



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2024년01월15일
(11) 등록번호 10-2625471
(24) 등록일자 2024년01월11일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09D 5/08 (2006.01) C09D 163/00 (2006.01)
C23C 22/52 (2006.01) C23F 11/08 (2006.01)
C23F 11/14 (2006.01) C23F 11/16 (2006.01)
C23F 11/18 (2006.01)
- (52) CPC특허분류
C09D 5/086 (2013.01)
C09D 163/00 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2017-7031239
- (22) 출원일자(국제) 2016년03월31일
심사청구일자 2021년01월05일
- (85) 번역문제출일자 2017년10월27일
- (65) 공개번호 10-2018-0026662
- (43) 공개일자 2018년03월13일
- (86) 국제출원번호 PCT/AU2016/050245
- (87) 국제공개번호 WO 2016/154680
국제공개일자 2016년10월06일
- (30) 우선권주장
62/141,084 2015년03월31일 미국(US)
- (56) 선행기술조사문헌
W02014151570 A1*
(뒷면에 계속)

- (73) 특허권자
커먼웰스 사이언티픽 앤드 인더스트리얼 리서치
오가니제이션
오스트레일리아, 에이씨티 2601, 블랙 마운틴, 클
러니즈 로스 스트리트, 빌딩 101
더 보잉 컴파니
미국, 일리노이스 60606, 시카고, 100 노스 리버
사이드 플라자
- (72) 발명자
마텔, 제임스 이반
오스트레일리아, 오스트레일리안 캐피탈 테리토리
2601, 액턴, 씨/- 클러니즈 로스 스트리트
콜, 이반 스투어트
오스트레일리아, 오스트레일리안 캐피탈 테리토리
2601, 액턴, 씨/- 클러니즈 로스 스트리트
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인
강철중, 김윤배

전체 청구항 수 : 총 19 항

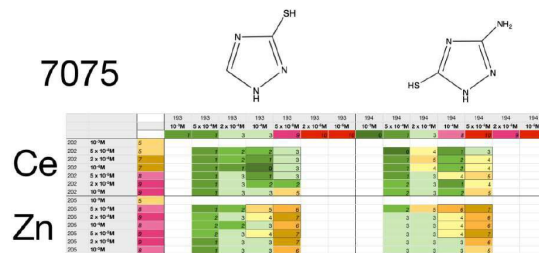
심사관 : 허순옥

(54) 발명의 명칭 부식 억제용 조성물

(57) 요약

본 발명은 다양한 기재, 예를 들어 금속 기재에서 부식을 억제하기 위한 제제, 조성물, 및 방법에 관한 것이다. 부식 억제용 조성물은 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물 및 희토류 금속, 알칼리 토금속 및 전이 금속 으로부터 선택되는 적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염을 포함한다.

대표도 - 도1a



(52) CPC특허분류

C09D 5/084 (2013.01)
C23C 22/52 (2013.01)
C23F 11/08 (2013.01)
C23F 11/149 (2013.01)
C23F 11/161 (2013.01)
C23F 11/165 (2013.01)
C23F 11/18 (2013.01)
C23F 11/185 (2013.01)

(72) 발명자

화이트, 폴 앤드류

오스트레일리아, 오스트레일리안 캐피탈 테리토리
2601, 액턴, 씨/- 클러니즈 로스 스트리트

휴스, 안토니 이워드

오스트레일리아, 오스트레일리안 캐피탈 테리토리
2601, 액턴, 씨/- 클러니즈 로스 스트리트

마클리, 트레이시 앤

오스트레일리아, 오스트레일리안 캐피탈 테리토리
2601, 액턴, 씨/- 클러니즈 로스 스트리트

하비, 티모시 그레이엄

오스트레일리아, 오스트레일리안 캐피탈 테리토리
2601, 액턴, 씨/- 클러니즈 로스 스트리트

오스본, 조셉

미국, 워싱턴 98108, 시애틀, 씨/- 7755 이스트 마
그널 웨이 사우쓰

샤피, 에릭

미국, 워싱턴 98108, 시애틀, 씨/- 7755 이스트 마
그널 웨이 사우쓰

(56) 선행기술조사문헌

JP2010521582 A
JP소화54123145 A
W02005003408 A1
W02008140648 A1

*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

명세서

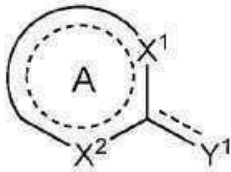
청구범위

청구항 1

부식으로부터 기재를 보호하는 방법으로서, 상기 방법은 기재의 표면에 부식 억제 조성물을 적용하는 단계를 포함하고, 여기서 부식 억제 조성물은:

적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염, 여기서 금속은 Zn, La, Pr, Ce, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Co, Y, Sc, 및 Zr로 이루어진 군에서 선택되며; 그리고

하기 화학식 1의 유기 헤테로사이클릭 화합물로부터 선택된 적어도 하나의 부식 억제제를 포함하며,



화학식 1

여기서, A는 하나 이상의 아릴 또는 헤테로아릴 고리와 융합된 5- 또는 6-원자 아릴, 헤테로아릴 또는 헤테로사이클릭 고리이며, 선택적으로 하나 이상의 치환기로 치환되며, 여기서 점선은 하나 이상의 선택적인 이중 결합을 나타내며;

Y¹은 S 또는 SH이며, 여기서 점선은 Y¹이 S인 경우 이중 결합을 나타내며 또는 Y¹이 SH인 경우에는 존재하지 않으며;

X¹은 N 및 NH로부터 선택되며;

X²는 N, NR⁵, CR⁶ 및 CR⁷R⁸로부터 선택되며;

R⁵는 수소, 아미노, C₁-C₁₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₁₀ 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있으며; 그리고

R⁶, R⁷ 및 R⁸는 각각 독립적으로, 수소, 할로(halo), 티올, 아미노, C₁-C₁₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₁₀ 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있으며;

여기서, 금속 염 또는 혼합된 금속 염의 각각과 부식 억제제는 조성물에서 개별적인 성분으로서 제공이 되며 미리형성된 금속-유기 복합체가 아니며; 그리고

부식 억제 조성물에서 금속 염 : 부식 억제제의 비율은 1 초과 : 1인 것인, 부식으로부터 기재를 보호하는 방법.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 고리 A는 선택적으로 치환된 바이사이클릭 헤테로아릴 또는 헤테로사이클릭 고리이며, 여기서 바이사이클릭 고리는 5- 및 6-원자 고리로부터 독립적으로 선택된 두 개의 고리를 갖는 것인, 부식으로부터 기재를 보호하는 방법.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 Y^1 은 SH인 것인, 부식으로부터 기재를 보호하는 방법.

청구항 4

삭제

청구항 5

제1항에 있어서, X^2 는 N 및 NH로부터 선택되는 것인, 부식으로부터 기재를 보호하는 방법.

청구항 6

제1항에 있어서, 상기 금속은 적어도 하나의 La, Pr, Ce, Co, 및 Y로부터 선택되는 것인, 부식으로부터 기재를 보호하는 방법.

청구항 7

제1항에 있어서, 상기 금속은 적어도 하나의 Zn, Pr 및 Ce로부터 선택되는 것인, 부식으로부터 기재를 보호하는 방법.

청구항 8

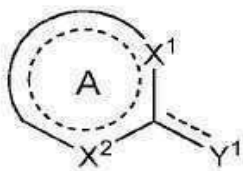
제1항에 있어서, 상기 기재는 구리-함유 금속 기재인 것인, 부식으로부터 기재를 보호하는 방법.

청구항 9

부식으로부터 기재를 보호하기 위한 조성물로서, 상기 조성물은:

적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염, 여기서 금속은 Zn, La, Pr, Ce, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Co, Y, Sc, 및 Zr로 이루어진 군에서 선택되며; 그리고

하기 화학식 1의 유기 헤테로사이클릭 화합물로부터 선택된 적어도 하나의 부식 억제제를 포함하며,



화학식 1

여기서, A는 하나 이상의 아릴 또는 헤테로아릴 고리와 융합된 5- 또는 6-원자 아릴, 헤테로아릴 또는 헤테로사이클릭 고리이며, 선택적으로 하나 이상의 치환기로 치환되며, 여기서 점선은 하나 이상의 선택적인 이중 결합을 나타내며;

Y^1 은 S 또는 SH이며, 여기서 점선은 Y^1 이 S인 경우 이중 결합을 나타내며 또는 Y^1 이 SH인 경우에는 존재하지 않으며;

X^1 은 N 및 NH로부터 선택되며;

X^2 는 N, NR⁵, CR⁶ 및 CR⁷R⁸로부터 선택되며;

R⁵는 수소, 아미노, C₁-C₁₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₁₀ 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있으며; 그리고

R⁶, R⁷ 및 R⁸는 각각 독립적으로, 수소, 할로, 티올, 아미노, C₁-C₁₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₁₀ 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있으며;

여기서, 금속 염 또는 혼합된 금속 염의 각각과 부식 억제제는 조성물에서 개별적인 성분으로서 제공이 되며 미리형성된 금속-유기 복합체가 아니며; 그리고

부식 억제 조성물에서 금속 염 : 부식 억제제의 비율은 1 초과 : 1인 것인, 부식으로부터 기재를 보호하기 위한 조성물.

청구항 10

제9항에 있어서, 상기 부식 억제제의 농도 범위는 10⁻³M 내지 5x10⁻⁶M인 것인, 부식으로부터 기재를 보호하기 위한 조성물.

청구항 11

제9항에 있어서, 상기 금속의 농도 범위는 10⁻³M 내지 5x10⁻⁶M인 것인, 부식으로부터 기재를 보호하기 위한 조성물.

청구항 12

제9항에 있어서, 상기 조성물은 필름-형성 유기 폴리머를 포함하는 코팅 조성물인 것인, 부식으로부터 기재를 보호하기 위한 조성물.

청구항 13

제12항에 있어서, 상기 필름-형성 유기 폴리머는 하나 이상의 에폭시계 수지를 포함하는 것인, 부식으로부터 기재를 보호하기 위한 조성물.

청구항 14

제9항에 있어서, 상기 조성물은 파우더 코팅 조성물인 것인, 부식으로부터 기재를 보호하기 위한 조성물.

청구항 15

제9항에 있어서, 하나 이상의 안료, 필러 및 연장제를 포함하는 하나 이상의 첨가제를 더 포함하는 것인, 부식으로부터 기재를 보호하기 위한 조성물.

청구항 16

필름-형성 유기 폴리머 및 제9항에 따른 부식 억제 조성물을 혼합함으로써 조성물을 형성하는 단계를 포함하는,

기재에 적용하기 위한 부식 억제 코팅 조성물을 제조하는 방법.

청구항 17

제9항에 따른 부식 억제 조성물로 코팅된 기재를 포함하는 코팅된 기재.

청구항 18

제17항에 있어서, 상기 부식 억제 조성물은 기재의 표면에 직접 코팅으로 적용되는 것인, 코팅된 기재.

청구항 19

제17항 또는 제18항에 있어서, 상기 기재는 구리-함유 금속 기재인 것인, 코팅된 기재.

청구항 20

- (a) 제9항 내지 제11항 중 어느 한 항에 따른 부식으로부터 기재를 보호하기 위한 부식 억제 조성물; 및
- (b) 코팅 조성물을 포함하는 키트.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 다양한 기재, 예를 들어 금속 기재에서 부식 억제용 제제, 조성물 및 방법에 관한 것이다. 본 발명은 또한 적어도 하나의 유기 헥테로사이클릭 화합물 및 희토류, 알칼리 토류 및 전이 금속으로부터 선택된 적어도 하나의 금속염 또는 혼합된 금속염을 포함하는 부식 억제용 조성물에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 대기 부식에 대한 금속 기재와 같은 기재의 보호는 어려운 도전이며 중요한 경제적 중요성을 갖는다. 부식으로부터 보호해야 하는 금속 기재의 범위에는 항공우주산업에서 사용되는 알루미늄 합금, 철강 금속, 아연 금속 및 보호 코팅에 사용되는 합금이 포함된다. 유기 프라이머에 사용되는 안료 등급 부식 억제제는 물에서 제한적이지만 효과적인 용해도를 갖는 억제제 활성을 갖는 음이온 종을 요구하는 것으로 잘 알려져 있다. 이러한 이유로, 크롬산염계 부식 억제제 종은 예를 들어, 전환 코팅 및 고성능 유기 프라이머에서 제공되는 대기 부식으로부터 보호하기 위해 알루미늄에 적용된 부식 제어 기술 모두에서 선호되어 왔다. 6가 크롬산염 이온은 거의 10년 동안 많은 금속 및 합금 시스템에서 우수한 부식 억제제로 입증되었다. 그러나, 크롬산염 이온의 독성 및 발암성은 얼마동안 이해되어 왔으며 환경적으로 허용되는 대체물을 찾기 위해 거의 30년 동안 광범위한 연구가 있었다.

[0003] 일반적으로 독성, 효율 및 가격을 고려하는 경우, 크롬산염 대체물에 사용할 수 있는 무기 부식 억제제 종의 수는 폴리브덴산염, 인산염, 붕산염, 규산염 및 시안아미드를 포함하는 몇몇의 음이온 종으로 본질적으로 제한된다는 것이 일반적으로 알려져있다. 결과적으로, 모든 상업용 비-크롬산염 부식 억제제 안료는 폴리브덴산염, 인산염, 붕산염, 규산염 또는 시안아미드, 또는 이들 화합물의 조합이다. 크롬산염과 비교하여, 이들의 부식 방지 메커니즘의 내재적인 한계는 음이온 종을 일반적으로, 알루미늄의 대기 부식에 구체적으로 덜 효과적인 부식 억제제로 만든다. 결과적으로, 무기 화학은 대기 부식 억제제를 생산할 수 없으며, 이는 6가 크롬산염과 비교할 수 있을 만큼 효과적이고 비-독성적인 대안일 수 있다.

[0004] 대조적으로, 대규모의 유기 부식 억제제가 최근에 더욱 알려지고 다양한 부식 제어 기술에 적용되어 왔다. 대부분의 공지된 유기 억제제의 물 및/또는 휘발성에 대한 과도한 용해도는 전환 코팅 기술 및 유기 코팅에 사용될 때 제한이 있다.

[0005] 대안적인 부식 억제제 및 전이 금속과 희토류 금속의 염을 확인함으로써 상당한 진전이 있었으며, 탈산소화 및

산세척용액, 에천트, 양극처리 및 전환 코팅, 프라이머 페인트 및 밀봉제를 포함하는 많은 응용 분야에서 가능한 대안을 제공한다. 예를 들어, 세륨 클로라이드는 80년대 초반 (Hinton 외.) 알루미늄 합금을 위한 우수한 억제제인 것이 밝혀졌다. 신나메이트와 같은 카르복실산의 알칼리 금속염은 또한 연강의 부식을 효과적으로 억제하는 것으로 밝혀졌다.

[0006] 희토류 금속 이온과 효과적인 유기 억제제의 조합은 또한 양극 및 음극 반응을 억제하는 것으로 밝혀졌다(즉, 혼합된 억제제). 예를 들어, Behrouzvaziri 외.(2008) 및 Blin 외.(2007)은 란타넘 하이드록시 신나메이트가 염화물 용액에서 부식을 억제한다는 전기화학적 연구를 보여주었다. 알루미늄 합금의 경우, Ho 외.(2006) 및 Markley 외.(2007)은 세륨 다이페닐 포스페이트와 세륨 다이부틸 포스페이트가 알루미늄 합금의 부식 억제제로서 매우 우수한 것으로 나타났다. 예를 들어, US5298148은 란타넘 아세테이트, 란타넘 부티레이트, 란타넘 옥살레이트, 란타넘 질산염, 란타넘 수산화물, 란타넘 산화물, 및 란타넘 텅스텐산염으로 이루어진 균으로부터 선택된 파우더 코팅 제제의 범위를 기술한다.

[0007] 카보사이클릭 및 헤테로사이클릭 방향족 구조와 같은 방향족 특성을 갖는 유기 화합물은 또한, 알루미늄 및 그 합금의 부식을 효과적인 억제제로 밝혀졌으며, 예를 들어 금속염 또는 금속 복합체 형태로 제공될 수 있다. 예를 들어, W02004/085551은 금속의 부식 방지용 에폭시 프라이머를 포함하는 희토류계 유기 화합물 및/또는 희토류 금속 및 코팅용 유기 화합물의 조합물을 포함하는 부식 억제 코팅에 관한 것이다. 알려진 대안적인 크로메이트계 부식 억제제의 대부분은 부식 억제 활성이 낮거나 다양한 코팅 조성물과의 부적합성을 포함하는 다양한 문제점을 갖는다.

[0008] 따라서, 무크롬산염 부식 억제 조성물인, 예를 들어 금속 합금과 같은 금속 기재에서 기재를 보호하기 위한 대안적인 부식 억제 조성물을 확인할 필요가 있다.

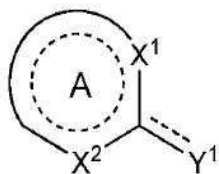
발명의 내용

해결하려는 과제

[0009] 연구는 금속 기재와 같은 다양한 기재를 부식으로부터 보호하기 위해 개선된 코팅 조성물과 무크롬산염 부식 억제제를 확인하기 위해 수행되었다. 이 연구 중에, 티올 또는 티온 기과 같은 적어도 하나의 엑소사이클릭 설퍼(황) 그룹을 포함하는 특정 유기 헤테로사이클릭 화합물은 부식 억제 조성물에서 희토류, 알칼리 토류 및 전이 금속 염과 조합하여 부식 억제제로서 유리하게 사용될 수 있다.

