

**STUDI KOMPUTASI DAIDZEIN, GALANGIN, GENISTEIN, NARINGENIN SEBAGAI
INHIBITOR KOROSI BESI DENGAN METODE DFT DAN MEMBANDINGKANNYA
DENGAN LUTEOLIN**

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh
MUHAMMAD ILHAM
BP: 1610412034



**JURUSAN S1 KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS**

PADANG

2022

**STUDI KOMPUTASI DAIDZEIN, GALANGIN, GENISTEIN, NARINGENIN SEBAGAI
INHIBITOR KOROSI BESI DENGAN METODE DFT DAN MEMBANDINGKANNYA
DENGAN LUTEOLIN**

Oleh:

MUHAMMAD ILHAM

BP : 1610412034



Skripsi diajukan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains
pada Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu
Pengetahuan Alam Universitas Andalas

**JURUSAN S1 KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM**

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2022

INTISARI

STUDI KOMPUTASI DAIDZEIN, GALANGIN, GENISTEIN, NARINGENIN SEBAGAI INHIBITOR KOROSI BESI DENGAN METODE DFT DAN MEMBANDINGKANNYA DENGAN LUTEOLIN

Oleh:

Muhammad Ilham (BP: 1610412034)

Dr. Yeni Stiadi, MS*, Prof. Dr. Emriadi, MS*

***Pembimbing**

Inhibitor korosi senyawa daidzein, galangin, genistein, naringenin dan luteolin telah dikaji menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dengan basis set B3LYP/6-31G menggunakan program *Gaussian*. Untuk mencegah terjadinya korosi dibutuhkan inhibitor yang bersifat organik yang bersifat aman bagi lingkungan. Oleh karena itu peneliti mencari inhibitor organik lain yang berpotensi untuk mencegah terjadinya korosi. Parameter kimia kuantum yang dihitung ialah E_{HOMO} , E_{LUMO} , energi celah (ΔE), potensial ionisasi (I), afinitas elektron (A), elektronegatifitas (X), *hardness* (η), *softness* (σ), elektrofilitas (ω), nukleofilitas (ϵ), kerapatan muatan mulliken, energi *back-donation* ($E_{\text{b-d}}$), transfer elektron (ΔN), energi adsorpsi (E_{ads}), dan energi ikatan (E_{binding}). Perhitungan secara teoritis menunjukkan senyawa naringenin merupakan inhibitor yang baik dibandingkan senyawa lainnya sehingga dapat digunakan sebagai inhibitor organik alternatif menggantikan luteolin. Pada penelitian ini naringenin merupakan senyawa yang berpotensi sebagai inhibitor terlihat dari struktur dan parameter perhitungan yang telah dilakukan, sehingga naringenin dapat digunakan sebagai inhibitor organik menggantikan luteolin. Urutan kenaikan inhibisi secara teori adalah naringenin > genistein > galangin > daidzein. Kajian teoritis ini akan berkontribusi besar pada penelitian inhibitor organik secara eksperimental dikarenakan sudah diketahui kenaikan inhibisi secara teori.

Kata kunci: Inhibisi Korosi, Inhibitor Organik, DFT.

ABSTRACT

COMPUTATION STUDY OF DAIDZEIN, GALANGIN, GENISTEIN, NARINGENIN AS IRON CORROSION INHIBITORS WITH DFT METHOD AND COMPARISON WITH LUTEOLIN

By:

Muhammad Ilham (BP: 1610412034)

Dr. Yeni Stiadi, MS*, Prof. Dr. Emriadi, MS*

***Supervisor**

Corrosion inhibitors of daidzein, galangin, genistein, naringenin and luteolin compounds have been studied using the Density Functional Theory (DFT) method with the basis set B3LYP/6-31G using the Gaussian program. To prevent corrosion, organic inhibitors are needed which are safe for the environment. Therefore, researchers are looking for other organic inhibitors that have the potential to prevent corrosion. The calculated quantum chemical parameters are E_{HOMO} , E_{LUMO} , gap energy (ΔE), ionization potential (I), electron affinity (A), electronegativity (X), hardness (η), softness (σ), electrophilicity (ω), nucleophilicity (ϵ), mulliken charge density, back-donation energy ($E_{\text{b-d}}$), electron transfer (ΔN), adsorption energy (E_{ads}), and bond energy (E_{binding}). Theoretical calculations show that naringenin is a good inhibitor compared to other compounds so that it can be used as an alternative organic inhibitor to replace luteolin. In this research, naringenin is a compound that has the potential as an inhibitor as seen from the structure and parameter calculations that have been carried out, so that naringenin can be used as an organic inhibitor to replace luteolin. The theoretical order of increasing inhibition is naringenin > genistein > galangin > daidzein. This theoretical study will greatly contribute to the experimental research of organic inhibitors because the theoretical increase in inhibition is already known.

Keywords: Corrosion Inhibition, Inhibitor Organic, DFT.