

**ANALISIS TEORITIK INHIBISI KOROSI PADA ATOM Fe OLEH
MONOMER DARI LIGNIN MENGGUNAKAN METODE DFT**

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh

TEDY ALFAJRI

NIM : 1810411017



Dosen Pembimbing I: Dr. Yeni Stiadi, M.S

Dosen Pembimbing II: Imelda, M.Si

PROGRAM SARJANA

JURUSAN KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2022

**ANALISIS TEORITIK INHIBISI KOROSI PADA ATOM Fe OLEH
MONOMER DARI LIGNIN MENGGUNAKAN METODE DFT**

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh

TEDY ALFAJRI

NIM : 1810411017



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

PROGRAM SARJANA

JURUSAN KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2022

INTISARI

ANALISIS TEORITIK INHIBISI KOROSI PADA ATOM Fe OLEH MONOMER DARI LIGNIN MENGGUNAKAN METODE DFT

Oleh:

Tedy Alfajri (1810411017)

Dr. Yeni Stiadi, M.S; Imelda, M.Si

Lignin merupakan polimer yang tersusun atas tiga unit utama monomer lignin alkohol dan mengandung gugus heterosiklik. Penelitian ini menggunakan paket program Gaussian 16W dengan metode perhitungan *Density Functional Theory* (DFT) dan basis set B3LYP/6-31G yang menghasilkan struktur optimal molekul inhibitor, E_{HOMO} , E_{LUMO} , contour *Highest Occupied Molecular Orbital* (HOMO), contour *Lowest Unoccupied Molecular Orbital* (LUMO), dan *Electrostatic Potential* (ESP). Molekul inhibitor yang dianalisis adalah monomer dari lignin dengan simbol Inh 1, Inh 2, Inh 3 dan gabungan monomer dari lignin dengan simbol Inh 4, Inh 5, Inh 6, dan Inh 7. Analisis molekul inhibitor dilakukan tanpa pelarut, dengan pelarut air dan pelarut etanol menggunakan perhitungan nilai parameter kimia kuantum berupa *bandgap* (ΔE), elektronegativitas (χ), potensial ionisasi (I), *hardness* (η), *softness* (σ), elektrofilitas (ω), nukleofilitas (ϵ), transfer muatan (ΔN), energi interaksi ($\Delta \psi$), energi *back* donasi ($\Delta E_{\text{b-d}}$). Pengaruh gugus pendorong CH_3 yang lebih banyak pada inhibitor 3 dan 4 menyebabkan elektron π akan lebih mudah beresonansi ke gugus $-\text{OH}$ yang berfungsi menginhibisi korosi besi lebih baik dibandingkan dengan molekul inhibitor lainnya. Inhibitor 3 dan 4 mempunyai nilai energi ikatan sebesar 118,0705 kJ/mol dan 109,6979 kJ/mol yang menandakan interaksi yang terjadi antara inhibitor dengan besi adalah interaksi kimia. Interaksi inhibitor dengan besi menunjukkan urutan efisiensi inhibisi adalah Inh 3 > Inh 4 > Inh 2 > Inh 1 > Inh 6 > Inh 7 > Inh 5.

Kata kunci: Inhibisi korosi besi, Lignin, DFT

ABSTRACT**THEORETICAL ANALYSIS OF CORROSION INHIBITION ON Fe ATOM BY MONOMERS OF LIGNIN USING DFT METHOD**

by:

Tedy Alfajri (1810411017)**Dr. Yeni Stiadi, M.S *, Imelda, M.Si**

Lignin is a polymer composed of three main units of lignin alcohol monomer and contains a heterocyclic group. This study uses a Gaussian 16W program package with the Density Functional Theory (DFT) calculation method and the B3LYP/6-31G basis set which results in the optimal structure of the inhibitor molecule, EHOMO, ELUMO, contour Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO), contour Lowest Unoccupied Molecular Orbital (LUMO), and Electrostatic Potential (ESP). Inhibitor molecules analyzed were monomers of lignin with symbols Inh 1, Inh 2, Inh 3 and combined monomers of lignin with symbols Inh 4, Inh 5, Inh 6, and Inh 7. The inhibitor molecule analysis was carried out without a solvent, with water and ethanol as solvent using the calculation of the value of quantum chemical parameters in the form of bandgap (ΔE), electronegativity (χ), ionization potential (I), *hardness* (η), *softness* (σ), electrophilicity (ω), nucleophilicity (ϵ), charge transfer (ΔN), interaction energy ($\Delta\psi$), back donation energy (ΔE_{b-d}). The effect of more CH₃ driving groups on inhibitors 3 and 4 causes the electrons to resonate more easily to the -OH group which functions to inhibit iron corrosion better than other inhibitor molecules. Inhibitors 3 and 4 have bond energy values of 118.0705 kJ/mol and 109.6979 kJ/mol which indicates the interaction between the inhibitor and iron is a chemical interaction. The interaction of inhibitors with iron shows the order of inhibition efficiency is Inh 3 > Inh 4 > Inh 2 > Inh 1 > Inh 6 > Inh 7 > Inh 5.

Keyword: Iron corrosion inhibitor, Lignin, DFT

