

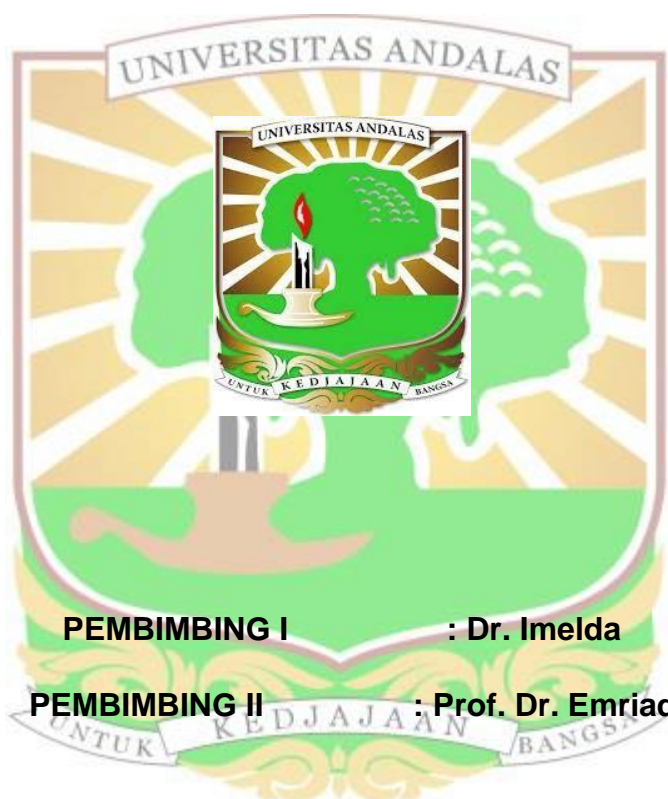
**ANALISIS SENYAWA ORYZALEXIN SEBAGAI INHIBITOR KOROSI BESI  
MENGUNAKAN METODE DFT (*DENSITY FUNCTIONAL THEORY*)**

**SKRIPSI SARJANA KIMIA**

Oleh

**PUTRI RAHMA GUSTI**

**NIM : 1910413008**



**PEMBIMBING I : Dr. Imelda**

**PEMBIMBING II : Prof. Dr. Emriadi, MS**

**PROGRAM STUDI SARJANA**

**DEPARTEMEN KIMIA**

**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM**

**UNIVERSITAS ANDALAS**

**PADANG**

**2023**

**ANALISIS SENYAWA ORYZALEXIN SEBAGAI INHIBITOR KOROSI BESI  
MENGUNAKAN METODE DFT (*DENSITY FUNCTIONAL THEORY*)**

**SKRIPSI SARJANA KIMIA**

Oleh

**PUTRI RAHMA GUSTI**

**NIM : 1910413008**



**PEMBIMBING I : Dr. Imelda**

**PEMBIMBING II : Prof. Dr. Emriadi, MS**

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

**PROGRAM STUDI SARJANA**

**DEPARTEMEN KIMIA**

**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM**

**UNIVERSITAS ANDALAS**

**PADANG**

**2023**

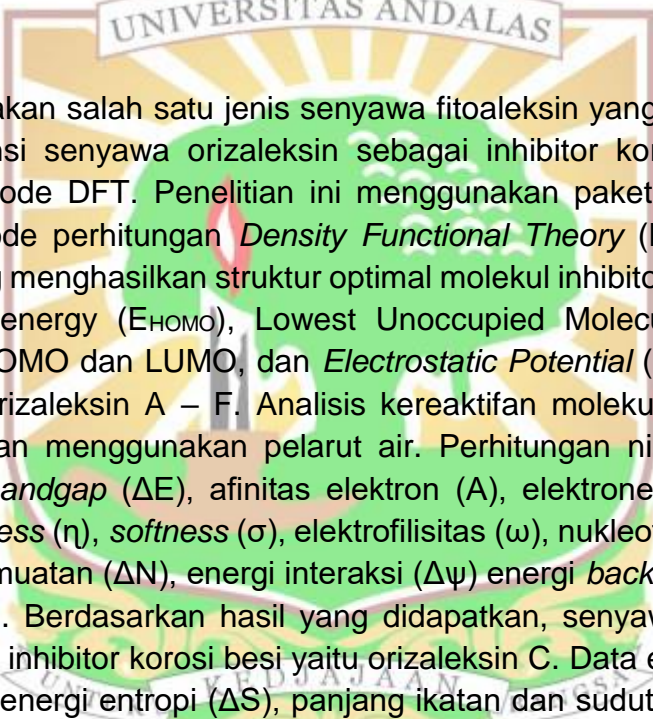
## INTISARI

### ANALISIS SENYAWA ORYZALEXIN SEBAGAI INHIBITOR KOROSI BESI MENGUNAKAN METODE DFT (*DENSITY FUNCTIONAL THEORY*)

Oleh :

