sup>-4</sup>	87	86
<b>1c</b>	9,06	2,73	-0,289	7,5x10 <sup>-5</sup>	60	61
				1,0x10 <sup>-4</sup>	54	50
				2,5x10 <sup>-4</sup>	65	60

As tiouréias (R=OCH<sub>3</sub>, H) que apresentaram menores valores teóricos de  $E_i$ , maiores  $\mu$  e CM, foram as que mostraram melhor eficiência de inibição de acordo com as técnicas eletroquímicas de EIE e PP. Na tiouréia com substituinte retirador de elétrons (R=NO<sub>2</sub>) foram observados menores CM e  $\mu$ , e maior  $E_i$ , logo, quanto aos ensaios eletroquímicos foi observado uma menor eficiência de inibição quando comparada com as anteriores.

### Conclusões

A metodologia de síntese utilizada mostrou-se eficiente e os resultados teóricos e experimentais foram bem correlacionados e suficientes para mostrar o potencial anti-corrosivo das tiouréias estudadas.

### Agradecimentos

UFRRJ, CNPq, CAPES e PETROBRAS.

<sup>†</sup> *in memoriam*

<sup>1</sup>Li, X. *et al. Corros. Sci.* **2012**, 55, 280; <sup>2</sup>Torres, V.V. *et al. Corros. Sci.* **2012**, 79, 108; <sup>3</sup>Goulart, C.M. *et al. Corros. Sci.* **2013**, 67, 281.