

BAB I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Korosi merupakan masalah serius bagi industri karena menyebabkan kerusakan mesin sehingga menimbulkan pembengkakan anggaran terhadap biaya produksi. Oleh karena itu banyak peneliti yang mengembangkan metode pencegahan korosi^{1,2}. Ada berbagai macam metode untuk mencegah terjadinya korosi yaitu elektroplating, perlindungan katodik atau anodik dan penambahan inhibitor korosi^{3,4}. Penambahan inhibitor korosi adalah salah satu metode untuk mencegah terjadinya korosi yang efektif, efisien dan ekonomis^{3,5,6}.

Inhibitor korosi ialah senyawa yang ditambahkan dalam jumlah kecil untuk mencegah terjadinya reaksi korosi dalam media asam/basa secara efisien³. Inhibitor dibagi menjadi dua macam, yaitu inhibitor organik dan inhibitor anorganik⁷. Inhibitor dapat mencegah terjadinya korosi secara ideal apabila memiliki heteroatom (O,N,S,P), pasangan elektron bebas, ikatan π , dan ikatan rangkap yang akan teradsorpsi pada permukaan logam⁸.

Kemampuan suatu senyawa sebagai inhibitor dapat diuji dengan cara eksperimental maupun teoritis. Penelitian secara eksperimental memiliki keuntungan yaitu dapat menjelaskan mekanisme inhibisi korosi yang terjadi, sedangkan kerugiannya ialah membutuhkan biaya yang besar dan waktu yang lama untuk memperoleh hasil yang diinginkan. Oleh karena itu, perkembangan teknologi hardware dan software membuka peluang untuk melakukan penelitian kimia teori pada penelitian inhibisi korosi. Perhitungan kimia komputasi digunakan untuk memprediksi kemampuan inhibisi korosi suatu senyawa sebelum dilakukan penelitian secara eksperimental di laboratorium⁸. Beberapa hasil penelitian yang telah dilaporkan yaitu studi komputasi potensi inhibisi korosi senyawa *4-methyl-4H-1,2,4-triazole-3-thiol*, *2-mercaptocotinic acid*⁹, dan studi komputasi inhibisi korosi dari senyawa *(e)-3-(2-p-tolyldiazenyl)-1-nitrosonaphthalen-2-ol*¹⁰. Pada penelitian yang telah dilaporkan peneliti mencoba merencanakan senyawa untuk mendapatkan inhibitor korosi yang efisien yang nantinya akan dapat disintesis secara massal. Hal ini memperkuat fakta bahwa perhitungan kimia kuantum berperan penting dalam penentuan inhibisi korosi¹¹.

Density Functional Theory (DFT) merupakan salah satu metode kimia komputasi yang sering digunakan pada perhitungan parameter kimia kuantum. Metode ini berperan penting pada perhitungan kimia kuantum karena dapat memberikan parameter dasar yang akurat untuk suatu molekul¹². Metode ini dapat digunakan untuk mengilustrasikan pentingnya struktur dari suatu senyawa dan efisiensi adsorpsi inhibitor pada permukaan logam^{11,13}.

Senyawa flavonoid dapat diekstrak menggunakan pelarut etanol¹⁴. Senyawa daidzen dan genistein merupakan senyawa golongan flavonoid yang dapat diekstrak dari tumbuhan famili polong (*Fabaceae*), galangin dapat diekstrak dari tumbuhan famili jahe (*Zingiberaceae*), sedangkan naringenin dapat diekstrak dari tumbuhan famili jeruk (*Rutaceae*). Senyawa ini memiliki heteroatom (O), pasangan elektron bebas, ikatan π , dan ikatan rangkap dalam struktur molekulnya⁸. Apabila senyawa memiliki semua kriteria di atas dapat diprediksi bahwa senyawa tersebut dapat digunakan sebagai inhibitor organik. Dari penelusuran literatur, senyawa ini belum pernah diteliti sebagai inhibitor korosi secara eksperimen maupun komputasi, oleh karena itu untuk memprediksi kemampuan dari senyawa tersebut dilakukanlah penelitian secara komputasi dengan menggunakan metode DFT basis set B3LYP/6-31G.

Parameter yang diperoleh dari hasil optimasi ialah E_{HOMO} (*Highest Occupied Molecular Orbital*), E_{LUMO} (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*), energi total (E_{total}). Dari nilai E_{HOMO} dan E_{LUMO} yang telah diperoleh kemudian dapat dihitung nilai energi celah (ΔE), potensial ionisasi (I), afinitas elektron (A), elektronegativitas (X), *hardness* (η), *softness* (σ), elektrofilitas (ω), nukleofilitas (ϵ), transfer elektron (ΔN)¹⁵, kerapatan muatan muliken, energi *back-donation* ($E_{\text{b-d}}$)¹⁶. Kemudian energi total yang telah didapatkan digunakan untuk menghitung nilai energi adsorpsi (E_{ads}) dan energi ikatan ($\Delta E_{\text{binding}}$)¹⁷. Parameter di atas digunakan untuk menentukan kemampuan inhibisi korosi, karena parameter di atas dapat menentukan kereaktifan suatu senyawa. Parameter lain yang dapat diperoleh ialah momen dipol, namun parameter ini masih menjadi perdebatan dikarenakan tidak dapat memberikan penjelasan yang baik tentang kemampuan suatu senyawa sebagai inhibitor korosi¹⁸.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas, maka rumusan masalah pada penelitian ini adalah:

1. Apakah kemampuan inhibisi korosi senyawa daidzein, galangin, genistein, naringenin dan luteolin dapat ditentukan dengan metode DFT?
2. Apakah ada hubungan antara struktur senyawa daidzein, galangin, genistein, naringenin dan luteolin dengan inhibisi korosi melalui parameter kimia kuantum?
3. Apakah senyawa daidzein, galangin, genistein dan naringenin dapat digunakan sebagai alternatif inhibitor organik menggantikan luteolin?
4. Apakah ada interaksi senyawa daidzein, galangin, genistein naringenin dan luteolin dengan permukaan logam besi?

1.3 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini adalah:

1. Menentukan inhibisi korosi senyawa senyawa daidzein, galangin, genistein, naringenin dan luteolin dengan metode DFT.
2. Menentukan nilai parameter kimia kuantum melalui hubungan antara struktur molekul dengan inhibisi korosi.
3. Menentukan senyawa daidzein, galangin, genistein dan naringenin dapat digunakan sebagai alternatif inhibitor organik menggantikan luteolin.
4. Menentukan interaksi senyawa daidzein, galangin, genistein, naringenin dan luteolin dengan permukaan logam besi.

1.4 Manfaat Penelitian

Manfaat dari penelitian ini adalah memberikan informasi tentang struktur senyawa daidzein, galangin, genistein, naringenin yang efisien sebagai inhibitor korosi dengan menggunakan metode DFT. Dapat menjadi inhibitor organik yang efisien menggantikan luteolin.