

**MEMPELAJARI SENYAWA α -TERPINEN, β -CARYOPHILEN, α -
ELEMEN DAN α -HUMULEN SEBAGAI INHIBITOR KOROSI DENGAN
METODE *DENSITY FUNCTIONAL THEORY* (DFT)**

TESIS

OLEH:

BUNGA MAINUR TRIRANTI

1920412007



**PROGRAM STUDI MAGISTER KIMIA
DEPARTEMEN KIMIA FAKULTAS MIPA
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG**

2023

**MEMPELAJARI SENYAWA α -TERPINEN, β -CARYOPHILEN, α -
ELEMEN DAN α -HUMULEN SEBAGAI INHIBITOR KOROSI DENGAN
METODE *DENSITY FUNCTIONAL THEORY* (DFT)**

TESIS

BUNGA MAINUR TRIRANTI

1920412007



**Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh Gelar Magister pada
Program Studi MAGISTER KIMIA FMIPA
Universitas Andalas**

**PROGRAM STUDI MAGISTER KIMIA
DEPARTEMEN KIMIA FAKULTAS MIPA
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG**

2023

INTISARI

MEMPELAJARI SENYAWA α -TERPINEN, β -CARYOPHILEN, α -ELEMEN DAN α -HUMULEN SEBAGAI INHIBITOR KOROSI DENGAN METODE *DENSITY FUNCTIONAL THEORY* (DFT)

Oleh :

Bunga Mainur Triranti (1920412007)

Prof. Dr. Emriadi*, Prof. Dr. Adlis Santoni*

Pembimbing*

Senyawa α -Terpinen, β -Caryophilen, α -Elemen dan α -Humulen merupakan komponen utama minyak atsiri daun *toona sinensis* dan memiliki % area tertinggi dari hasil penelitian komponen Minyak Atsiri daun *Toona sinensis*. 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, *contour Highest Occupied Molecular Orbital* (HOMO), *contour Lowest Unoccupied Molecular Orbital* (LUMO), E_{HOMO} , E_{LUMO} dan kerapatan muatan mulliken. Molekul inhibitor yang dianalisa yaitu senyawa α -Terpinen, β -Caryophilen, α -Elemen dan α -Humulen. Analisis kereaktifan molekul inhibitor dilakukan dalam fasa gas dan dengan medium pelarut air. Perhitungan nilai parameter kimia kuantum berupa *bandgap* (ΔE), elektronegativitas (χ), potensial ionisasi (I), *hardness* (η), *softness* (σ), elektrofilitas (ω), nukleofilisitas (ϵ), transfer muatan (ΔN), energi interaksi ($\Delta \psi$), energi back donasi ($\Delta E_{\text{b-d}}$). Berdasarkan dari hasil parameter yang didapatkan, senyawa terbaik yang berpotensi sebagai inhibitor korosi yaitu α -Terpinen. Data energi ikatan, energi bebas gibbs (ΔG) dan entropi (ΔS), panjang ikatan dan sudut ikatan digunakan untuk menentukan interaksi α -Terpinen dengan Fe. Interaksi yang terjadi merupakan interaksi kimia dikarenakan nilai ΔG yang didapatkan kecil dari -40 kJ/mol yaitu sebesar -201,142 kJ/mol.

Kata kunci : inhibitor korosi, α -Terpinen, β -Caryophilen, α -Elemen dan α -Humulen, DFT

ABSTRAK

STUDYING α -TERPINENE, β -CARYOPHILLEN, α -ELEMENE AND α -HUMULENE COMPOUNDS AS CORROSION INHIBITORS USING THE DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) METHOD

By :

Bunga Mainur Triranti (1920412007)

Prof. Dr. Emriadi*, Prof. Dr. Adlis Santoni*

Advisor*

The compounds α -Terpinene, β -Caryophyllene, α -Elemene and α -Humulene are the main components of *Toona sinensis* leaf essential oil and have the highest % area from the research results of *Toona sinensis* leaf essential oil components. This research uses the Gaussian 16W program package with the Density Functional Theory (DFT) calculation method and the B3LYP/6-31G database which produces the optimal structure of the inhibitor molecule, the Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO) contour, the Lowest Unoccupied Molecular Orbital (LUMO) contour, E_{HOMO} , E_{LUMO} and Mulliken charge density. The inhibitor molecules analyzed were the compounds α -Terpinene, β -Caryophyllene, α -Elemene and α -Humulene. Analysis of the reactivity of inhibitor molecules was carried out in the gas phase and with water as a solvent medium. Calculation of quantum chemical parameter values 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 ($\Delta E_{\text{b-d}}$). Based on the parameter results obtained, the best compound with potential as a corrosion inhibitor is α -Terpinene. Data on bond energy, Gibbs free energy (ΔG) and entropy (ΔS), bond length and bond angle were used to determine the interaction of α -Terpinene with Fe. The interaction that occurs is a chemical interaction because the ΔG value obtained is small from -40 kJ/mol, namely -201.142 kJ/mol.

Keywords : corrosion inhibitor, α -Terpinene, β -Caryophyllene, α -Elemene and α -Humulene, DFT