과제의 해결 수단

[0010] 하나의 측면에서, 부식으로부터 기재를 보호하는 방법이 제공되고, 기재의 표면에 부식 억제 조성물을 적용하는 단계를 포함하고, 여기서 부식 억제 조성물은: 적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염, 여기서 금속은 Zn, La, Pr, Ce, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Co, Y, Ca, Sr, Ba, Sc, 및 Zr로 이루어진 군에서 선택되며; 그리고 하기 화학식 1 또는 그 염의 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물을 포함하며:



화학식 1

[0011]

[0012] 여기서, A는 5- 또는 6-원자 아릴, 헤테로아릴 또는 헤테로사이클릭 고리이며, 선택적으로 하나 이상의 치환기로 치환되며, 선택적으로 하나 이상의 아릴 또는 헤테로아릴 고리와 융합되며, 여기서 점선은 하나 이상의 선택적인 이중 결합을 나타내며;

[0013] Y¹은 S 또는 SH이며, 여기서 점선은 Y¹이 S인 경우 이중 결합을 나타내며 또는 Y¹이 SH인 경우에는 존재하지 않으며;

[0014] X¹은 N, NH, O, 및 S로부터 선택되며;

- [0015] X^2 는 N, NR⁵, O, S, CR⁶ 및 CR⁷R⁸로부터 선택되며;
- [0016] R⁵는 수소, 아미노, C₁-C₁₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₁₀ 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있으며; 그리고
- [0017] R⁶, R⁷ 및 R⁸는 각각 독립적으로, 수소, 할로(halo), 티올, 아미노, C₁-C₁₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₁₀ 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있다.
- [0018] 화학식 1의 유기 헤테로사이클릭 화합물에 대해서, R⁶, R⁷ 및 R⁸는 각각 독립적으로, 수소, 할로, 아미노, C₁-C₁₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₁₀ 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있다.
- [0019] 화학식 1의 유기 헤테로사이클릭 화합물에 대해서, Y¹은 SH일 수 있다. X¹은 N, NH 및 S로부터 선택될 수 있다. X¹은 N 및 S로부터 선택될 수 있다. X¹은 N 및 NH로부터 선택될 수 있다. X²는 N, NH, O 및 S로부터 선택될 수 있다. X²는 N, NH 및 S로부터 선택될 수 있다. X²는 N 및 NH로부터 선택될 수 있다. X¹ 및 X²는 각각 독립적으로 N, NH 및 S로부터 선택될 수 있다. X¹ 및 X²는 각각 독립적으로 N 및 NH로부터 선택될 수 있다. X¹은 N 및 NH로부터 선택될 수 있고, X²는 CR⁶ 및 CR⁷R⁸에서 선택될 수 있다.
- [0020] 화학식 1의 유기 헤테로사이클릭 화합물에 대해서, Y¹은 SH일 수 있고, X¹ 및 X²는 각각 독립적으로 N, NH 및 S로부터 선택될 수 있다. X¹은 N 및 S로부터 추가로 선택될 수 있다. X¹은 N 및 NH로부터 추가로 선택될 수 있다. X²은 CR⁶ 및 CR⁷R⁸로부터 추가로 선택될 수 있다. X²는 N, NH 및 S로부터 추가로 선택될 수 있다. X²는 N 및 NH로부터 추가로 선택될 수 있다. X¹ 및 X²는 각각 독립적으로 N 및 NH로부터 추가로 선택될 수 있다.
- [0021] 금속은 Zn, Pr 및 Ce 중 적어도 하나로부터 선택될 수 있다.
- [0022] 기재는 금속 기재일 수 있다. 금속 기재는 그 표면의 적어도 일부분을 금속성으로 갖는 임의의 기재 물질을 포함할 수 있다는 것이 이해될 것이다. 금속 기재는 부식으로부터 보호할 필요가 있는 임의의 금속을 포함할 수 있다. 금속 기재는 구리 함유 합금, 예를 들어 구리-함유 알루미늄 합금일 수 있다.
- [0023] 또 다른 측면에서, 부식 억제제는 임의의 실시예 또는 그 구현예를 포함할 수 있으며, 본 명세서에 기술된 바와 같은 화학식 1의 유기 헤테로사이클릭 화합물인 부식으로부터 기판을 보호하기 위한 부식 억제제가 제공된다.
- [0024] 또 다른 측면에서, 적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염을 포함하는 부식 억제 조성물이 제공되고, 여기서 금속은 Zn, La, Pr, Ce, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Co, Y, Ca, Sr, Ba, Sc 및 Zr로 이루어진 군에서 선택되며; 본 명세서에 기술된 바와 같은 화학식 1의 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물은 부식으로부터 기재를 보호하는 것과 같은 부식 억제제로서 임의의 실시예 또는 그 구현예를 포함할 수 있다.
- [0025] 또 다른 측면에서, 적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염을 포함하는 부식 억제 조성물이 제공되고, 여기서 금속은 Zn, La, Pr, Ce, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Co, Y, Ca, Sr, Ba, Sc 및 Zr로 이루어진 군에서 선택되며; 본 명세서에 기술된 바와 같은 화학식 1의 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물은 임의의 실시예 또는 그 구현예를 포함할 수 있다.
- [0026] 부식 억제 조성물은 필름-형성 유기 폴리머를 포함할 수 있다. 조성물은 코팅 조성물일 수 있다. 코팅 조성물은 파우더 코팅 조성물, 예를 들어 다양한 강철의 파우더 코팅에 사용하기 적합한 파우더 코팅 조성물일 수 있다. 코팅 조성물은 하나 이상의 수지, 예를 들어 에폭시계 수지를 포함할 수 있다. 코팅 조성물은 페인트 조성물, 예를 들어 에폭시 수지계 페인트 조성물일 수 있다. 코팅 조성물은 분무 조성물일 수 있다. 조성물은 안료, 필러 및 연장제와 같은 하나 이상의 첨가제를 포함할 수 있다는 것이 이해될 것이다.
- [0027] 또 다른 측면에서, 임의의 실시예 또는 그 구현예를 포함할 수 있는, 본 명세서에 기술된 바와 같은 필름-형성 유기 폴리머 및 부식 억제 조성물을 혼합함으로써 조성물을 형성하는 것을 포함하는 기재에 적용하기 위한 부식 억제 조성물을 제조하는 방법이 제공된다.

[0028] 또 다른 측면에서, 본 명세서에 기술된 부식 억제 조성물로 코팅된 기재를 포함하는 코팅된 기제가 제공되며, 이는 임의의 실시예 또는 그 구현예를 포함할 수 있다. 코팅된 기제는 부식 억제 조성물의 코팅 전 및/또는 후에 기재에 적용된 하나 이상의 코팅 층을 포함할 수 있다. 부식 억제 조성물은 기재의 표면에 직접 코팅으로서 적용될 수 있다. 부식 억제 조성물은 필름-형성 유기 폴리머를 포함할 수 있다. 기제는 금속 합금일 수 있다. 코팅된 기제는 항공 부품일 수 있다.

[0029] 하나의 측면에 대해 상기 및 본 명세서에 기술된 구현예 또는 실시예 중 임의의 하나 이상은 또한 상기 기술한 임의의 다른 측면에 구현예로서 적용될 수 있다는 것이 이해될 것이다.

[0030] 본 발명의 일부 구현예는 첨부된 도면을 참조하여 단지 예시로서 본 명세서에 기술되고 도시된다.

도면의 간단한 설명

[0031] 도 1a는 구리-함유 알루미늄 합금, AA7075에 대한 부식 억제 조성물의 선택에 대한 부식 값의 표이고; 도 1b는 구리-함유 알루미늄 합금, AA7075에 대한 부식 억제 조성물의 선택에 대한 부식 값의 표이고; 도 2a는 구리-함유 알루미늄 합금, AA2024에 대한 부식 억제 조성물의 선택에 대한 부식 값의 표이고; 도 2b는 구리-함유 알루미늄 합금, AA2024에 대한 부식 억제 조성물의 선택에 대한 부식 값의 표이고; 그리고 도 3은 부식 억제 조성물의 선택을 위해 구리-함유 알루미늄 합금, AA2024 상에 수행된 분극 저항 전기화학 실험을 나타내는 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0032] 본 발명은 대안적인 무크롬산염 부식 억제제를 확인하기 위해 수행된 조사와 관련된 다음의 다양한 비-제한적인 실시예를 기술한다. 놀랍게도 적어도 하나의 엑소사이클릭 티올 또는 티온 기를 포함하는 유기 헤테로사이클릭 화합물의 선택은 부식 억제 조성물에서 희토류, 알칼리 토류 및 전이 금속 염과 조합하여 부식 억제제로서 유리하게 유용하다는 것이 발견되었다. 놀랍게도, 단일 엑소사이클릭 티올 또는 티온 기를 포함하는 유기 헤테로사이클릭 화합물의 선택은 부식 억제 조성물에서 희토류, 알칼리 토류 및 전이 금속 염과 추가로 유리하게 조합될 수 있는 부식 억제제로서 유리하게 유용하다는 것이 또한 밝혀졌다. 추가적으로, 부식 억제제와 희토류, 알칼리 토류 및 전이 금속 염의 조합은 개별 성분을 동일한 농도로 분리하여 사용하여 부식 억제제와 희토류, 알칼리 토류, 또는 부식 억제 조성물의 부분으로서 사용되는 전이 금속 염을 저농도로 허용할 때 얻은 결과에 비해 시너지 결과가 제공되는 것이 밝혀졌다. 놀랍게도, 본 명세서에 기술된 유기 헤테로사이클릭 화합물의 다양한 선택은 또한 다른 알려진 부식 억제 유기 헤테로사이클릭 화합물 보다 덜 독성이 있는 것으로 밝혀졌다.

[0033] 일반적인 용어

[0034] 본 명세서에서 사용된 용어 "기재(substrate)"는 부식으로부터 보호할 필요가 있고 독특한 성질을 제공하기 위해 세정 및/또는 보호 및/또는 변형될 수 있는 임의의 구조를 의미한다. 기제는 그 표면의 적어도 일부가 금속이거나 부식되기 쉬운 임의의 다른 물질을 포함할 수 있다. 기제는 금속 기재일 수 있다.

[0035] 본 명세서에 사용된 용어 "금속 기재(metal substrate)"는 독특한 성질을 제공하기 위해 세정 및/또는 보호 및/또는 변형될 수 있는 금속이 되는 그 표면의 적어도 일부를 가지는 구조를 의미한다. "금속 기재"는 임의의 특정 유형의 금속 표면에 제한되지 않고, 부식 억제 코팅을 적용하는 관점에서, 그러한 금속 기제는 전형적으로 구리-함유 합금, 예를 들어 구리-함유 알루미늄 합금을 포함한다.

[0036] 본 명세서에 사용된 용어 "보호 조성물(protective composition)"은 기재에 대한 일부 형태의 부식 보호를 제공하는데 사용하기에 적합한 임의의 조성물을 의미한다. 예를 들어, 보호 조성물은 부식으로부터 강철을 보호하는데 사용하기 위한 파우더 코팅 조성물, 또는 부식으로부터 알루미늄 합금을 보호하기 위한 필름-형성 유기 폴리머계 조성물을 포함할 수 있다.

[0037] 본 명세서에 사용된 용어 "연장제(extender)" 또는 "연장제 안료(extender pigment)"는 조건없이 사용되는 경우, 비용을 감소시키는 것과 같은 다른 이유로 추가될 수는 있지만, 페인트 경화 후에 최종 코팅 결과에 부피를 제공하기 위해 페인트 제제에 전형적으로 혼입되는 안료 유형을 의미한다. 연장제는 추가적으로 또는 대안적으로 전체 시스템을 보다 내부식성으로 만드는 활성 성분일 수 있다. 부피를 추가하는 연장제는 종종 "필러(fillers)" 또는 "연장제/필러"를 의미한다.

- [0038] 본 명세서에 사용된 용어 "코팅(coating)"은 기재에 액체(예: 페인트) 또는 고체(예: 파우더)로 적용되어 폴리머 필름을 형성할 수 있는 폴리머 물질(유기 또는 무기)를 의미한다. 이러한 폴리머 물질은 파우더 코팅, 페인트, 실란트, 전도성 폴리머, 졸 겔 (예: 시카고에 소재한 보잉 사의 Boegel™, III), 규산염, 규소, 지르코산염, 티탄산염 등을 포함하지만 제한되지는 않는다. "코팅"은 바인더, 용매, 안료 및 첨가제의 복합 혼합물을 포함한다. 많은 코팅에는 네 가지 범주 각각으로부터 하나 이상의 물질을 갖는다. 광택 및 색과 같은 코팅 성질은 2 차원 개체와 같이 필름 표면과 관련이 있다. 그러나, 코팅의 벌크 성질은 그것의 3 차원 구조와 관련되어 있다. 상 연속성은 부피 개념이며, 코팅 성능은 바인더 상의 무결성에 의존한다.
- [0039] 본 명세서에 사용된 용어 "필름-형성 유기 폴리머(film-forming organic polymer)" 또는 "필름-형성 폴리머 물질(film-forming polymeric material)"는 모노머, 코-모노머, 수지 또는 폴리머를 포함하는 코팅을 만드는데 사용될 수 있는 임의의 폴리머 물질을 의미한다. 폴리머 물질은 또한 "바인더(binder)"로 의미될 수 있으며, 유기 또는 무기일 수 있다. 유기 폴리머 물질은 일반적으로 탄소 백본을 가지며 무기 폴리머 물질은 일반적으로 실리콘 백본을 갖는다. 유기 바인더는 바인더가 일반적으로 그들의 이름을 파생하는 유기 모노머 및 올리고머로 구성된다. 이들의 예로는 아크릴, 에폭시, 우레탄, 멜라민 등이 있다. 바인더는 우레탄, 우레아, 아크릴레이트, 알키드, 멜라민, 폴리에스테르, 비닐, 비닐 에스테르, 실리콘, 실록산, 실리케이트, 셀파이드, 실리케이트 폴리머, 에폭시 노블락, 에폭시 페놀릭, 건성유, 하이드로카본 폴리머 등과 같은 수분 감소형 에폭시-폴리아미드 계(유기 폴리머 물질용)와 같은 에폭시-계 수지 바인더 또는 비-에폭시-계 수지 바인더를 포함한다.
- [0040] 본 명세서에 사용된 용어 "중량 % (wt %)"은 조건없이 사용되는 경우, 폴리머 수지를 제외하고, 전형적으로 존재하는 모든 고체 성분들과 비교하여, 특정 고체 성분, 예를 들어, 안료, 연장제 등의 중량 %를 의미한다. 예를 들어, 코팅에 존재하는 유일한 고체 성분이 부식-억제 탄소 안료인 경우, 부식-억제 탄소 안료는 100의 wt%를 갖는 것으로 간주된다.
- [0041] 본 명세서 전반적으로 단어 "포함하다(comprise)", 또는 "포함하다(comprises)" 또는 "포함하는(comprising)"과 같은 변형은 명시된 요소, 정수 또는 단계, 또는 요소, 정수 또는 단계의 기를 포함하지만 임의의 다른 요소, 정수 또는 단계, 또는 요소, 정수 또는 단계의 기를 배제하지 않는 것을 암시하는 것이 이해될 것이다.
- [0042] 본 명세서에 개시되고 기술된 다양한 구현에는 본 명세서에 다양하게 기술된 본 명세서에 다양하게 설명된 바와 같은 특징 및 특성을 포함할 수 있고, 구성될 수 있으며, 본질적으로 구성될 수 있다. 단어 "포함하다", "포함하는" 또는 "포함하는"은 다양하게 기술된 특징 및 특성을 "구성"하거나 "본질적으로 구성하는" 구현예를 포함한다.
- [0043] 본 발명의 상세한 설명에 포함된 문서, 행위, 물질, 장치, 물품 등의 임의의 논의는 전적으로 본 발명의 내용을 제공하기 위한 목적이다. 이러한 사안들 중 일부 또는 전부가 선행 기술 자료의 일부를 구성하거나 본 출원의 각 청구항의 우선권 날짜 이전에 존재했던 본 발명과 관련된 기술분야에서 통상의 일반적인 지식으로 인정된다는 것은 받아 들여질 수 없다.
- [0044] **화학 용어**
- [0045] 이해한 바와 같이, 방향족 기는 $4m+2\pi$ 전자를 갖는 사이클릭 기를 의미하며, 여기서 m 은 1 이상의 정수이다. 본 명세서에서 사용한 것과 같이, "방향족(aromatic)"은 방향족 기의 원자가에 상관없이, 방향족 기를 의미하는 "아릴(aryl)"과 교환하여 사용가능하다. 따라서, 아릴은 일가(monovalent) 방향족 기, 이가 방향족 기 및 더 높은 다가 방향족 기를 의미한다.
- [0046] 용어 "결합된(joined)"은 단일 공유 결합에 의해 적어도 하나의 다른 고리, 부분 또는 기에 결합되는 고리, 부분 또는 기를 의미한다.
- [0047] 용어 "융합된(used)"은 하나 이상의 고리와 함께 적어도 두 개의 통상의 고리 원자를 공유하는 하나 이상의 고리를 의미한다.
- [0048] 헤테로방향족 기는 N, O, S, Se, Si 또는 P와 같이 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 방향족 기 또는 고리이다. 본 명세서에서 사용한 바와 같이, "헤테로방향족(heteroaromatic)"은 "헤테로아릴(heteroaryl)"와 교환하여 사용가능하며, 헤테로아릴 기는 하나 이상의 헤테로원자를 함유하는 일가 방향족 기, 이가 방향족 기 및 더 높은 다가 방향족 기를 의미한다.
- [0049] 용어 "선택적으로 치환된(optionally substituted)"은 임의의 가능한 위치에서, 치환된 또는 비치환된 기를 의

미한다. 치환은 예를 들어, 알킬, 알케닐, 알킬닐, 사이클로알킬, 사이클로알케닐, 아릴, 헤테로사이클릴, 헤테로아릴, 포르밀, 알칸오일, 사이클로알칸오일, 아로일, 헤테로아로일, 카르복실, 알콕시카르보닐, 사이클로알킬옥시카르보닐, 아릴옥시카르보닐, 헤테로사이클로옥시카르보닐, 헤테로아릴옥시카르보닐, 알킬아미노카르보닐, 사이클로알킬아미노카르보닐, 아릴아미노카르보닐, 헤테로사이클릴아미노카르보닐, 헤테로아릴아미노카르보닐, 시아노, 알콕시, 사이클로옥시, 아릴옥시, 헤테로사이클릴옥시, 헤테로아릴옥시, 알칸오에이트, 사이클로알칸오에이트, 아릴오에이트, 헤테로사이클릴오에이트, 헤테로아릴오에이트, 알킬카르보닐아미노, 사이클로알킬카르보닐아미노, 아릴카르보닐아미노, 헤테로사이클릴카르보닐아미노, 헤테로아릴카르보닐아미노, 니트로, 하이드록시, 할로, 할로알킬, 할로아릴, 할로헤테로사이클릴, 할로헤테로아릴, 할로알콕시, 실릴알킬, 알케닐실릴알킬, 알킬닐실릴알킬 및 아미노로부터 선택된 하나 이상의 기와 함께일 수 있다. 선택적인 치환은 할로, 알킬, 포르밀, 및 아미노로부터 선택된 하나 이상의 기일 수 있다. 선택적인 치환은 기의 염들, 예를 들어 카르복실레이트 염을 포함할 수 있다. 본 명세서에서 구체적으로 개시되지 아니한 다른 기들도 또한 사용될 수 있다.

