

## BAB I PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Korosi merupakan salah satu masalah serius di bidang industri karena menimbulkan kerugian setiap tahunnya. Fenomena korosi pada kegiatan industri biasanya terjadi pada material logam salah satunya besi. Besi mudah mengalami korosi karena paparan media korosif seperti asam sulfat dan asam klorida yang digunakan dalam proses industri<sup>1</sup>. Kerusakan besi akibat korosi juga dapat menyebabkan kerusakan lingkungan yang merupakan masalah utama dalam industri terutama pada media asam. Dengan demikian, sangat dibutuhkan pengembangan metode pencegahan korosi atau mengurangi laju korosi melalui penambahan inhibitor<sup>2</sup>.

Cara yang paling ramah lingkungan dan hemat biaya untuk mencegah korosi logam adalah dengan menggunakan inhibitor organik<sup>3</sup>. Efisiensi penghambatan suatu inhibitor dalam lingkungan tertentu sangat dipengaruhi oleh struktur kimia dan interaksinya dengan permukaan logam. Banyak senyawa organik heterosiklik yang mengandung atom nitrogen, belerang, oksigen, fosfor, dan elektron  $\pi$  dikenal sebagai inhibitor korosi logam yang efektif karena dapat teradsorpsi pada permukaan logam dan membentuk film penghalang. Atom nitrogen, belerang, oksigen, dan fosfor yang mengandung pasangan elektron bebas bertindak sebagai ligan untuk membentuk senyawa kompleks dengan logam<sup>4</sup>.

Lignin merupakan bagian integral dari dinding sel tanaman dan merupakan senyawa polimer yang memberikan kekuatan mekanik pada selulosa tanaman<sup>5</sup>. Fungsi utama lignin adalah sebagai perekat yang menahan hemiselulosa dan selulosa dalam pembentukan dinding sel. Lignin memiliki sumber yang berlimpah dan telah dimanfaatkan sebagai inhibitor korosi seperti lignin pada jerami padi (*Oryza sativa*), ampas tebu (*Sugarcane bagasse*), dan rakis pisang (*Musa paradisiaca*) dalam medium korosif atau pelarut asam klorida<sup>6,7,8</sup>. Lignin tersusun dari monomer-monomer penyusunnya yaitu sinafil alkohol, koniferil alkohol dan kumaril alkohol yang merupakan turunan dari propil alkohol yang terkait dengan radikal bebas<sup>9</sup>. Monomer dari lignin mengandung elektron  $\pi$  berkonjugasi dan atom O yang memiliki pasangan elektron bebas sehingga dapat berpotensi menjadi inhibitor korosi besi.

Pemanfaatan senyawa organik sebagai inhibitor korosi dapat dibantu dengan metode eksperimental dan komputasi. Eksperimental dapat menjelaskan mekanisme inhibisi korosi besi, namun cara ini membutuhkan biaya yang mahal dan waktu yang lama untuk memperoleh hasil yang diinginkan. Oleh karena itu, dengan kemajuan

*hardware* dan *software* saat ini, membuka peluang untuk penggunaan kimia teori dalam penelitian inhibisi korosi besi. Kimia komputasi adalah metode yang dapat menghasilkan gambar struktural dalam berbagai model senyawa, dan memiliki aktivitas yang sama seperti dalam persamaan kuantum. Pesatnya perkembangan kimia komputasi, terutama aplikasinya dalam perhitungan kimia kuantum, telah memungkinkan pemodelan molekul dan eksplorasi sifat fisik dan kimia dari berbagai struktur molekul. Metode perhitungan kimia komputasi ada tiga yaitu semi empiris, *ab initio*, dan *Density Functional Theory* (DFT). yang sering digunakan untuk analisis teoritik adalah metode DFT karena dapat menghasilkan perhitungan yang akurat<sup>10</sup>. Beberapa penelitian secara komputasi tentang inhibisi korosi besi yang pernah dilakukan dengan menggunakan inhibitor organik yaitu senyawa aminoazobenzen<sup>11</sup>, tiofen<sup>12</sup>, triazol<sup>13</sup>, dan senyawa lainnya.

Oleh karena itu berdasarkan uraian tersebut maka dilakukan penelitian untuk mempelajari efisiensi beberapa senyawa monomer dari lignin sebagai inhibitor korosi besi. secara komputasi menggunakan metode DFT.

## 1.2 Rumusan Masalah

Rumusan masalah pada penelitian ini, adalah sebagai berikut:

1. Bagaimana kereaktifan beberapa senyawa monomer dari lignin dan gabungan monomer dari lignin akibat pengaruh pelarut terhadap kereaktifan inhibisi korosi besi dengan menggunakan metode DFT.
2. Bagaimana struktur beberapa senyawa monomer dari lignin dan gabungan monomer dari lignin yang terbaik sebagai inhibitor korosi besi.
3. Bagaimana interaksi senyawa monomer dari lignin dan gabungan monomer dari lignin yang terbaik sebagai inhibitor korosi besi.

### 1.3 Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk:

1. Menentukan kereaktifan beberapa senyawa monomer dari lignin dan gabungan monomer dari lignin akibat pengaruh pelarut terhadap kereaktifan inhibisi korosi besi dengan menggunakan metode DFT.
2. Menentukan struktur beberapa senyawa monomer dari lignin dan gabungan monomer dari lignin yang terbaik sebagai inhibitor korosi besi.
3. Menentukan interaksi senyawa monomer dari lignin dan gabungan monomer dari lignin yang terbaik sebagai inhibitor korosi besi.

### 1.4 Manfaat Penelitian

Manfaat dari penelitian ini adalah memberikan informasi tentang struktur beberapa senyawa monomer dari lignin dan gabungan monomer dari lignin yang efisien sebagai inhibitor korosi pada atom Fe dengan menggunakan metode DFT yang nantinya dapat digunakan sebagai inhibitor korosi yang efisien.