Putri Rahma Gusti (1910413008)

Dr. Imelda, Prof. Dr. Emriadi, MS



Orizaleksin merupakan salah satu jenis senyawa fitoaleksin yang termasuk senyawa antimikroba. Potensi senyawa orizaleksin sebagai inhibitor korosi besi dievaluasi menggunakan metode DFT. 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, Highest Occupied Molecular Orbital energy ( $E_{\text{HOMO}}$ ), Lowest Unoccupied Molecular Orbital Energy ( $E_{\text{LUMO}}$ ), contour HOMO dan LUMO, dan *Electrostatic Potential* (ESP). Molekul yang dianalisa adalah orizaleksin A – F. Analisis kereaktifan molekul inhibitor dilakukan dalam fasa gas dan menggunakan pelarut air. Perhitungan nilai parameter kimia kuantum berupa *bandgap* ( $\Delta E$ ), afinitas elektron ( $A$ ), elektronegativitas ( $\chi$ ), energi ionisasi ( $E_I$ ), *hardness* ( $\eta$ ), *softness* ( $\sigma$ ), elektrofilisitas ( $\omega$ ), nukleofilisitas ( $\epsilon$ ), potensial kimia ( $\mu$ ), transfer muatan ( $\Delta N$ ), energi interaksi ( $\Delta \psi$ ) energi *back* donasi ( $\Delta E_{\text{b-d}}$ ) dan momen dipol (MD). Berdasarkan hasil yang didapatkan, senyawa orizaleksin yang berpotensi sebagai inhibitor korosi besi yaitu orizaleksin C. Data energi ikatan, energi bebas gibbs ( $\Delta G$ ), energi entropi ( $\Delta S$ ), panjang ikatan dan sudut dihedral digunakan untuk menentukan interaksi orizaleksin C dengan Fe, interaksi yang terjadi merupakan interaksi kimia dikarenakan interaksi antara orizaleksin C dengan atom Fe memiliki nilai  $\Delta G$  sebesar -113,458 kJ/mol.

**Kata kunci** : Inhibisi korosi besi, Orizaleksin, DFT

## ABSTRACT

### ANALYSIS OF ORYZALEXIN COMPOUNDS AS AN IRON CORROSION INHIBITOR USING THE DFT (DENSITY FUNCTIONAL THEORY) METHOD

By :

**Putri Rahma Gusti (1910413008)**

**Dr. Imelda, Prof. Dr. Emriadi, MS**

Oryzalexin is a type of phytoalexin compound which is an antimicrobial compound. The potency of oryzalexin as an inhibitor of iron corrosion was evaluated using the DFT method. This study uses the Gaussian 16W program package with the Density Functional Theory (DFT) calculation method and the B3LYP/6-31G basis set which produces the optimal structure of the inhibitor molecule, Highest Occupied Molecular Orbital energy (EHOMO), Lowest Unoccupied Molecular Orbital Energy (ELUMO), contour HOMO and LUMO, and Electrostatic Potential (ESP). The molecules analyzed were oryzalexin A – F. Analysis of the reactivity of the inhibitor molecules was carried out in the gas phase and using water as a solvent. Calculation of quantum chemical parameter values in the form of bandgap ( $\Delta E$ ), electronegativity ( $\chi$ ), ionization potential (I), hardness ( $\eta$ ), softness ( $\sigma$ ), electrophilicity ( $\omega$ ), nucleophilicity ( $\epsilon$ ), charge transfer ( $\Delta N$ ), interaction energy ( $\Delta\psi$ ) and back donation energy ( $\Delta E_{b-d}$ ). Based on the results obtained, the potential of oryzalexin as an inhibitor of iron corrosion is oryzalexin C. Data on bond energy, free energy Gibbs ( $\Delta G$ ), entropy energy ( $\Delta S$ ), bond length, and dihedral angle are used to determine the interaction of oryzalexin C with Fe, the interaction this is a chemical interaction because the interaction between oryzalexin C and the Fe atom has a  $\Delta G$  value of -113.458 kJ/mol.

**Keywords:** Iron corrosion inhibitor, Oryzalexin, DFT