[0050] "알킬(Alkyl)"은 단독으로 사용되거나 또는 알콕시, 알킬티오, 알킬아미노, 다이알킬아미노 또는 할로알킬과 같이 화합물명으로 사용되는 경우, 1 내지 약 10 탄소 원자, 또는 그 이상의 크기 범위인 직쇄 또는 분지쇄 탄화수소를 나타낸다. 따라서, 알킬 부분은, 명확히 더 작은 기로 제한하지 않는 한, 예를 들어 1 내지 약 6 탄소 원자 또는 그 이상의 크기 범위의 부분, 예컨대 메틸, 에틸, n-프로필, 이소-프로필 및/또는 부틸, 펜틸, 헥실, 및, 예를 들어 약 6 내지 약 10 탄소 원자, 또는 그 이상의 크기 범위인 직쇄 또는 분지쇄 탄화수소를 포함하는 더 높은 이성질체를 포함한다.

[0051] "알케닐(Alkenyl)"은 단독으로 사용되거나 알케닐옥시 또는 할로알케닐과 같은 화합물명으로 사용되는 경우, 명확히 더 작은 기로 제한하지 않는 한, 예컨대 메틸렌, 에틸렌, 1-프로페닐, 2-프로페닐, 및/또는 부테닐, 펜테닐, 헥세닐과 같은 2 내지 약 6 탄소 원자 또는 그 이상의 크기 범위인 부분, 및 예를 들어 약 6 내지 약 10 탄소 원자, 또는 그 이상의 크기 범위인 그들의 직쇄 또는 분지쇄 사슬 탄화수소를 포함하는 더 높은 이성질체를 포함하는 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합을 함유하는 직쇄 또는 분지쇄 탄화수소를 나타낸다.

[0052] "알킬닐(Alkynyl)"은 단독으로 사용하거나 알킬닐옥시와 같은 화합물명으로 사용되는 경우, 명확히 더 작은 기로 제한하지 않는 한, 예컨대 에틸닐, 1-프로피닐, 2-프로피닐, 및/또는 부티닐, 펜티닐, 헥시닐과 같은 예를 들어 2 내지 약 6 탄소 원자 또는 그 이상의 크기 범위인 부분, 및 예를 들어 약 6 내지 약 10 탄소 원자, 또는 그 이상의 크기 범위인 그들의 직쇄 또는 분지쇄 탄화수소를 포함하는 더 높은 이성질체를 포함하는 적어도 하나의 탄소-탄소 삼중 결합을 함유하는 직쇄 또는 분지쇄 탄화수소를 나타낸다.

[0053] "사이클로알킬(Cycloalkyl)"은 예를 들어, 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸, 사이클로헥실 또는 사이클로헵틸과 같은 예를 들어 약 3 내지 약 10 탄소 원자의 다양한 크기의 모노- 또는 폴리카르보사이클릭 고리 시스템을 나타낸다. 용어 "사이클로알킬옥시(cycloalkyloxy)"는 사이클로펜틸옥시 및 사이클로헥실옥시와 같은 산소 원자를 통해 연결된 동일한 기를 나타낸다. 용어 "사이클로알킬티오(cycloalkylthio)"는 사이클로펜틸티오 및 사이클로헥실티오와 같은 설퍼 원자를 통해 연결된 동일한 기를 나타낸다.

[0054] "사이클로알케닐(Cycloalkenyl)"은 예를 들어, 사이클로펜테닐, 사이클로헥세닐 또는 사이클로헵테닐과 같이 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합을 함유하는 약 3 내지 약 10 탄소 원자와 같은, 비방향족 모노- 또는 폴리카르보사이클릭 고리 시스템을 나타낸다. 용어 "사이클로알케닐옥시(cycloalkenyloxy)"는 사이클로펜테닐옥시 및 사이클로헥세닐옥시와 같은 산소 원자를 통해서 연결된 동일한 기를 나타낸다. 용어 "사이클로알케닐티오(cycloalkenylthio)"는 사이클로펜테닐티오 및 사이클로헥세닐티오와 같은 설퍼 원자를 통해서 연결된 동일한 기를 나타낸다.

[0055] 용어 "카르보사이클릭(carbocyclic)" 및 "카르보사이클릴(carbocyclyl)"은 고리 시스템을 나타내며 여기서 고리 원자는 예를 들어 약 3 내지 약 10 탄소 원자와 같이 모두 탄소 원자이며, 이것은 방향족, 비방향족, 포화, 또는 불포화일 수 있으며, 치환될 수 있거나 및/또는 융합된 고리를 가질 수 있다. 상기 기들의 예는 벤젠, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 또는 전적으로 또는 부분적으로 수소화된 페닐, 나프틸 및 플루오레닐을 포함한다.

[0056] "아릴(Aryl)"은 단독으로 사용하거나 아릴알킬, 아릴옥시 또는 아릴티오와 같은 화합물명으로 사용되는 경우: (i) 페닐, 나프틸 또는 플루오레닐과 같은, 예를 들어 약 6 내지 약 60 탄소 원자와 같은 선택적으로 치환된 모노- 또는 폴리사이클릭 방향족 카르보사이클릭 부분; 또는 (ii) 선택적으로 치환되고 부분적으로 포화된 폴리사이클릭 카르보사이클릭 방향족 고리 시스템을 나타내며, (ii)에서 아릴 및 사이클로알킬 또는 사이클로알케닐 기는 테트라하이드로나프틸, 인데닐 인다닐 또는 플루오렌 고리와 같은 사이클릭 구조를 형성하기 위해서 함께 융합된다.

- [0057] "헤테로사이클릴(Heterocyclyl)" 또는 "헤테로사이클릭(heterocyclic)"은 단독으로 사용되거나 또는 헤테로사이클릴옥시와 같이 화합물명으로 사용되는 경우, (i) 선택적으로 치환된 사이클로알킬 또는 사이클로알케닐 기, 예를 들어, 약 3 내지 약 60 고리 원자, 이것은 질소, 산소 또는 설퍼(황)과 같이 하나 이상의 헤테로원자를 포함할 수 있다 (예는 피롤리디닐, 모폴리노, 티오모폴리노, 또는 전적으로 또는 부분적으로 수소화된 티에닐, 퓨릴, 피롤릴, 티아졸릴, 옥사졸릴, 옥사지닐, 티아지닐, 피리딜 및 아제피닐(azepinyl)을 포함한다); (ii) 선택적으로 치환되고 부분적으로 포화된 폴리사이클릭 고리 시스템, 여기서 아릴 (또는 헤테로아릴) 고리 및 헤테로사이클릭 기는 사이클릭 구조를 형성하기 위해서 함께 융합된다 (예는 크로마닐, 다이하이드로벤조퓨릴 및 인돌리닐(indolinyl)을 포함한다); 또는 (iii) 하나 이상의 다리를 갖는, 선택적으로 치환되고 전적으로 또는 부분적으로 포화된 폴리사이클릭 융합된 고리 시스템 (예는 퀴누클리디닐(quinuclidinyl) 및 다이하이드로-1,4-에폭시나프틸을 포함한다)를 나타낸다.
- [0058] "헤테로아릴(Heteroaryl)" 또는 "헤테라릴(hetaryl)"은 단독으로 사용되거나 또는 헤테로아릴옥시와 같이 화합물명으로 사용되는 경우, (i) 선택적으로 치환된 모노- 또는 폴리사이클릭 방향족 유기 부분, 예를 들어, 약 1 내지 약 10 고리 원자, 여기서 하나 이상의 고리 원자는 탄소 이외의 원소(들), 예를 들어 질소, 산소, 설퍼 또는 실리콘이다; 고리가 인접한 산소 및/또는 설퍼 원자를 포함하는 양은 경우, 방향족 특성을 제공하기 위해서 충분한 수의 비국부화된 pi 전자들을 갖고 카르보사이클릭 고리 구조를 방해하는 헤테로원자(들)를 나타낸다. 전형적인 6-원자 헤테로아릴 기는 피라지닐, 피리다지닐, 피라졸릴, 피리딜 및 피리미디닐이다. 모든 구조 이성질체(regioisomer)는 예를 들어, 2-피리딜, 3-피리딜 및 4-피리딜이 고려된다. 전형적인 5-원자 헤테로아릴 고리는 퓨릴, 이미다졸릴, 옥사졸릴, 이소옥사졸릴, 이소티아졸릴, 옥사다리아졸릴, 피롤릴, 1,3,4-티아다리아졸릴, 티아졸릴, 티에닐, 트리아졸릴, 및 실롤이다. 모든 구조 이성질체는 예를 들어, 2-티에닐 및 3-티에닐이 고려된다. 바이사이클릭 기는 전형적으로 상기 명명된 헤테로아릴 기로부터 유래된 벤조-융합된 고리 시스템이며, 예를 들어, 벤조퓨릴, 벤즈이미다졸릴, 벤즈티아졸릴, 인돌릴, 인돌리지닐(indoliziny), 이소퀴놀릴, 퀴나졸리닐, 퀴놀릴 및 벤조티에닐; 또는 (ii) 선택적으로 치환되고 부분적으로 포화된 폴리사이클릭 헤테로아릴 고리 시스템이며, 여기서 헤테로아릴 및 사이클로알킬 또는 사이클로알케닐 기는 테트라하이드로퀴놀릴 또는 피리디닐 고리와 같은 사이클릭 구조를 형성하기 위해서 함께 융합된다.
- [0059] "포르밀(Formyl)"은 -CHO 부분을 나타낸다.
- [0060] "알칸오일(Alkanoyl)" -C(=O)-알킬 기를 나타내며, 여기서 알킬 기는 상기에서 정의한 바와 같다. 알칸오일 기는 약 C₂-C₂₀ 크기 범위일 수 있다. 하나의 예는 아실이다.
- [0061] "아로일(Aroyl)"은 -C(=O)-아릴 기를 나타내며, 여기서 아릴 기는 상기에서 정의한 바와 같다. 아로일 기는 약 C₇-C₂₀ 크기 범위일 수 있다. 예는 벤조일 및 1-나프토일(naphthoyl) 및 2-나프토일을 포함한다.
- [0062] "헤테로사이클오일(Heterocycloyl)"은 -C(=O)-헤테로사이클릴 기를 나타내며, 여기서 헤테로사이클릭 기는 상기에서 정의한 바와 같다. 헤테로사이클오일은 약 C₄-C₂₀ 크기 범위일 수 있다.
- [0063] "헤테로아로일(Heteroaroyl)"은 -C(=O)-헤테로아릴 기를 나타내며, 여기서 헤테로아릴 기는 상기에서 정의한 바와 같다. 헤테로아릴 기는 약 C₆-C₂₀ 크기 범위일 수 있다. 예는 피리딜카르보닐이다.
- [0064] "카르복실(Carboxyl)"은 -CO₂H 부분을 나타낸다.
- [0065] "옥시카르보닐(Oxycarbonyl)"은 탄소 원자를 통해 분자의 나머지와 연결된 카르복실산 에스테르 기 -CO₂R를 나타낸다.
- [0066] "알콕시카르보닐(Alkoxy carbonyl)"은 -CO₂-알킬 기를 나타내며, 여기서 알킬 기는 상기에서 정의한 바와 같다. 알콕시카르보닐 기는 약 C₂-C₂₀ 크기 범위일 수 있다. 예는 메톡시카르보닐 및 에톡시카르보닐을 포함한다.
- [0067] "아릴옥시카르보닐(Aryloxy carbonyl)"은 -CO₂-아릴 기를 나타내며, 여기서 아릴 기는 상기에서 정의한 바와 같다. 예는 페녹시카르보닐 및 나프톡시카르보닐을 포함한다.
- [0068] "헤테로사이클릴옥시카르보닐(Heterocyclyloxy carbonyl)"은 -CO₂-헤테로사이클릴 기를 나타내며, 여기서 헤테로사이클릭 기는 상기에서 정의한 바와 같다.
- [0069] "헤테로아릴옥시카르보닐(Heteroaryloxy carbonyl)"은 -CO₂-헤테로아릴 기를 나타내며, 여기서 헤테로아릴 기는

상기에서 정의한 바와 같다.

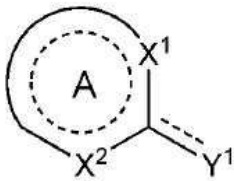
- [0070] "아미노카르보닐(Aminocarbonyl)"은 탄소 원자를 통해서 분자의 나머지와 연결된 카르복실 산 아마이드 기 $-C(=O)NHR$ 또는 $-C(=O)NR_2$ 를 나타낸다.
- [0071] "알킬아미노카르보닐(Alkylaminocarbonyl)"은 $-C(=O)NHR$ 또는 $-C(=O)NR_2$ 기를 나타내며, 여기서 R은 상기에서 정의한 바와 같이 알킬 기이다.
- [0072] "아릴아미노카르보닐(Arylamino)"은 $-C(=O)NHR$ 또는 $-C(=O)NR_2$ 기를 나타내며, 여기서 R은 상기에서 정의한 바와 같이 아릴 기이다.
- [0073] "헤테로사이클릴아미노카르보닐(Heterocyclylaminocarbonyl)"은 $-C(=O)NHR$ 또는 $-C(=O)NR_2$ 기를 나타내며, 여기서 R은 상기에서 정의한 바와 같이 헤테로사이클릭 기이다. NR_2 는 예를 들어 선택적으로 치환되는 헤테로사이클릭 고리일 수 있다.
- [0074] "헤테로아릴아미노카르보닐(Heteroarylaminocarbonyl)"은 $-C(=O)NHR$ 또는 $-C(=O)NR_2$ 기를 나타내며, 여기서 R은 상기에서 정의한 바와 같이 헤테로아릴 기이다. NR_2 는 예를 들어 선택적으로 치환되는 헤테로아릴 고리일 수 있다.
- [0075] "시아노(Cyano)"는 $-CN$ 부분을 나타낸다.
- [0076] "하이드록시(Hydroxyl)"는 $-OH$ 부분을 나타낸다.
- [0077] "알콕시(Alkoxy)"는 $-O$ -알킬 기를 나타내며, 여기서 알킬 기는 상기에서 정의한 바와 같다. 예는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 이소-프로폭시, 및 상이한 부톡시, 펜톡시, 헥실옥시 및 더 높은 이성질체를 포함한다.
- [0078] "아릴옥시(Aryloxy)"는 $-O$ -아릴 기를 나타내며, 여기서 아릴 기는 상기에서 정의한 바와 같다. 예는, 이에 제한되지는 않지만, 페녹시 및 나프톡시를 포함한다.
- [0079] "알케닐옥시(Alkenyloxy)"은 $-O$ -알케닐 기를 나타내며, 여기서 알케닐 기는 상기에서 정의한 바와 같다. 예는 알릴옥시이다.
- [0080] "헤테로사이클릴옥시(Heterocycliloxy)"는 $-O$ -헤테로사이클릴 기를 나타내며, 여기서 헤테로사이클릭 기는 상기에서 정의한 바와 같다.
- [0081] "헤테로아릴옥시(Heteroaryloxy)"는 $-O$ -헤테로아릴 기를 나타내며, 여기서 헤테로아릴 기는 상기에서 정의한 바와 같다. 예는 피리딜옥시이다.
- [0082] "알칸오에이트(Alkanoate)"는 $-OC(=O)-R$ 기를 나타내며, 여기서 R은 상기에서 정의한 바와 같이 알킬 기이다.
- [0083] "아릴오에이트(Aryloate)"는 $-OC(=O)-R$ 기를 나타내며, 여기서 R은 상기에서 정의한 바와 같이 아릴 기이다.
- [0084] "헤테로사이클릴오에이트(Heterocycliloate)"는 $-OC(=O)-R$ 기를 나타내며, 여기서 R은 상기에서 정의한 바와 같이 헤테로사이클릭 기이다.
- [0085] "헤테로아릴오에이트(Heteroaryloate)"는 $-OC(=O)-R$ 기를 나타내며, 여기서 R은 상기에서 정의한 바와 같이 헤테로아릴 기이다.
- [0086] "아미노(Amino)"는 $-NH_2$ 부분을 나타낸다.
- [0087] "알킬아미노(Alkylamino)"는 $-NHR$ 또는 $-NR_2$ 기를 나타내며, 여기서 R은 상기에서 정의한 바와 같이 알킬 기이다. 예는, 이에 제한되지는 않지만, 메틸아미노, 에틸아미노, n-프로필아미노, 이소프로필아미노, 및 상이한 부틸아미노, 펜틸아미노, 헥실아미노 및 더 높은 이성질체를 포함한다.
- [0088] "아릴아미노(Arylamino)"는 $-NHR$ 또는 $-NR_2$ 기를 나타내며, 여기서 R은 상기에서 정의한 바와 같이 아릴 기를 나타낸다. 예는 페닐아미노이다.
- [0089] "헤테로사이클릴아미노(Heterocyclylamino)"는 $-NHR$ 또는 $-NR_2$ 기를 나타내며, 여기서 R은 상기에서 정의한 바와 같이 헤테로사이클릭 기이다. NR_2 는 예를 들어 선택적으로 치환되는 헤테로사이클릭 고리일 수 있다.

- [0090] "카르보닐아미노(Carbonylamino)"는 질소 원자를 통해 분자의 나머지에 연결되는 카르복실산 아미드 기 $-NHC(=O)R$ 을 나타낸다.
- [0091] "알킬카르보닐아미노(Alkylcarbonylamino)"는 $-NHC(=O)R$ 기를 나타내며, 여기서 R은 상기에서 정의한 바와 같이 알킬 기이다.
- [0092] "아릴카르보닐아미노(Arylcarbonylamino)"는 $-NHC(=O)R$ 기를 나타내며, 여기서 R은 상기에서 정의한 바와 같이 아릴 기이다.
- [0093] "헤테로사이클릭카르보닐아미노(Heterocycllycarbonylamino)"는 $-NHC(=O)R$ 기를 나타내며, 여기서 R은 상기에서 정의한 바와 같이 헤테로사이클릭 기이다.
- [0094] "헤테로아릴카르보닐아미노(eteroarylcarbonylamino)"는 $-NHC(=O)R$ 기를 나타내며, 여기서 R은 상기에서 정의한 바와 같이 헤테로아릴 기이다.
- [0095] "니트로(Nitro)"는 $-NO_2$ 일부분을 나타낸다.
- [0096] "알데하이드(Aldehyde)"는 $-C(=O)H$ 기를 나타낸다.
- [0097] "알카닐(Alkanal)"은 알킬- $(C=O)H$ 기를 나타내며, 여기서 알킬 기는 상기에서 정의한 바와 같다.
- [0098] "알킬실릴(Alkylsilyl)"은 실리콘 원자를 통해 분자의 나머지와 연결된 알킬 기를 나타내며, 이것은 세 개 이하의 독립적으로 선택된 알킬 기와 치환될 수 있으며 각각의 알킬 기는 상기에서 정의한 바와 같다.
- [0099] "알케닐실릴(Alkenylsilyl)"은 실리콘 원자를 통해 분자의 나머지와 연결된 알케닐 기를 나타내며, 이것은 세 개 이하의 독립적으로 선택된 알케닐 기로 치환될 수 있으며 각각의 알케닐 기는 상기에서 정의한 바와 같다.
- [0100] "알키닐실릴(Alkynylsilyl)"은 실리콘 원자를 통해 분자의 나머지와 연결된 알키닐 기를 나타내며, 이것은 세 개 이하의 독립적으로 선택된 알키닐 기와 치환될 수 있으며 각각의 알키닐 기는 상기에서 정의한 바와 같다.
- [0101] 용어 "할로(halo)" 또는 할로젠(halogen)"은 단독으로 사용되거나 또는 할로알킬, 할로알콕시 또는 할로알킬설포닐과 같이 화합물명으로 사용되는 경우, 불소, 염소, 브롬 또는 요오드를 나타낸다. 또한, 할로알킬, 할로알콕시 또는 할로알킬설포닐과 같이 화합물명으로 사용되는 경우, 알킬은 독립적으로 동일하거나 상이할 수 있는 할로젠 원자와 전적으로 치환되거나 부분적으로 할로젠화될 수 있다. 할로알킬의 예는, 이에 제한되지는 않지만, $-CH_2CH_2F$, $-CF_2CF_3$ 및 $-CH_2CHFC1$ 을 포함한다. 할로알콕시의 예는, 이에 제한되지는 않지만, $-OCHF_2$, $-OCF_3$, $-OCH_2CCl_3$, $-OCH_2CF_3$ 및 $-OCH_2CH_2CF_3$ 를 포함한다. 할로알킬설포닐의 예는, 이에 제한되지는 않지만, $-SO_2CF_3$, $-SO_2CCl_3$, $-SO_2CH_2CF_3$ 및 $-SO_2CF_2CF_3$ 를 포함한다.
- [0102] 용어 "티올(thiol)", "티오(thio)", "메르캡토(mercapto)" 또는 "메르캡탄(mercaptan)"은 설퍼하이드릴 부분 $-SH$ 를 포함하는 임의의 유기설퍼 기를 의미하며, 이것은 $R-SH$ 기를 포함하며 여기서 R은 $-SH$ 부분에 조화를 위해 탄소 원자를 포함하는 부분, 예를 들어 상기에서 정의한 바와 같이 알킬설퍼 기이다. 예를 들어, 티올 또는 메르캡토 기는 설퍼하이드릴 부분 $-SH$ 일 수 있다.
- [0103] 용어 "티온(thione)", "티오케톤(thioketones)" 또는 "티오카르보닐(thiocarbonyls)"은 $-C=S$ 부분을 포함하는 임의의 유기설퍼 기를 의미하며, 이것은 $R-C=S$ 기를 포함하며, 예를 들어 여기서 R은 상기에서 정의한 알킬 기이다. 예를 들어, 티온 기는 $-C=S$ 부분일 수 있다.
- [0104] 용어 "엑소사이클릭(exocyclic)"은 헤테로아릴 또는 헤테로사이클릭 화합물의 사이클릭 고리 시스템에 외부적으로 붙여진 원자 또는 기를 의미하며, 이것은 원자가 헤테로아릴 또는 헤테로사이클릭 화합물의 고리 시스템의 일부분을 형성하기 위해서 고리 시스템 안에 있는 "엔도사이클릭" 원자 또는 기와는 반대된다.
- [0105] 본 명세서에 개시한 화합물들은 화합물들의 염, 용매화물, 수화물, 이성질체, 토토머, 라세미체, 입체 이성질체, 거울상 이성질체 또는 부분입체 이성질체를 포함할 수 있다. 예를 들어, 염은 소듐(나트륨), 칼륨, 칼슘, 질산염, 포스페이트, 설페이트 및 염화물을 포함할 수 있다. 하나의 실시형태에서, 화합물은 소듐염으로부터 선택된 그의 염을 포함할 수 있다.
- [0106] **부식 억제제**
- [0107] 본 발명의 부식 억제제는 적어도 하나의 엑소사이클릭 설퍼 기, 예를 들어 티올 또는 티온(thione) 기를 포함하

는 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물로부터 선택될 수 있다. 본 발명의 부식 억제제는 또한 단일 엑소사이클릭 설퍼 기, 예를 들어 티올 또는 티온 기를 포함하는 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물로부터 선택될 수 있다. 유기 헤테로사이클릭 화합물은 각각 선택적으로 치환될 수 있고, 하나 이상의 치환기 또는 기와 선택적으로 융합될 수 있다. 유기 헤테로사이클릭 화합물은 적어도 하나의 엑소사이클릭 티올 또는 티온 기를 포함하는 선택적으로 치환된, 선택적으로 융합된, 헤테로아릴 또는 헤테로사이클릭 화합물로부터 선택될 수 있다. 적어도 하나의 엑소사이클릭 티올 또는 티온 기 및 N, O 및 S로부터 선택된 적어도 하나의 엔도사이클릭 헤테로원자를 포함하는 선택적으로 치환된 헤테로아릴 또는 헤테로사이클릭 화합물로부터 유기 헤테로사이클릭 화합물은 선택될 수 있다. 유기 헤테로사이클릭 화합물은 적어도 하나의 엑소사이클릭 티올 기의 염, 예를 들어, 티올 소듐염을 포함할 수 있다.

[0108] 하나 이상의 유기 헤테로사이클릭 화합물은, 티올 및 티온으로부터 선택된 적어도 하나의 엑소사이클릭 설퍼 기를 포함하는 선택적으로 치환된, 선택적으로 융합된, 5 또는 6-원자 모노 또는 바이사이클릭 헤테로아릴 또는 헤테로사이클릭 화합물로부터 각각 선택될 수 있다. 엑소사이클릭 설퍼 기는 티올일 수 있다.

[0109] 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물은 하기 화학식 1의 화합물 또는 그의 염으로부터 선택될 수 있다:



화학식 1

[0110] 여기서, A는 5- 또는 6-원자 아릴, 헤테로아릴 또는 헤테로사이클릭 고리이며, 선택적으로 하나 이상의 치환기로 치환되며 선택적으로 하나 이상의 아릴 또는 헤테로아릴 고리와 융합되며, 여기서 점선은 하나 이상의 선택적인 이중 결합을 나타내며;

[0112] Y¹은 S 또는 SH로부터 선택되며, 여기서 점선은 Y¹이 S인 경우 이중 결합을 나타내며, Y¹이 SH인 경우 존재하지 않으며;

[0113] X¹은 N, NH, O 및 S로부터 선택되며;

[0114] X²는 N, NR⁵, O, S, CR⁶ 및 CR⁷R⁸로부터 선택되며;

[0115] R⁵는 수소, 아미노, C₁-C₁₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₁₀ 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있으며; 그리고

[0116] R⁶, R⁷ 및 R⁸는 각각 독립적으로, 수소, 할로, 티올, 아미노, C₁-C₁₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₁₀ 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있다.

[0117] 화학식 1의 유기 헤테로사이클릭 화합물에 대해서, Y¹은 SH일 수 있다. X¹은 N, NH, 및 S로부터 선택될 수 있다. X¹은 N 및 S로부터 선택될 수 있다. X¹은 N 및 NH로부터 선택될 수 있다. X²는 N, NH, O 및 S로부터 선택될 수 있다. X²는 N, NH, 및 S로부터 선택될 수 있다. X²는 N 및 NH로부터 선택될 수 있다. X¹ 및 X²는 각각 독립적으로 N, NH 및 S로부터 선택될 수 있다. X¹ 및 X²는 각각 독립적으로 N 및 NH로부터 선택될 수 있다. X¹은 N 및 NH로부터 선택될 수 있으며, X²는 CR⁶ 및 CR⁷R⁸로부터 선택될 수 있다.

[0118] 화학식 1의 유기 헤테로사이클릭 화합물에 대해서, Y¹은 SH일 수 있고, X¹ 및 X²는 각각 독립적으로 N, NH 및 S로부터 선택될 수 있다. X¹은 N 및 S로부터 추가로 선택될 수 있다. X¹은 N 및 NH로부터 추가로 선택될 수 있다. X²는 CR⁶ 및 CR⁷R⁸로부터 추가로 선택될 수 있다. X²는 N, NH 및 S로부터 추가로 선택될 수 있다. X²는 N 및 NH로

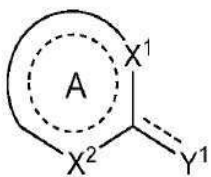
부터 추가로 선택될 수 있다. X^1 및 X^2 는 각각 독립적으로 N 및 NH로부터 추가로 선택될 수 있다.

[0119] 고리 A의 선택적으로 융합된 기는 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭일 수 있다. A 고리의 선택적인 융합된 기는 선택적으로 치환된 모노- 또는 바이사이클릭 아릴, 헤테로아릴 또는 헤테로사이클릭 고리일 수 있으며, 예를 들어 여기서 화학식 1의 화합물이 바이사이클릭 화합물일 수 있다. 모노사이클릭 아릴 기는 벤젠과 같이 선택적으로 치환된 6 원자 고리일 수 있다. 폴리사이클릭 아릴 기는 나프탈렌, 안트라센, 피렌, 테트라센, 및 펜타센과 같이, 함께 융합된 두 개 이상의 선택적으로 치환된 6-원자 고리일 수 있다. 헤테로아릴 기는 티오펜, 퓨란, 피롤, 실롤, 이미다졸, 1,3-티아졸, 1,3,4-옥사다리아졸, 1,3,4-티아다리아졸과 같이 5-원자 모노사이클릭 고리, 또는 피리딘 및 트리아진과 같이 6 원자 고리로부터 선택될 수 있으며, 여기서 각각의 고리는 선택적으로 치환될 수 있다.

[0120] A 고리의 선택적인 치환기들은 할로, 시아노, 아미노, 하이드록시, 알칸산, 알칸산염, 카르바모일, C_1-C_{10} 알킬 옥시카르보닐, C_1-C_{10} 알킬, C_1-C_{10} 할로알킬, C_1-C_{10} 알킬아미노, C_3-C_{10} 사이클로알킬, C_2-C_{10} 알케닐, C_3-C_{10} 사이클로알케닐, C_2-C_{10} 알키닐, C_3-C_{10} 사이클로알키닐, 아릴 및 아릴 C_1-C_{10} 알킬, 헤테로아릴 및 헤테로아릴 C_1-C_{10} 알킬, C_1-C_{10} 알킬옥시, C_3-C_{10} 사이클로알킬옥시로부터 선택될 수 있으며, 여기서 아미노, 알칸산, 알칸산염, 알킬옥시카르보닐, 알킬, 할로알킬, 알킬아미노, 사이클로알킬, 알케닐, 사이클로알케닐, 알키닐, 사이클로알키닐, 아릴, 아릴알킬, 헤테로아릴, 헤테로아릴알킬, 알킬옥시 및 사이클로알킬옥시는 각각 선택적으로 치환될 수 있으며, 예를 들어 하나 이상의 할로, 하이드록시, 아미노, 니트로, 카르복실산과 추가로 치환될 수 있다. 선택적인 치환은 할로, 알킬, 포르밀, 및 아미노로부터 선택된 하나 이상의 기일 수 있다. 선택적인 치환기들은 기능성 기의 염들, 예를 들어 카르복실레이트 염을 포함할 수 있다.

[0121] 고리 A는 헤테로사이클릭, 예를 들어 불포화 헤테로사이클릭 화합물일 수 있다. 고리 A는 헤테로방향족 또는 부분적으로 불포화될 수 있다. 예를 들어, 고리 A는 고리 원자들 사이에 하나 이상의 이중 결합을 함유할 수 있다. 고리 A는 또한 하나 이상의 선택적인 치환기들 및 선택적인 융합된 기들을 함유할 수 있다. 고리 A는 모노사이클릭 5 또는 6 원자의 헤테로아릴 또는 헤테로사이클릭 고리일 수 있다. 고리 A는 5 및 6 원자 고리로부터 각각 독립적으로 선택되며 함께 결합된 두 개의 고리를 포함하는 바이사이클릭 고리일 수 있다. 고리 A는 5 및 6 원자 고리로부터 각각 독립적으로 선택되며 함께 융합된 두 개의 고리를 포함하는 바이사이클릭 고리일 수 있다. 고리 A는 6 원자의 아릴, 카르보사이클릭, 헤테로사이클릭 또는 헤테로아릴 고리에 융합된 5 원자의 헤테로사이클릭 고리를 함유하는 헤테로사이클릭 고리 또는 바이사이클릭 헤테로아릴일 수 있다.

[0122] 화학식 1의 화합물 또는 그의 염으로부터 선택된 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물이 단일 엑소사이클릭 티올 또는 티온 기를 제공하는 경우에, 추가적인 장점이 제공될 수 있다. 예를 들어, 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물은 하기 화학식 1의 화합물 또는 그의 염으로부터 선택될 수 있다:



화학식 1

[0123] 여기서, A는 5- 또는 6-원자 아릴, 헤테로아릴 또는 헤테로사이클릭 고리이며, 선택적으로 하나 이상의 치환기로 치환되며 선택적으로 하나 이상의 아릴 또는 헤테로아릴 고리와 융합되며, 여기서 점선은 하나 이상의 선택적인 이중 결합을 나타내며;

[0125] Y^1 은 S 또는 SH로부터 선택되며, 여기서 점선은 Y^1 이 S인 경우 이중 결합을 나타내며, Y^1 이 SH인 경우 존재하지 않으며;

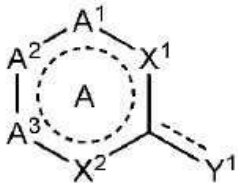
[0126] X^1 은 N, NH, O 및 S로부터 선택되며;

[0127] X^2 는 N, NR^5 , O, S, CR^6 및 CR^7R^8 로부터 선택되며;

[0128] R^5 는 수소, 아미노, C_1-C_{10} 알킬, C_2-C_{10} 알케닐, C_2-C_{10} 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각

각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알킬닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있으며; 그리고

- [0129] R^6 , R^7 및 R^8 은 각각 독립적으로 수소, 할로, 아미노, C_1 - C_{10} 알킬, C_2 - C_{10} 알케닐, C_2 - C_{10} 알킬닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알킬닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있다.
- [0130] 화학식 1의 유기 헤테로사이클릭 화합물에 대해서, Y^1 은 SH일 수 있다. X^1 은 N, NH 및 S로부터 선택될 수 있다. X^1 은 N 및 S로부터 선택될 수 있다. X^1 은 N 및 NH로부터 선택될 수 있다. X^2 는 N, NH, O 및 S로부터 선택될 수 있다. X^2 는 N, NH 및 S로부터 선택될 수 있다. X^2 는 N 및 NH로부터 선택될 수 있다. X^1 및 X^2 는 각각 독립적으로 N, NH 및 S로부터 선택될 수 있다. X^1 및 X^2 는 각각 독립적으로 N 및 NH로부터 선택될 수 있다. X^1 은 N 및 NH로부터 선택될 수 있으며, X^2 는 CR^6 및 CR^7R^8 로부터 선택될 수 있다.
- [0131] 화학식 1의 유기 헤테로사이클릭 화합물에 대해서, Y^1 은 SH일 수 있으며, X^1 및 X^2 는 각각 독립적으로 N, NH 및 S로부터 선택될 수 있다. X^1 은 N 및 S로부터 추가로 선택될 수 있다. X^1 은 N 및 NH로부터 추가로 선택될 수 있다. X^2 는 CR^6 및 CR^7R^8 로부터 추가로 선택될 수 있다. X^2 는 N, NH 및 S로부터 추가로 선택될 수 있다. X^2 는 N 및 NH로부터 추가로 선택될 수 있다. X^1 및 X^2 는 각각 독립적으로 N 및 NH로부터 추가로 선택될 수 있다.
- [0132] 고리 A의 선택적으로 융합된 기는 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭일 수 있다. A 고리의 선택적인 융합된 기는 선택적으로 치환된 모노- 또는 바이사이클릭 아릴, 헤테로아릴 또는 헤테로사이클릭 고리일 수 있으며, 예를 들어 여기서 화학식 1a의 화합물이 바이사이클릭 화합물일 수 있다. 모노사이클릭 아릴 기는 벤젠과 같이 선택적으로 치환된 6 원자 고리일 수 있다. 폴리사이클릭 아릴 기는 나프탈렌, 안트라센, 피렌, 테트라센, 및 펜타센과 같이, 함께 융합된 두 개 이상의 선택적으로 치환된 6-원자 고리일 수 있다. 헤테로아릴 기는 티오펜, 퓨란, 피롤, 실롤(silole), 이미다졸, 1,3-티아졸, 1,3,4-옥사디아자졸, 1,3,4-티아디아자졸과 같이 5-원자 모노사이클릭 고리, 또는 피리딘 및 트리아진과 같이 6 원자 고리로부터 선택될 수 있으며, 여기서 각각의 고리는 선택적으로 치환될 수 있다.
- [0133] A 고리의 선택적인 치환기들은 할로, 시아노, 아미노, 하이드록시, 알칸산, 알칸산염, 카르바모일, C_1 - C_{10} 알킬옥시카르보닐, C_1 - C_{10} 알킬, C_1 - C_{10} 할로알킬, C_1 - C_{10} 알킬아미노, C_3 - C_{10} 사이클로알킬, C_2 - C_{10} 알케닐, C_3 - C_{10} 사이클로알케닐, C_2 - C_{10} 알킬닐, C_3 - C_{10} 사이클로알킬닐, 아릴 및 아릴 C_1 - C_{10} 알킬, 헤테로아릴 및 헤테로아릴 C_1 - C_{10} 알킬, C_1 - C_{10} 알킬옥시, C_3 - C_{10} 사이클로알킬옥시로부터 선택될 수 있으며, 여기서 아미노, 알칸산, 알칸산염, 알킬옥시카르보닐, 알킬, 할로알킬, 알킬아미노, 사이클로알킬, 알케닐, 사이클로알케닐, 알킬닐, 사이클로알킬닐, 아릴, 아릴알킬, 헤테로아릴, 헤테로아릴알킬, 알킬옥시 및 사이클로알킬옥시는 각각 선택적으로 치환될 수 있으며, 예를 들어 하나 이상의 할로, 하이드록시, 아미노, 니트로, 카르복실산과 추가로 치환될 수 있다. 선택적인 치환은 할로, 알킬, 포르밀, 및 아미노로부터 선택된 하나 이상의 기일 수 있다. 선택적인 치환기들은 기능성 기의 염들, 예를 들어 카르복실레이트 염을 포함할 수 있다.
- [0134] 고리 A는 헤테로사이클릭, 예를 들어 불포화 헤테로사이클릭 화합물일 수 있다. 고리 A는 헤테로방향족 또는 부분적으로 불포화일 수 있다. 예를 들어, 고리 A는 고리 원자들 사이에 하나 이상의 이중 결합을 함유할 수 있다. 고리 A는 또한 하나 이상의 선택적인 치환기들 및 선택적인 융합된 기들을 함유할 수 있다. 고리 A는 모노사이클릭 5 또는 6 원자의 헤테로아릴 또는 헤테로사이클릭 고리일 수 있다. 고리 A는 5 및 6 원자 고리로부터 각각 독립적으로 선택되며 함께 결합된 두 개의 고리를 포함하는 바이사이클릭 고리일 수 있다. 고리 A는 5 및 6 원자 고리로부터 각각 독립적으로 선택되며 함께 융합된 두 개의 고리를 포함하는 바이사이클릭 고리일 수 있다. 고리 A는 6 원자의 아릴, 카르보사이클릭, 헤테로사이클릭 또는 헤테로아릴 고리에 융합된 5 원자의 헤테로사이클릭 고리를 함유하는 헤테로사이클릭 고리 또는 바이사이클릭 헤테로아릴일 수 있다.
- [0135] 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물은 하기 화학식 1(a)의 화합물 또는 그의 염으로부터 선택될 수 있다:



화학식 1(a)

[0136]

여기서, A, Y¹, X¹ 및 X²는 상기에서 개시한 것과 같이 화학식 1에 따라 정의되며;

[0137]

A¹, A² 및 A³는 각각 독립적으로 C=O, C=S, N, NR¹³, O, S, SO₂, CR¹⁴, 및 CR¹⁵R¹⁶으로부터 선택되며;

[0138]

R¹³은 수소, 아미노, C₁-C₁₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₁₀ 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있으며; 그리고

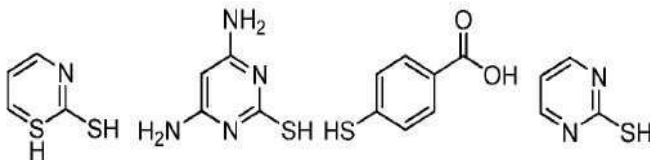
[0139]

R¹⁴, R¹⁵ 및 R¹⁶은 각각 독립적으로 수소, 할로, 티올, 아미노, C₁-C₁₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₁₀ 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있으며, 그리고 선택적으로 R¹³, R¹⁴, R¹⁵ 및 R¹⁶의 두 개는 선택적으로 치환된 아릴 또는 A 고리와 융합된 헤테로아릴 고리를 형성하기 위해서 함께 결합한다.

[0140]

하나의 실시형태에서, A¹ 및 A³는 CR¹⁴이다. 다른 실시형태에서, R¹⁴는 아미노 및 티올로부터 선택된다. 또 다른 실시형태에서, A¹ 및 A³는 각각 독립적으로 C-SH 및 C-NH₂로부터 선택된다. 또 다른 실시형태에서, A¹ 및 A³는 C-SH이다. 또 다른 실시형태에서, Y¹는 SH이다. 또 다른 실시형태에서, X¹ 및 X²는 N이다. 또 다른 실시형태에서, A²는 N이다. 화학식 1(a)의 화합물의 일부 특정 실시예는 하기와 같다:

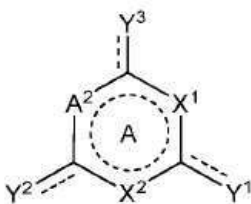
[0141]



[0142]

적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물은 화학식 1(a)(i)의 화합물 또는 그의 염으로부터 선택될 수 있다:

[0143]



화학식 1(a)(i)

[0144]

여기서, A는 5- 또는 6-원자 아릴, 헤테로아릴 또는 헤테로사이클릭 고리이며, 선택적으로 하나 이상의 치환기로 치환되며, 선택적으로 하나 이상의 아릴 또는 헤테로아릴 고리와 융합되며, 여기서 점선은 하나 이상의 선택적인 이중 결합을 나타내며;

[0145]

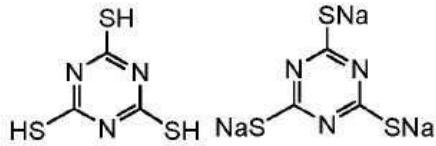
A², X¹ 및 X²는 각각 독립적으로 N, NH, O, 및 S으로부터 선택되며;

[0146]

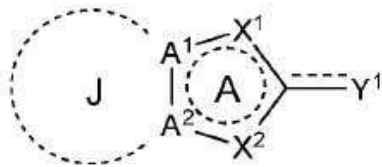
Y¹, Y² 및 Y³는 각각 독립적으로 S 또는 SH로부터 선택되며, 여기서 점선은 Y¹이 S인 경우 이중 결합을 나타내며 또는 Y¹이 SH인 경우에는 존재하지 않으며;

[0147]

- [0148] X^1 및 X^2 는 상기에서 개시한 것과 같이 화학식 1에 따라 정의되며;
- [0149] A^1 , A^2 및 A^3 는 각각 독립적으로 C=O, C=S, N, NR^{13} , O, S, SO_2 , CR^{14} , $CR^{15}R^{16}$ 로부터 선택되며; 그리고
- [0150] R^{14} , R^{15} 및 R^{16} 은 상기에서 개시한 것과 같이 화학식 1a에 따라 정의된다.
- [0151] 하나의 실시형태에서, A^2 , X^1 및 X^2 는 N이다. 다른 실시형태에서, Y^1 , Y^2 및 Y^3 는 SH이다.
- [0152] 화학식 1(a)(i)의 화합물의 일부 특정 실시예는 하기와 같다:



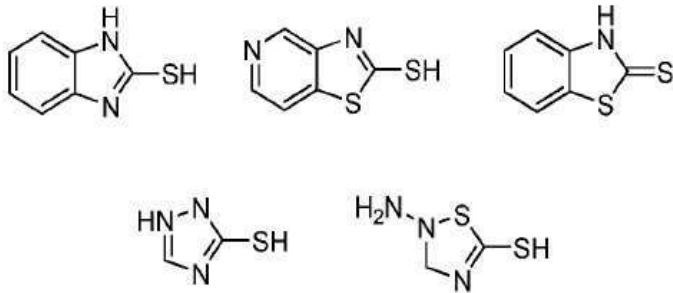
- [0153]
- [0154] 추가적인 장점들은, 그의 염을 포함하여, 단일 엑소(exo, 외향)사이클릭 티올 또는 티온 기에 의해 제공될 수 있다. 하나의 실시형태에서, 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물은 하기 화학식 1(b)의 화합물 또는 그의 염으로부터 선택될 수 있다:



화학식 1(b)

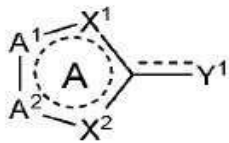
- [0155]
- [0156] 여기서, A 고리는 선택적으로 치환된 5-원자 헤테로사이클릭 고리이며, 여기서 점선은 하나 이상의 선택적인 이중 결합을 나타내며;
- [0157] X^1 , X^2 및 Y^1 은 상기에서 개시한 것과 같이 화학식 1에 따라 정의되며;
- [0158] A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 C=O, C=S, N, NR^{13} , O, S, SO_2 , CR^{14} 및 $CR^{15}R^{16}$ 으로부터 선택되며; 그리고 선택적으로 치환된 아릴, 헤테로아릴 또는 A 고리에 융합된 헤테로사이클릭 고리 J를 형성하기 위해서 선택적으로 함께 결합되며;
- [0159] R^{13} 은 선택적으로 수소, 아미노, C_1 - C_{10} 알킬, C_2 - C_{10} 알케닐, C_2 - C_{10} 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있으며; 그리고
- [0160] R^{14} , R^{15} 및 R^{16} 은 각각 독립적으로 수소, 할로, 아미노, C_1 - C_{10} 알킬, C_2 - C_{10} 알케닐, C_2 - C_{10} 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있으며, 그리고 선택적으로 R^{13} , R^{14} , R^{15} 및 R^{16} 의 둘은 선택적으로 치환된 아릴 또는 A 고리와 융합된 헤테로아릴 고리를 형성하기 위해서 함께 결합한다.

[0161] 화학식 1(b)의 화합물의 일부 특정 실시예들은 하기와 같다:



[0162]

[0163] 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물은 하기 화학식 1(b)(i)의 화합물 또는 그의 염으로부터 선택될 수 있다:



화학식 1(b)(i)

[0164]

[0165] 여기서, A 고리는 선택적으로 치환된 5-원자 헤테로사이클릭 고리이며, 여기서 점선은 하나 이상의 선택적인 이중 결합을 나타내며;

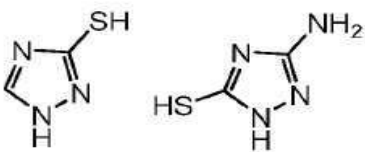
[0166] X^1 , X^2 및 Y^1 은 상기에서 개시한 것과 같이 화학식 1b에 따라 정의되며;

[0167] A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 N, NR^{13} , O, S, CR^{14} 및 $CR^{15}R^{16}$ 으로부터 선택되며,

[0168] R^{13} 은 수소, 아미노, C_1 - C_{10} 알킬, C_2 - C_{10} 알케닐, C_2 - C_{10} 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있으며; 그리고

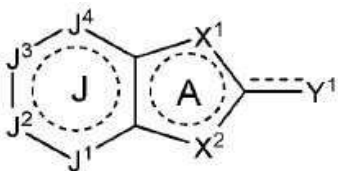
[0169] R^{14} , R^{15} 및 R^{16} 은 상기에서 개시한 것과 같이 화학식 1b에 따라 정의된다.

[0170] 화학식 1(b)(i)의 화합물의 일부 특정 실시예들은 하기와 같다:



[0171]

[0172] 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물은 하기 화학식 1(b)(ii)의 화합물 또는 그의 염으로부터 선택될 수 있다:



화학식 1(b)(ii)

[0173]

[0174] 여기서, A 고리는 선택적으로 치환된 5-원자 헤테로사이클릭 고리이며, J 고리는 선택적으로 치환된 6-원자 아릴 또는 헤테로사이클릭 고리이며, 여기서 점선은 하나 이상의 선택적인 이중 결합을 나타내며;

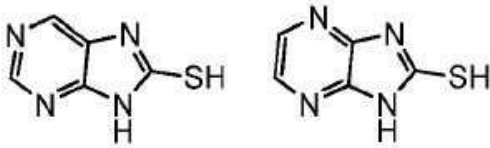
[0175] X^1 , X^2 및 Y^1 은 상기에서 개시한 것과 같이 화학식 1a에 따라 정의되며;

[0176] J^1 , J^2 , J^3 및 J^4 는 각각 독립적으로 N, NR¹³, O, S, CR¹⁴ 및 CR¹⁵R¹⁶로부터 선택되며;

[0177] R¹³은 수소, 아미노, C₁-C₁₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₁₀ 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있으며; 그리고

[0178] R¹⁴, R¹⁵ 및 R¹⁶은 각각 독립적으로 수소, 할로, 아미노, C₁-C₁₀ 알킬, C₂-C₁₀ 알케닐, C₂-C₁₀ 알키닐, 아릴 및 헤테로아릴로부터 선택되며, 여기서 각각의 아미노, 알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴 또는 헤테로아릴 기는 선택적으로 치환될 수 있다.

[0179] 화학식 1(b)(ii)의 화합물의 일부 특정 실시예들은 하기와 같다:



[0180]

[0181] 화학식 1에 대해서 본 명세서에서 개시한 임의의 실시형태 또는 실시예들은 또한 화학식 1(a), 1(a)(i), 1(b), 1(b)(i) 또는 1(b)(ii)의 임의의 화합물에 대한 실시형태를 제공할 수 있다.

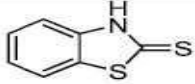
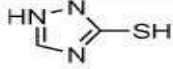
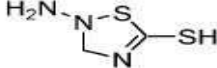
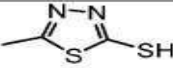
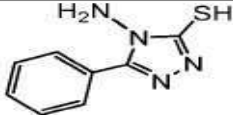
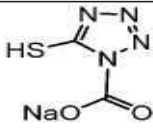
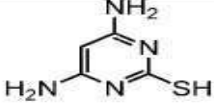
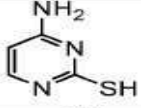
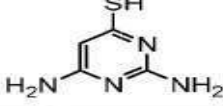
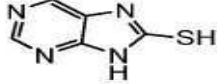
[0182] 유기 화합물들은 하나 이상의 입체 이성질체로 존재할 수 있다. 다양한 입체 이성질체들은 거울상 이성질체, 부분입체 이성질체, 및 기하학적 이성질체를 포함할 수 있다. 하나의 입체 이성질체가 나머지보다 더 활성일 수 있음을 통상의 기술자는 인식할 것이다. 또한, 통상의 기술자는 상기 입체 이성질체를 분리하는 방법을 알 것이다. 따라서, 본 발명의 개시는 본 명세서에 개시된 화합물의 광학적으로 활성인 혼합물, 개별적인 입체 이성질체, 및 혼합물을 포함한다.

[0183] 화학식 1의 헤테로아릴 및 헤테로시클릭 유기 화합물의 일부 특정 실시예들은 하기 표 1과 같다:

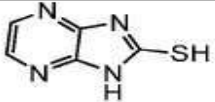
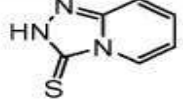
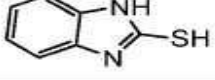
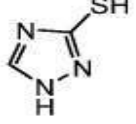
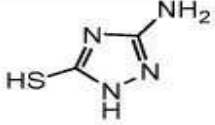
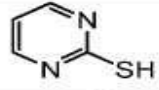
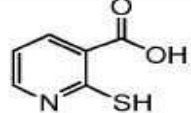
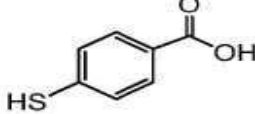
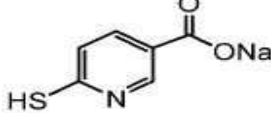
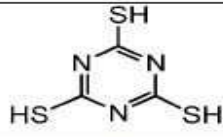
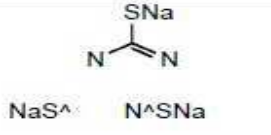
표 1

번호	화합물 이름	화합물 구조
1	2-메르캅토벤즈이미다졸 (MBI)	
2	3a,4-다이하이드로티아졸로 [4,5-c]피리딘-2-티올	

[0184]

3	벤조[d]티아졸-2(3H)-티온	
4	1,2,4-트리아졸-3-티올	
5	2-아미노,5-메르캅토-1,2,4-티아다리아졸	
6	5-메틸-2-메르캅토-1,3,4-티아다리아졸	
7	4-아미노-5-페닐-3-메르캅토-1,2,4-트리아졸	
8	5-메르캅토-1-테트라졸-1H-아세트산, 소듐 염	
9	4,6-다이아미노-2-메르캅토피리미딘	
10	4-아미노-2-메르캅토피리미딘	
11	2,6-다이아미노-4-메르캅토피리미딘	
12	9H-퓨린-8-티올	

[0185]

13	1H-이미다조[4,5-b]피라진-2-티올	
14	S-트리아졸로-[4,3-a]피리딘-3-티온	
15	2-메르캅토벤즈이미다졸	
16	1,2,4-트리아졸-3-티올	
17	3-아미노-5-메르캅토-1,2,4-트리아졸	
18	2-메르캅토피리미딘	
19	2-메르캅토니코티네이트, 소듐 염	
20	4-메르캅토벤조에이트, 소듐 염	
21	6-메르캅토니코티네이트, 소듐 염	
22	1,3,5-트리아진-2,4,6-트리티올	
23	1,3,5-트리아진-2,4,6-트리티올, 트리소듐 염	

[0186]

[0187]

[0188]

금속 염

부식 억제 조성물의 금속 염 또는 혼합된 금속 염은 알칼리 토금속, 전이 금속 및 희토류 금속으로부터 선택될 수 있으며, 예를 들어 Zn, La, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Ce, Co, Y, Bi, Cd, Pb, Ag, Sb, Sn, Cu, Fe, Ni, Li, Ca, Sr, Mg, Zr, Nd, Ba, Sc, 및 이의 임의의 조합들로 이루어진 군에서 선택될 수 있다. 부식 억제 조성물은 적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염을 포함할 수 있으며, 여기서 금속은 Zn, La, Pr, Ce, Co, Y, Ca, Sr, Ba, Sc, 및 Zr로 이루어진 군에서 선택된다. 혼합된 금속 염은 둘 이상의 금속을 포함하는 조합에 의해 제공될 수 있다. 예를 들어, 혼합된 금속 염은 임의의 둘 이상의 Zn, La, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Ce, Co, Y, Bi, Cd, Pb, Ag, Sb, Sn, Cu, Fe, Ni, Li, Ca, Sr, Mg, Zr, Nd, Ba, 및 Sc로부터 선택된 둘 이상의 금속을 포함할 수 있다. 금속은 적어도 하나의 Zn, Pr 및 Ce로부터 선택될 수 있다. 금속은 Zn일 수 있다. 금속은 Ce일 수 있다. 금속은 Pr일 수 있다. 사용될 수 있는 염의 일부 실시예는 질산염, 염화염 및 아세트산 염이다. 금속은 상이한 산화 상태를 가질 수 있다. 예를 들어, Zn에 대한 전형적인 산화 상태는 +2이다. Pr에 대한 전형적인 산화 상태는 +2, +3 및/또는 +4이다. Ce에 대한 전형적

인 산화 상태는 +2, +3 및 +4이다. 본 명세서에 개시된 금속 염 또는 혼합된 금속 염의 그룹과 다양한 조합은 본 발명의 조성물에서 사용될 수 있다.

[0189] **부식에 대한 기재 보호**

[0190] 본 명세서에 개시된 것과 같이 부식 억제제 또는 그의 조성물에 의해 부식으로부터 보호될 수 있는 기재는 금속 기재일 수 있다. 금속 기재는 금속인 표면의 적어도 일부, 예를 들어 금속인 외부 표면의 일부를 갖는 임의의 기재 물질을 포함할 수 있다. 금속 기재는 부식으로부터 보호를 필요로 하는 임의의 금속을 포함할 수 있다. 금속 기재는 알루미늄, 예를 들어 알루미늄 합금으로부터 선택된 금속 또는 합금을 포함할 수 있다. 금속 기재는 알루미늄 합금, 예를 들어 구리, 마그네슘, 망간, 실리콘, 주석 및 아연으로 구성된 군으로부터 선택된 하나 이상의 금속과 함께 알루미늄 합금일 수 있다. 알루미늄 합금은 구리를 포함하는 합금일 수 있다. 금속 기재는 구리-합유 알루미늄 합금과 같이, 구리-합유 합금일 수 있다. 합금에서 구리의 함량은 약 20% 미만, 약 18% 미만, 약 16% 미만, 약 14% 미만, 약 12% 미만, 약 10% 미만, 약 8% 미만, 또는 약 6% 미만일 수 있다. 알루미늄 합금은 우주항공(aerospace) 합금, 예를 들어 AA2XXX 및 AA7XXX 유형일 수 있다. 예를 들어, 알루미늄 합금은 AA2024 및 AA7075 유형일 수 있다. 알루미늄 합금은 자동차의 합금, 예를 들어 AA6XXX 유형일 수 있다. 알루미늄 합금은 해양의(marine) 합금, 예를 들어 AA5XXX 유형일 수 있다.

[0191] **조성물과 제제**

[0192] 본 발명은 또한 (a) 본 명세서에 개시한 바와 같이, 화학식 1의 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물 및 (b) 본 명세서에 개시한 바와 같이 희토류 금속, 알칼리 토금속 및 전이 금속으로부터 선택되는 적어도 하나의 금속, 또는 그의 임의의 실시형태들을 포함하는 부식 억제용 조성물에 관한 것이다. 본 명세서에서, 조성물에서의 (a) 및 (b)의 임의의 조합에 대한 언급은 하나의 조성물에서 (a) 및 (b)의 개별 성분이 함께 있음을 의미하며 그의 반응 생성물을 의미하는 것은 아니다.

[0193] 예를 들어, 부식 억제 조성물은 (a) 본 명세서 또는 그의 임의의 실시형태에 개시한 바와 같이, 화학식 1의 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물 및 (b) 적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염을 포함할 수 있으며, (b)에서 금속은 Zn, La, Pr, Ce, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Co, Y, Ca, Sr, Ba, Sc, 및 Zr으로 구성된 군으로부터 선택된다. 예를 들어, 적어도 하나의 금속은 Zn, Ce 및 Pr의 임의의 하나일 수 있으며; 적어도 하나의 금속은 Zn일 수 있으며; 적어도 하나의 금속은 Ce일 수 있으며; 또는 적어도 하나의 금속은 Pr일 수 있다.

[0194] 부식 억제 조성물은 (a) 본 명세서 또는 그의 임의의 실시형태에 개시한 바와 같이, 화학식 1(a)의 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물 또는 그의 염 및 (b) 적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염을 포함할 수 있으며, (b)에서 금속은 Zn, La, Pr, Ce, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Co, Y, Ca, Sr, Ba, Sc, 및 Zr으로 구성된 군으로부터 선택된다.

[0195] 부식 억제 조성물은 (a) 본 명세서 또는 그의 임의의 실시형태에 개시한 바와 같이, 화학식 1(a)(i)의 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물 또는 그의 염, 및 (b) 적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염을 포함할 수 있으며, (b)에서 금속은 Zn, Pr 및 Ce으로 구성된 군으로부터 선택된다.

[0196] 부식 억제 조성물은 (a) 본 명세서 또는 그의 임의의 실시형태에 개시한 바와 같이, 화학식 1(b)의 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물 또는 그의 염, 및 (b) 적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염을 포함할 수 있으며, (b)에서 금속은 Zn, La, Pr, Ce, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Co, Y, Ca, Sr, Ba, Sc, 및 Zr으로 이루어진 군에서 선택된다.

[0197] 부식 억제 조성물은 (a) 본 명세서 또는 그의 임의의 실시형태에 개시한 바와 같이, 화학식 1(b)(i)의 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물 또는 그의 염, 및 (b) 적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염을 포함할 수 있으며, (b)에서 금속은 Zn, Pr 및 Ce으로 이루어진 군에서 선택된다.

[0198] 부식 억제 조성물은 (a) 본 명세서 또는 그의 임의의 실시형태에 개시한 바와 같이, 화학식 1(b)(ii)의 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물 또는 그의 염, 및 (b) 적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염을 포함할 수 있으며, (b)에서 금속은 Zn, Pr 및 Ce으로 이루어진 군에서 선택된다.

[0199] 부식 억제제 및 금속 염 또는 혼합된 금속 염들이 다양한 농도 및 비율 범위로 제공되며 여기서 추가적인 장점들이 얻어질 수 있다. 금속 염 또는 혼합된 금속 염과 조합하여 사용되는 경우, 부식 억제제의 농도는 약 $5 \times 10^{-}$

1M 미만, 약 $2 \times 10^{-1}\text{M}$ 미만, 약 10^{-1}M 미만, 약 $5 \times 10^{-2}\text{M}$ 미만, 약 $2 \times 10^{-2}\text{M}$ 미만, 약 10^{-2}M 미만, 약 $5 \times 10^{-3}\text{M}$ 미만, 약 $2 \times 10^{-3}\text{M}$ 미만, 또는 약 10^{-3}M 미만일 수 있다. 금속 염 또는 혼합된 금속 염과 조합하여 사용되는 경우, 부식 억제제의 농도 범위는 약 $5 \times 10^{-1}\text{M}$ 내지 약 10^{-8}M , 약 $2 \times 10^{-1}\text{M}$ 내지 약 $2 \times 10^{-8}\text{M}$, 약 10^{-1}M 내지 약 $5 \times 10^{-8}\text{M}$, 약 $5 \times 10^{-2}\text{M}$ 내지 약 10^{-7}M , 약 $2 \times 10^{-2}\text{M}$ 내지 약 $2 \times 10^{-7}\text{M}$, 약 10^{-2}M 내지 약 $5 \times 10^{-7}\text{M}$, 약 $5 \times 10^{-3}\text{M}$ 내지 약 10^{-6}M , 약 $2 \times 10^{-3}\text{M}$ 내지 약 $2 \times 10^{-6}\text{M}$, 약 10^{-3}M 내지 약 $5 \times 10^{-6}\text{M}$, 또는 약 $5 \times 10^{-4}\text{M}$ 내지 약 10^{-5}M 일 수 있다. 부식 억제제와 조합하여 사용되는 경우, 금속 염 또는 혼합된 금속 염의 농도는 약 $5 \times 10^{-1}\text{M}$ 미만, 약 $2 \times 10^{-1}\text{M}$ 미만, 약 10^{-1}M 미만, 약 $5 \times 10^{-2}\text{M}$ 미만, 약 $2 \times 10^{-2}\text{M}$ 미만, 약 10^{-2}M 미만, 약 $5 \times 10^{-3}\text{M}$ 미만, 약 $2 \times 10^{-3}\text{M}$ 미만, 또는 약 10^{-3}M 미만일 수 있다. 부식 억제제와 조합하여 사용되는 경우, 금속 염 또는 혼합된 금속 염의 농도 범위는 약 $5 \times 10^{-1}\text{M}$ 내지 약 10^{-8}M , 약 $2 \times 10^{-1}\text{M}$ 내지 약 $2 \times 10^{-8}\text{M}$, 약 10^{-1}M 내지 약 $5 \times 10^{-8}\text{M}$, 약 $5 \times 10^{-2}\text{M}$ 내지 약 10^{-7}M , 약 $2 \times 10^{-2}\text{M}$ 내지 약 $2 \times 10^{-7}\text{M}$, 약 10^{-2}M 내지 약 $5 \times 10^{-7}\text{M}$, 약 $5 \times 10^{-3}\text{M}$ 내지 약 10^{-6}M , 약 $2 \times 10^{-3}\text{M}$ 내지 약 $2 \times 10^{-6}\text{M}$, 약 10^{-3}M 내지 약 $5 \times 10^{-6}\text{M}$, 또는 약 $5 \times 10^{-4}\text{M}$ 내지 약 10^{-5}M 일 수 있다.

[0200] 하나의 실시형태에서, 부식 억제 조성물에서 금속 염 : 부식 억제제의 비율은 부식 억제제와 비교하여 과다한 금속 염이 제공된다. 예를 들어, 부식 억제 조성물에서 금속 염 : 부식 억제제의 비율은 약 1:1 초과, 약 1.1:1 초과, 약 1.2:1 초과, 약 1.3:1 초과, 약 1.4:1 초과, 약 1.5:1 초과, 약 1.6:1 초과, 약 1.7:1 초과, 약 1.8:1 초과, 약 1.9:1 초과, 약 2:1 초과, 약 3:1 초과, 약 4:1 초과, 약 5:1 초과, 약 6:1 초과, 약 7:1 초과, 약 8:1 초과, 약 9:1 초과, 또는 약 10:1 초과일 수 있다. 부식 억제 조성물에서 금속 염 : 부식 억제제의 비율은 약 45:1 미만, 약 40:1 미만, 약 35:1 미만, 약 30:1 미만, 약 25:1 미만, 약 20:1 미만, 약 15:1 미만, 또는 약 10:1 미만일 수 있다. 부식 억제 조성물에서 금속 염 : 부식 억제제의 비율은 약 1:1 초과 내지 약 45:1, 약 1.5:1 내지 약 40:1, 약 2:1 내지 약 35:1, 약 2.5:1 내지 약 30:1, 약 3:1 내지 약 25:1, 약 3.5:1 내지 약 20:1, 약 4:1 내지 약 15:1, 또는 약 5:1 내지 약 10:1의 범위로 제공될 수 있다. 예를 들어, 부식 억제 조성물에서 금속 염 : 부식 억제제의 비율은 약 1.1:1 내지 약 45:1, 약 1.2:1 내지 약 40:1, 약 1.3:1 내지 약 35:1, 약 1.4:1 내지 약 30:1, 약 1.5:1 내지 약 25:1, 약 1.6:1 내지 약 20:1, 약 1.7:1 내지 약 15:1, 약 1.8:1 내지 약 10:1, 약 1.9:1 내지 약 9:1, 또는 약 2:1 내지 약 8:1의 범위에서 제공될 수 있다.

[0201] 부식 억제 조성물은 금속 기재와 같은 다양한 기재로의 적용 및 사용에 적합하며, 예를 들어 코팅 조성물과 같이 제공될 수 있다. 조성물은 기재의 유형과 함께 특정 용도에 적합한 부식 억제제 또는 하나 이상의 다른 첨가제를 포함할 수 있다.

[0202] 부식 억제 조성물은 필름-형성 유기 폴리머를 포함하는 코팅 조성물일 수 있다. 코팅 조성물은 도료 조성물 (paint composition)일 수 있다. 코팅 조성물은 하나 이상의 수지, 예를 들어 에폭시계 수지를 포함할 수 있다. 코팅 조성물은 도료 조성물, 예를 들어 에폭시 수지계 도료 조성물일 수 있다.

[0203] 코팅 조성물은 파우더(powder) 코팅 조성물, 예를 들어 본 명세서에 개시된 것과 같은 알루미늄 합금 또는 강철을 포함하는 다양한 금속 기재의 파우더 코팅에서의 사용에 적합한 파우더 코팅 조성물일 수 있다.

[0204] 코팅 조성물은 분무 조성물(spray composition)일 수 있다.

[0205] 코팅 조성물은 축축한(wet) 또는 시간이 지나면서 건조 또는 경화, 즉 용매(solvent)가 증발된 "충분히 경화되지 않은" 상태에서 기재에 적용될 수 있다. 코팅은 자연적으로 또는 가속화된 수단, 예를 들어 필름 또는 "경화된" 도료를 형성하기 위해 자외선 경화된 시스템에 의해서 건조 또는 경화될 수 있다. 코팅은 또한 접착제와 같이, 어느 정도(semi) 또는 충분히 경화된 상태에서 적용될 수 있다.

[0206] 부식 억제 조성물은 또한 캡슐화된 부식 억제 조성물일 수 있다. 캡슐화된 부식 억제 조성물은 본 명세서에 개시한 바와 같이 화학식 1의 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물 및 본 명세서 또는 그의 임의의 실시형태에서 개시한 바와 같이 희토류 금속, 알칼리 금속 및 전이 금속으로부터 선택되는 적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염을 캡슐화하는 적어도 하나의 폴리머 필름을 포함할 수 있다. 예를 들어, 캡슐화된 부식 억제 조성물은 적어도 하나의 폴리머 필름; 적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염, 여기서 금속은 Zn, La, Pr, Ce, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Co, Y, Ca, Sr, Ba, Sc, 및 Zr으로 이루어진 군에서 선택되며; 및 본 명세서 또는 그의 임의의 실시형태에서 개시한 바와 같이 화학식 1의 적어도 하나의 유기 헤테로사이

클릭 화합물을 포함할 수 있다. 폴리머 필름은 물과의 상호작용에서 입자 이온의 통제된 분산을 허용하기 위해서 미리 결정된 두께 및 투과성을 포함할 수 있다.

- [0207] 부식 억제 조성물은 부식 억제 키트일 수 있다. 부식 억제 키트는 둘 이상의 성분을 포함할 수 있으며, 예를 들어 금속 기재 위에 적용하기 전에 화합물이 혼합되어야 한다는 지시를 포함할 수 있다. 예를 들어, 제1 성분은 본 명세서에 개시한 바와 같이 화학식 1의 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물 및 적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염일 수 있으며, 여기서 금속은 본 명세서 또는 그의 임의의 실시형태에서 개시한 바와 같이 희토류 금속, 알칼리 금속 및 전이 금속으로부터 선택되며; 제2 성분은 코팅 조성물, 예를 들어 도료 조성물일 수 있다. 도료 조성물은 에폭시계 도료 조성물일 수 있다. 제3 성분은 첨가제, 예를 들어 수지용 경화제 (hardener) 또는 본 명세서에 개시한 임의의 첨가제일 수 있다.
- [0208] 조성물은 일련의 재료들, 및/또는 성분들을 포함할 수 있으며, 또한 코팅 조성물을 제조하기 위해서 재료들, 및/또는 성분들을 함께 혼합하고 준비하는 단계에 대한 일련의 지시사항들을 포함할 수 있다.
- [0209] 조성물은 하나 이상의 첨가제, 예컨대 안료, 필러 및 연장제를 포함할 수 있다. 본 명세서에 개시된 부식 억제제와 함께 조합(combine)할 수 있는 적합한 첨가제의 예는 예를 들어, 바인더, 용매, 안료(용해성 또는 비용해성 연장제, 필러, 부식 억제 안료 등을 포함), 용매, 첨가제(예를 들어, 경화제, 계면활성제, 염료, 아미노산 등), 등을 포함한다. 일부 첨가제들은 또한 안료로 적절히 간주될 수 있으며, 그 반대(예를 들어, 소광제 (matting agents))도 가능하다. 보다 구체적으로, 상기 "첨가제"는 이에 제한되지는 않지만, 글리신, 아르기닌, 메티오닌, 및 아미노산의 유도체, 예컨대 메티오닌 설폭사이드, 메틸 설폭사이드, 및 요오드화물/요오드산염, 젤라틴 및 젤라틴 유도체, 예컨대 동물 및 생선 젤라틴, 선형 및 사이클릭 텍스티린 예컨대, 알파 및 베타 사이클로텍스티린, 트리플릭산, 트리플레이트(triflates), 아세테이트, 탈크, 카올린(kaolin), 유기-계 이온성 교환 수지, 예컨대 유기-계 양이온성 및 음이온성 교환 수지, 염, 산화물, 및/또는 희토류 물질의 혼합된 산화물과 반응하거나 선-교환하는 유기-계 이온성 교환 수지, 및 금속 설페이트, 예컨대 희토류 물질의 설페이트, 마르네슘 설페이트, 칼슘 설페이트(무수(anhydrous) 및 수화된 형태), 스트론튬 설페이트, 바륨 설페이트, 등 및 그의 조합을 포함한다.
- [0210] 조성물은 본 명세서에 개시된 임의의 하나 이상의 성분 또는 첨가제로 구성되거나 포함할 수 있다.
- [0211] 조성물은 또한 다른 첨가제들 예컨대 리올로지 조절제(rheology modifiers), 필러, 강화제(toughener), 열적 또는 UV 안정화제, 발화 지연제(fire retardants), 윤활제, 표면 활성제를 포함할 수 있다. 첨가제(들)은 통상적으로 용매(들), 물질(들) 및 첨가제(들)의 조합 또는 활성화 처리의 총 중량 기준으로 약 10% 미만의 양으로 존재한다. 예시들은:
- [0212] (a) 하이드록시프로필 메틸 셀룰로오스(예를 들어, 메토셀(Methocel) 311, 도우(Dow)), 개질된 우레아(예를 들어, Byk 411, 410) 및 폴리하이드록시카르복실산 아마이드(예를 들어, Byk 405)와 같은 리올로지 조절제;
- [0213] (b) 다이카르복실산의 에스테르(예를 들어, 루솔반(Lusolvan) FBH, BASF) 및 글리콜 에테르(예를 들어, 도와놀(Dowanol), 도우(Dow))와 같은 필름 형성자;
- [0214] (c) 플루오로화학의 계면활성제(예를 들어, 3M 플루오라드(Fluorad)) 및 폴리에테르 개질된 폴리-다이메틸-실록산(예를 들어, Byk 307, 333)과 같은 습윤제;
- [0215] (d) 지방산 유도체(예를 들어, 베르마돌(Bermadol) SPS 2543, Akzo) 및 사차 암모늄염과 같은 계면활성제;
- [0216] (e) 일차 알코올(예를 들어, 메르폴(Merpol) 4481, 듀퐁(Dupont)) 및 알킬페놀-포름알데하이드-바이설파이드 축합물(condensate)(예를 들어, 클라리언트(Clarants) 1494)에 기초한 비이온성 계면활성제와 같은 분산제 (dispersant);
- [0217] (f) 향기포제;
- [0218] (g) 포스페이트 에스테르(예를 들어, ADD APT, 안티코어(Anticor) C6), (2-벤조티아졸릴티오) 숙신산(예를 들어 이가코어(Irgacor) 153 CIBA)의 알킬암모늄염 및 트리아진 다이티올과 같은 부식 방지 시약;
- [0219] (h) 벤즈이미다졸 유도체(예를 들어, Bayer, Preventol BCM, 살생성 필름 보호(biocidal film protection))와 같은 안정화제;
- [0220] (i) 플루오로카본-변형 폴리머(예를 들어, EFKA 3777)와 같은 균전제(levelling agent);

- [0221] (j) 형광체(Royale Pigment and chemicals)와 같은 안료 또는 염료;
- [0222] (k) 플루오로세인과 같은 유기 및 무기 염료; 및
- [0223] (l) 염화리튬, 염화아연, 염화스트론튬, 염화칼슘 및 염화알루미늄과 같은 루이스산을 포함한다.
- [0224] (m) 단일 또는 선택적으로 첨가될 수 있는 불꽃 전파, 열 발생 및/또는 연기 발생
- [0225] 를 지연시키는 적합한 난연제는:
 - [0226] · 포스페이트, 폴리 포스페이트, 포스파이트(phosphites), 포스파진(phosphazine) 및 포스핀 기능성 기 함유 분자와 같은 인 유도체, 예를 들어 멜라민 포스페이트, 다이멜라민 포스페이트, 멜라민 폴리포스페이트, 암모니아 포스페이트, 암모니아 폴리포스페이트, 멘타에리스톨 포스페이트, 멜라민 포스파이트 및 트리페닐 포스핀.
 - [0227] · 멜라민, 멜라민 시아누레이트, 멜라민 프탈레이트, 멜라민 프탈이미드, 멜람(melam), 멜렘(melem), 멜론(melon), 멜람 시아누레이트, 멜렘 시아누레이트, 멜론 시아누레이트, 헥사메틸렌 테트라아민, 이미다졸, 아데닌, 구아닌, 시토신 및 티민과 같은 질소 함유 유도체.
 - [0228] · 암모니아 보레이트 및 아연 보레이트와 같은 보레이트 기능기 함유 분자.
 - [0229] · 펜타에리스톨, 폴리에틸렌 알코올, 폴리글리콜 및 카보하이드레이트와 같은 둘 이상의 알코올 기를 함유하는 분자, 예를 들어 글루코스, 수크로스 및 전분.
 - [0230] · 금속 하이드록사이드, 예를 들어 마그네슘 하이드록사이드 및 알루미늄 하이드록사이드와 같은 불연성의 분해 가스를 흡열반응으로 방출하는 분자.
 - [0231] · 확장 가능한 그래파이트.
- [0232] **부식 억제 조성물을 선택하는 방법**
- [0233] 본 발명은 또한 부식을 억제하기 위한 부식 억제 조성물을 선택하기 위한 방법에 관한 것이다.
- [0234] 상기 방법의 주요 목적은 고속 처리 탐색 기술을 사용하여, (a) 본 명세서에 개시된 것과 같이 화학식 1의 적어도 하나의 유기 헤테로사이클릭 화합물; 및 (b) 적어도 하나의 금속 염 또는 혼합된 금속 염을 선택하는 것이며, 상기 (b)에서 금속은 본 명세서 또는 그의 임의의 실시형태에서 개시한 것과 같이 희토류 금속, 알칼리 금속 및 전이 금속으로부터 선택된다.
- [0235] 빠른 탐색 방법은 이하의 장점들을 제공한다: (1) 예를 들어, 실험마다 시간을 감소시키고 단위 시간 당 실험의 횟수를 증가시키는 것과 같이, 빠르다, (2) 실험마다 제조 시간을 감소시키고 또한 결과 분석에 소요되는 시간을 감소시킨다, (3) 현존하는 부식 수준 또는 검사법과 관련이 있다. 환경의 관점으로부터, 사용된 물질 및 용액의 양과 필요로 하는 처리는 본 명세서에 개시된 빠른 탐색 방법을 사용하여 상당히 감소된다.
- [0236] 부식 억제 조성물의 빠른 탐색은 금속 기재의 표면과 접촉하는 80-8 웰 폴리다이메틸실록산 블록(PDMS)(eighty-eight well polydimethylsiloxane block)에서 24시간 동안 실온 및 염화나트륨(NaCl) 용액에서 발생할 수 있다. 금속 기재는 구리-함유 알루미늄 합금과 같은 구리-함유 합금일 수 있다. NaCl 용액은 약 10^{-1} 내지 약 10^{-6} M의 농도에서 제조될 수 있다. 빠른 탐색 검사는 이미징을 통해 부식 억제 조성물의 부식 분석을 가능하게 한다. 과정을 위해 하나의 이미지에서 모든 부식 손실을 포착할 필요가 있기 때문에, 이미지 과정은 상기 기술을 위해 중요하다. 반정량적인 이미지 분석 기술은 시각적으로 보여지는 부식을 맞추기(match) 위해 부식을 동시에 분석한다. 상이한 조명 조건 하에서 샘플의 두 개의 사진은 생성되는 부식을 명도 값으로 전환하기 위해서 Adobe PhotoShop[®]에서 층 및 정반대 사진을 사용하여 조합되며, 다음 샘플 마스크 및 배경 마스크 이미지들은 분석용으로 작성된다. 관찰된 부식은 서로 10% 안에서 지속적으로 플레이트 당 복수의 반복 및 4 플레이트 이상의 반복과 함께 0-10 규모의 부식 값으로 전환된다.
- [0237] **실시예들**
- [0238] 본 발명을 보다 명확하게 이해하기 위해서, 본 발명의 실시형태가 하기 비제한적인 실험 물질, 방법론, 및 실시예들의 참조와 함께 하기와 같이 보다 구체적으로 개시된다.
- [0239] **부식 억제 조성물의 빠른 탐색을 위한 일반적인 절차**
- [0240] 부식 억제 조성물은 본 명세서에 개시한 바와 같이, 적어도 하나의 부식 억제제와 적어도 하나의 금속 염 또는

혼합된 금속 염의 혼합물을 포함한다. 각각의 금속 염 또는 혼합된 금속 염을 $10^{-3}M$, $5 \times 10^{-4}M$, $2 \times 10^{-4}M$, $10^{-4}M$, $5 \times 10^{-5}M$, $2 \times 10^{-5}M$, 및 $10^{-5}M$ 의 농도의 탈염수에서 0.1M NaCl의 용액으로 첨가하였다. 각각의 부식 억제제를 $10^{-3}M$, $5 \times 10^{-4}M$, $2 \times 10^{-4}M$, $10^{-4}M$, $5 \times 10^{-5}M$, $2 \times 10^{-5}M$, 및 $10^{-5}M$ 의 농도의 탈염수에서 0.1M NaCl의 용액으로 첨가하였다.

- [0241] 최종 부피 200 μ L의 부식 억제 조성물을 금속 기재의 표면과 접촉하는 80-8 웰 폴리다이메틸실록산 블록(PDMS)에 첨가하였다. 부식 억제 조성물은 금속 염 또는 혼합된 금속 염과 부식 억제제의 다양한 조합을 포함하며, 여기서 금속 염 : 부식 억제제의 범위는 1:1 내지 45:1을 포함한다.
- [0242] 다음 부식 실험을 실온(20°C)에서 24시간 동안 진행하였다. 실험하는 동안에, 공기의 확산을 허용하는 동안 증발로부터 부식 억제 조성물을 방지하기 위해서 플라스틱 필름으로 구멍(holes)을 느슨하게 덮었다.
- [0243] 24시간 기간의 마지막에, 어셈블리를 반대로 하였고, 부식 억제 조성물을 버렸으며, 각각의 웰을 탈염수로 세척하였다. 어셈블리를 분해하고 PDMS 고무를 제거하였다. 플레이트에서 부식 원들을 다시 세척하고 과도한 액체를 압축 공기로 제거하였다. 이미징(imaging) 전에 실온에서 자동-지시 실리카 겔을 함유하는 데스케이터에서 12시간 동안 건조를 위해 금속 기재를 남겨두었다.
- [0244] 상이한 조명 조건 하에서 샘플의 두 개의 사진을, 생성되는 부식을 명도 값으로 전환하기 위해서 Adobe PhotoShop®에서 층 및 반대 이미지들을 사용하여 결합시키고, 다음 샘플 마스크 및 배경 마스크 이미지를 분석용으로 만들었다. 명도 값은 0(가장 어두움, 가장 적은 양의 부식) 내지 100(가장 밝음, 가장 많은 양의 부식)을 차지한다. 관찰된 부식은 서로 10% 안에서 지속적으로 플레이트 당 복수의 반복 및 4 플레이트 이상의 반복과 함께 0-10 규모의 부식 값으로 전환된다. 전형적으로, 0의 값은 가장 적은 양의 부식을 나타내며, 10의 값은 가장 많은 양의 부식을 나타낸다.
- [0245] 도 1a 및 도 1b에서, 다양한 부식 억제 조성물에 대한 24시간 웰스(wells) 빠른 탐색 방법으로부터 0-10 규모의 부식 값의 표를 나타내었다. 부식 억제 조성물의 선택은 (a) 화학식 1의 부식 억제제, 화합물 12, 13, 16 및 17, 및 (b) 금속 염 또는 혼합된 금속 염, 본 명세서 및 다양한 농도에서 제시한 바와 같이, Ce 및 Zn로부터 선택된다. 부식 값의 비교를 또한 부식 억제제 및 금속 염 또는 혼합된 금속 염의 동일한 선택에 대해 나타내었다. 도 1a 및 도 1b는 구리-함유 알루미늄 합금, AA7075에서 수행된 빠른 탐색 방법을 보여준다. 도 1b에서 보여준 금속 염의 농도는 도 1a에서 보여준 금속 염의 농도와 동일하다.
- [0246] 도 2a 및 도 2b에서, 다양한 부식 억제 조성물에 대한 24시간 웰스 빠른 탐색 방법으로부터 0-10 규모의 부식 값의 표를 나타내었다. 부식 억제 조성물의 선택은 (a) 화학식 1의 부식 억제제, 화합물 12, 13, 16 및 17, 및 (b) 금속 염, 본 명세서 및 다양한 농도에서 제시한 바와 같이, Ce 및 Zn로부터 선택된다. 부식 값의 비교를 또한 부식 억제제 및 금속 염 또는 혼합된 금속 염의 동일한 선택에 대해 나타내었다. 도 2a 및 도 2b는 구리-함유 알루미늄 합금, AA2024에서 수행된 빠른 탐색 방법을 보여준다. 도 2b에서 보여준 금속 염의 농도는 도 2a에서 보여준 금속 염의 농도와 동일하다.
- [0247] 실시예 1a
- [0248] $CeCl_3 \cdot 7H_2O$ 및 화합물 16을 준비하였고, AA7075 유형 금속 기재와 접촉하게 된 80-80 웰 PDMS로 옮기고, 상기에 서 설명한 일반적인 과정에 따라서 분석하였다. 도 1a는 조합에 의해 제공되는 장점들을 지지하는 결과를 보여주며, 특히 조합이 다양한 농도 범위에서 시너지 효과를 내는 것을 보여준다.
- [0249] 실시예 1b
- [0250] $ZnCl_2$ 및 화합물 16을 준비하였고, AA7075 유형 금속 기재와 접촉하게 된 80-80 웰 PDMS로 옮기고, 상기에서 설명한 일반적인 과정에 따라서 분석하였다. 도 1a는 조합에 의해 제공되는 장점들을 지지하는 결과를 보여주며, 특히 조합이 다양한 농도 범위에서 시너지 효과를 내는 것을 보여준다.
- [0251] 실시예 2a
- [0252] $CeCl_3 \cdot 7H_2O$ 및 화합물 17을 준비하였고, AA7075 유형 금속 기재와 접촉하게 된 80-80 웰 PDMS로 옮기고, 상기에서 설명한 일반적인 과정에 따라서 분석하였다. 도 1a는 조합에 의해 제공되는 장점들을 지지하는 결과를 보여주며, 특히 조합이 다양한 농도 범위에서 시너지 효과를 내는 것을 보여준다.
- [0253] 실시예 2b

- [0254] ZnCl₂ 및 화합물 17을 준비하였고, AA7075 유형 금속 기재와 접촉하게 된 80-80 웰 PDMS로 옹기고, 상기에서 설명한 일반적인 과정에 따라서 분석하였다. 도 1a는 조합에 의해 제공되는 장점들을 지지하는 결과를 보여주며, 특히 조합이 다양한 농도 범위에서 시너지 효과를 내는 것을 보여준다.
- [0255] 실시예 3a
- [0256] CeCl₃-7H₂O 및 화합물 12를 준비하였고, AA7075 유형 금속 기재와 접촉하게 된 80-80 웰 PDMS로 옹기고, 상기에서 설명한 일반적인 과정에 따라서 분석하였다. 도 1b는 조합에 의해 제공되는 장점들을 지지하는 결과를 보여주며, 특히 조합이 다양한 농도 범위에서 시너지 효과를 내는 것을 보여준다.
- [0257] 실시예 3b
- [0258] ZnCl₂ 및 화합물 12를 준비하였고, AA7075 유형 금속 기재와 접촉하게 된 80-80 웰 PDMS로 옹기고, 상기에서 설명한 일반적인 과정에 따라서 분석하였다. 도 1b는 조합에 의해 제공되는 장점들을 지지하는 결과를 보여주며, 특히 조합이 다양한 농도 범위에서 시너지 효과를 내는 것을 보여준다.
- [0259] 실시예 4a
- [0260] CeCl₃-7H₂O 및 화합물 13을 준비하였고, AA7075 유형 금속 기재와 접촉하게 된 80-80 웰 PDMS로 옹기고, 상기에서 설명한 일반적인 과정에 따라서 분석하였다. 도 1b는 조합에 의해 제공되는 장점들을 지지하는 결과를 보여주며, 특히 조합이 다양한 농도 범위에서 시너지 효과를 내는 것을 보여준다.
- [0261] 실시예 4b
- [0262] ZnCl₂ 및 화합물 13을 준비하였고, AA7075 유형 금속 기재와 접촉하게 된 80-80 웰 PDMS로 옹기고, 상기에서 설명한 일반적인 과정에 따라서 분석하였다. 도 1b는 조합에 의해 제공되는 장점들을 지지하는 결과를 보여주며, 특히 조합이 다양한 농도 범위에서 시너지 효과를 내는 것을 보여준다.
- [0263] 실시예 5a
- [0264] CeCl₃-7H₂O 및 화합물 16을 준비하였고, AA2024 유형 금속 기재와 접촉하게 된 80-80 웰 PDMS로 옹기고, 상기에서 설명한 일반적인 과정에 따라서 분석하였다. 도 2a는 조합에 의해 제공되는 장점들을 지지하는 결과를 보여주며, 특히 조합이 다양한 농도 범위에서 시너지 효과를 내는 것을 보여준다.
- [0265] 실시예 5b
- [0266] ZnCl₂ 및 화합물 16을 준비하였고, AA2024 유형 금속 기재와 접촉하게 된 80-80 웰 PDMS로 옹기고, 상기에서 설명한 일반적인 과정에 따라서 분석하였다. 도 2a는 조합에 의해 제공되는 장점들을 지지하는 결과를 보여주며, 특히 조합이 다양한 농도 범위에서 시너지 효과를 내는 것을 보여준다.
- [0267] 실시예 6a
- [0268] CeCl₃-7H₂O 및 화합물 17을 준비하였고, AA2024 유형 금속 기재와 접촉하게 된 80-80 웰 PDMS로 옹기고, 상기에서 설명한 일반적인 과정에 따라서 분석하였다. 도 2a는 조합에 의해 제공되는 장점들을 지지하는 결과를 보여주며, 특히 조합이 다양한 농도 범위에서 시너지 효과를 내는 것을 보여준다.
- [0269] 실시예 6b
- [0270] ZnCl₂ 및 화합물 17을 준비하였고, AA2024 유형 금속 기재와 접촉하게 된 80-80 웰 PDMS로 옹기고, 상기에서 설명한 일반적인 과정에 따라서 분석하였다. 도 2a는 조합에 의해 제공되는 장점들을 지지하는 결과를 보여주며, 특히 조합이 다양한 농도 범위에서 시너지 효과를 내는 것을 보여준다.
- [0271] 실시예 7a
- [0272] CeCl₃-7H₂O 및 화합물 12를 준비하였고, AA2024 유형 금속 기재와 접촉하게 된 80-80 웰 PDMS로 옹기고, 상기에서 설명한 일반적인 과정에 따라서 분석하였다. 도 2b는 조합에 의해 제공되는 장점들을 지지하는 결과를 보여주며, 특히 조합이 다양한 농도 범위에서 시너지 효과를 내는 것을 보여준다.
- [0273] 실시예 7b

- [0274] ZnCl₂ 및 화합물 12를 준비하였고, AA2024 유형 금속 기재와 접촉하게 된 80-80 웰 PDMS로 옮기고, 상기에서 설명한 일반적인 과정에 따라서 분석하였다. 도 2b는 조합에 의해 제공되는 장점들을 지지하는 결과를 보여주며, 특히 조합이 다양한 농도 범위에서 시너지 효과를 내는 것을 보여준다.
- [0275] 실시예 8a
- [0276] CeCl₃-7H₂O 및 화합물 13을 준비하였고, AA2024 유형 금속 기재와 접촉하게 된 80-80 웰 PDMS로 옮기고, 상기에서 설명한 일반적인 과정에 따라서 분석하였다. 도 2b는 조합에 의해 제공되는 장점들을 지지하는 결과를 보여주며, 특히 조합이 다양한 농도 범위에서 시너지 효과를 내는 것을 보여준다.
- [0277] 실시예 8b
- [0278] ZnCl₂ 및 화합물 13을 준비하였고, AA2024 유형 금속 기재와 접촉하게 된 80-80 웰 PDMS로 옮기고, 상기에서 설명한 일반적인 과정에 따라서 분석하였다. 도 2b는 조합에 의해 제공되는 장점들을 지지하는 결과를 보여주며, 특히 조합이 다양한 농도 범위에서 시너지 효과를 내는 것을 보여준다.
- [0279] **분극 저항 전기화학적 시험을 위한 일반적인 절차**
- [0280] 부식 억제 조성물은 본 명세서에서 개시한 바와 같이, 화학식 1의 적어도 하나의 부식 억제제와 적어도 하나의 금속의 혼합물을 포함한다. 각각의 금속을 10⁻³M, 5x10⁻⁴M, 2x10⁻⁴M, 10⁻⁴M, 5x10⁻⁵M, 2x10⁻⁵M, 및 10⁻⁵M의 농도의 탈염수에서 0.1M NaCl 용액에 첨가하였다. 각각의 부식 억제제를 10⁻³M, 5x10⁻⁴M, 2x10⁻⁴M, 10⁻⁴M, 5x10⁻⁵M, 2x10⁻⁵M, 및 10⁻⁵M의 농도의 탈염수에서 0.1M NaCl의 용액에 첨가하였다.
- [0281] 금속 기재(3cm x 3cm 표면적)를 우수한 등급의 3M Scotchbrite를 사용하여 마모시켰다(abraded). 금속 기재, 예를 들어 AA2024 및 AA7075를 탈염수로 씻어내고 공기 건조시켰다. 티타늄 메쉬 및 포화 칼로멜 전극(SCE)은 표준 3-전극 셀을 형성하기 위하여 작업 전극과 함께 각각 결부되도록(be coupled) 기준 전극 및 상대 전극을 구성하였다. 각각의 부식 억제 조성물을 분극 스캔을 개시하기 전에 5분의 기간동안 개방 회로 전위(OCP)에 두었다. 직선 분극을 168시간 동안 매 시간마다 0.167 mV/s 의 스캔 속도에서 OCP 대(vs.) ± 10 mV의 전위 범위에서 측정하였다. 분극 저항, R_p의 값은 교정된 전류 밀도 대 전위 선(potential lines)의 경사로부터 추정된다. 검사를 168시간 동안 공기에 공개된 180ml 용액에서 수행하였다. 분극 실험을 EC-랩 소프트웨어 v 10.4를 가진 16 채널-VMP3(다양한 다중채널 포텐시오스태트(potentiostat)를 사용하여 수행하였다.
- [0282] 실시예 9
- [0283] ZnCl₂ 및 화합물 17을 준비하였고, 상기에서 개시한 일반적인 과정에 따라 분석하였다. 금속 기재는 AA2024였고, 상기에서 개시한 것과 같이 준비하였다. 도 3은 조합이 개별적인 성분을 넘어 예측불가능한 시너지 결과를 제공하는 것을 보여준다.
- [0284] 실시예 10
- [0285] ZnCl₂ 및 화합물 17을 준비하였고, 상기에서 개시한 일반적인 과정에 따라 분석하였다. 금속 기재는 AA7075였고, 상기에서 개시한 것과 같이 준비하였다.
- [0286] 실시예 11
- [0287] CeCl₃-7H₂O 및 화합물 23을 10⁻⁴M의 농도에서 준비하였고, 상기에서 개시한 일반적인 절차에 따라서 분석하였다. PrCl₃-6H₂O 및 화합물 23을 10⁻⁴M의 농도에서 준비하였고 상기에서 개시한 일반적인 절차에 따라서 분석하였다. 금속 기재는 AA2024였고, 상기에서 개시한 것과 같이 준비하였다. 조합을 산업 표준 부식 억제제, K₂Cr₂O₇, 10⁻⁴M에서 0.1M NaCl의 용액과 비교하였다. 조합으로부터 관찰된 결과는, 산업 표준 부식 억제제를 넘어 상당히 강화된 부식 억제 특성을 갖는 것을 보여주었다.
- [0288] 실시예 12
- [0289] CeCl₃-7H₂O 및 화합물 23을 10⁻⁴M의 농도에서 준비하였고, 상기에서 개시한 일반적인 절차에 따라서 분석하였다.

PrCl₃-6H₂O 및 화합물 23을 10⁻⁴M의 농도에서 준비하였고 상기에서 개시한 일반적인 절차에 따라서 분석하였다. 금속 기재는 AA7075였고, 상기에서 개시한 것과 같이 준비하였다. 조합을 산업 표준 부식 억제제, K₂Cr₂O₇, 10⁻⁴M에서 0.1M NaCl의 용액과 비교하였다. 조합으로부터 관찰된 결과는, 산업 표준 부식 억제제를 넘어 상당히 강화된 부식 억제 특성을 갖는 것을 보여주었다.

[0290] 실시예 13

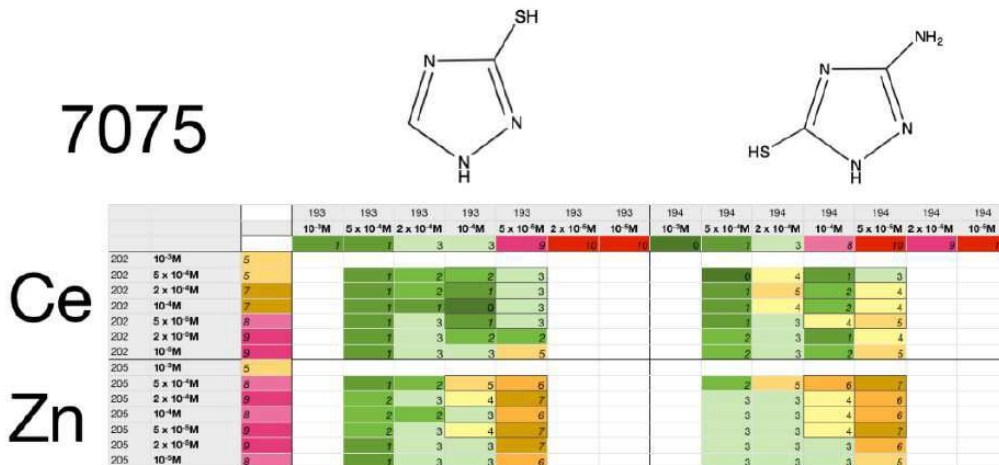
[0291] CeCl₃-7H₂O을 10⁻⁴M의 농도에서 준비하였고, 화합물 23을 2x10⁻⁵M의 농도에서 준비하였으며, 상기에서 개시한 일반적인 절차에 따라서 분석하였다. PrCl₃-6H₂O 을 10⁻⁴M의 농도에서 준비하였고, 화합물 23을 2x10⁻⁵M의 농도에서 준비하였으며, 상기에서 개시한 일반적인 절차에 따라서 분석하였다. 금속 기재는 AA2024였고, 상기에서 개시한 것과 같이 준비하였다. 조합을 산업 표준 부식 억제제, K₂Cr₂O₇, 10⁻⁴M에서 0.1M NaCl의 용액과 비교하였다. 조합으로부터 관찰된 결과는, 산업 표준 부식 억제제를 넘어 상당히 강화된 부식 억제 특성을 갖는 것을 보여주었다.

[0292] 실시예 14

[0293] CeCl₃-7H₂O을 10⁻⁴M의 농도에서 준비하였고, 화합물 23을 2x10⁻⁵M의 농도에서 준비하였으며, 상기에서 개시한 일반적인 절차에 따라서 분석하였다. PrCl₃-6H₂O 을 10⁻⁴M의 농도에서 준비하였고, 화합물 23을 2x10⁻⁵M의 농도에서 준비하였으며, 상기에서 개시한 일반적인 절차에 따라서 분석하였다. 금속 기재는 AA7075였고, 상기에서 개시한 것과 같이 준비하였다. 조합을 산업 표준 부식 억제제, K₂Cr₂O₇, 10⁻⁴M에서 0.1M NaCl의 용액과 비교하였다. 조합으로부터 관찰된 결과는, 산업 표준 부식 억제제를 넘어 상당히 강화된 부식 억제 특성을 갖는 것을 보여주었다.

도면

도면 1a



도면1b



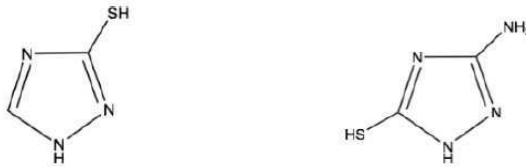
145			145			145			145			146			146			146			146		
10 ^{-3M}	5 x 10 ^{-4M}	2 x 10 ^{-4M}	10 ^{-4M}	5 x 10 ^{-5M}	2 x 10 ^{-5M}	10 ^{-5M}	10 ^{-3M}	5 x 10 ^{-4M}	2 x 10 ^{-4M}	10 ^{-4M}	5 x 10 ^{-5M}	2 x 10 ^{-5M}	10 ^{-5M}	10 ^{-3M}	5 x 10 ^{-4M}	2 x 10 ^{-4M}	10 ^{-4M}	5 x 10 ^{-5M}	2 x 10 ^{-5M}	10 ^{-5M}			
1	1	3	7	8	8	9	1	2	5	7	8	8	9	1	2	5	7	8	8	9	9		
	1	3	3	3				1	1	1	1	1			1	1	1	1	1				
	2	3	3	4				1	3	1	2				1	3	1	2					
	1	3	3	4				1	2	1	2				1	2	1	2					
	1	3	4	6				1	3	1	4				1	3	1	4					
	2	3	4	4				1	3	1	3				1	3	1	3					
	1	4	5	5				2	4	1	4				2	4	1	4					
	2	2	5	5				2	2	3	5				2	2	3	5					
	2	3	2	6				1	3	2	5				1	3	2	5					
	2	3	2	7				2	2	2	5				2	2	2	5					
	3	4	4	7				2	3	3	5				2	3	3	5					
	2	3	4	7				2	3	4	5				2	3	4	5					
	2	3	4	6				1	2	3	5				1	2	3	5					

Ce

Zn

도면2a

2024



Ce
Zn

		193						194									
		10 ^{-3M}	5 x 10 ^{-4M}	2 x 10 ^{-4M}	10 ^{-4M}	5 x 10 ^{-5M}	2 x 10 ^{-5M}	10 ^{-5M}	10 ^{-3M}	5 x 10 ^{-4M}	2 x 10 ^{-4M}	10 ^{-4M}	5 x 10 ^{-5M}	2 x 10 ^{-5M}	10 ^{-5M}		
		7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7		
202	10 ^{-3M}	7															
202	5 x 10 ^{-4M}	7	2	1	1	2	4	5			1	2	1	1	3	5	
202	2 x 10 ^{-4M}	7										1	1	1	2	4	
202	10 ^{-4M}	7										1	1	1	2	5	
202	5 x 10 ^{-5M}	8										1	1	1	2	3	
202	2 x 10 ^{-5M}	8										2	1	2	5	5	
202	10 ^{-5M}	8										2	1	2	5	7	
206	10 ^{-3M}	7															
205	5 x 10 ^{-4M}	8	0	0	1	3	8	8				0	0	1	4	7	
205	2 x 10 ^{-4M}	8										1	0	0	1	2	7
205	10 ^{-4M}	8										0	0	1	2	7	
205	5 x 10 ^{-5M}	8										0	1	1	3	6	
205	2 x 10 ^{-5M}	8										0	1	2	4	8	
205	10 ^{-5M}	8										0	1	2	4	8	

도면2b



145			145			145			146			146			146						
10-3M	5 x 10-4M	2 x 10-4M	10-4M	5 x 10-5M	2 x 10-5M	10-5M	10-3M	5 x 10-4M	2 x 10-4M	10-4M	5 x 10-5M	2 x 10-5M	10-5M	10-3M	5 x 10-4M	2 x 10-4M	10-4M				
0	1	1	4	7	9	10	0	1	1	4	7	9	9	0	1	1	4	7	9	9	
			2	3	2	6				1	0	2	4				1	0	2	4	4
			1	2	2	4				1	3	1	1				1	3	1	1	5
			2	2	2	5				2	1	2	5				2	1	2	5	5
			1	3	2	3	7			0	3	2	1	6			3	2	1	6	6
			4	2	3	8					3	1	7	8			3	1	7	8	8
			4	4	5												3	4	8		
			1	1	2	8					1	1	2	6			1	1	2	6	6
			2	1	2	10					3	0	2	9			3	0	2	9	9
			1	1	2	9					1	1	2	8			1	1	2	8	8
			2	1	4	9					3	1	4	10			3	1	4	10	10
			3	1	7	9					4	2	7	9			4	2	7	9	9
			3	1	10						4	7	9				4	7	9		

Ce

Zn

도면3

