

BAB I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Korosi merupakan penurunan mutu logam akibat adanya reaksi elektrokimia dengan lingkungannya. Banyak faktor yang dapat menyebabkan korosi suatu material, salah satu diantaranya yakni pengaruh konsentrasi inhibitor korosi. Ada banyak metode untuk menghambat proses terjadinya korosi, salah satunya yaitu penggunaan inhibitor. Menurut bahan dasar pembuatannya, inhibitor korosi dapat dibedakan menjadi dua jenis yaitu inhibitor yang terbuat dari bahan anorganik dan organik. Inhibitor organik merupakan salah satu jenis inhibitor yang bersifat *non-toksik*, murah, sudah tersedia di alam, mudah diperbaharui dan tidak merusak lingkungan. Inhibitor organik tersebut diperoleh dengan mengekstrak beberapa bahan yang ada di alam (Sastri et al., 2011).

Sebagian besar inhibitor yang sering digunakan yaitu inhibitor organik karena inhibitor ini cenderung lebih ramah lingkungan. Inhibitor organik yang berasal dari ekstrak bahan alam yang dapat digunakan secara efektif yaitu senyawa yang mengandung atom N, O, P, S dan atom-atom yang mempunyai pasangan elektron bebas. Unsur-unsur yang mengandung pasangan elektron bebas ini nantinya dapat berfungsi sebagai ligan yang akan membentuk senyawa kompleks dengan logam. Beberapa penelitian telah dilakukan terhadap senyawa organik yang dapat dijadikan sebagai inhibitor korosi. Ekstrak bahan alam telah banyak digunakan sebagai senyawa inhibitor korosi seperti ekstrak kulit melinjo (*Gnetum gnemon. L*) (Emriadi et al., 2018), ekstrak daun kakao (*Theobroma cacao*) (Yetri et al., 2017), ekstrak daun singkong (*Manihot esculenta*) (Gusti et al., 2016) dan ekstrak daun suren merah (*Toona sinensis*) (Emriadi et al., 2016).

Metode untuk menentukan suatu senyawa dapat dikatakan sebagai inhibitor korosi terbagi menjadi dua yaitu metode komputasi dan metode eksperimen. Namun, metode eksperimen memiliki beberapa kekurangan seperti biayanya yang mahal dan waktu yang lama untuk mendapatkan hasil yang diinginkan. Oleh karena itu, dengan adanya perkembangan ilmu teknologi, telah banyak peneliti yang melakukan penelitian menggunakan metode komputasi.

Salah satu metode komputasi yaitu teori fungsi kerapatan (DFT). Metode DFT mengandalkan densitas dari elektron sebagai besaran dasarnya dan dapat menyelesaikan persamaan Scrodinger dengan lebih sederhana. Umumnya metode DFT mengarah pada struktur dan vibrasi energi yang lebih akurat dibandingkan dengan metode HF (Hartree Fock) untuk sistem logam transisi. Metode ini telah menjadi metode pilihan untuk senyawa logam transisi (Pongajaw et al., 2017)

Penelitian Adlis Santoni dkk (2015) mengenai minyak atsiri dari *Toona sinensis* dan uji aktivitas insektisida yang mana hasil penelitian ini menunjukkan bahwa senyawa α -Terpinen, β -Caryophilen, α -Elemen dan α -Humulen yang terdapat pada komponen Minyak Atsiri daun *Toona sinensis* merupakan komponen utama dan memiliki % area tertinggi dari hasil penelitian komponen Minyak Atsiri daun *Toona sinensis*. (Santoni, A., Nurdin, H., Manjang, Y., & Achmad, S. A., 2015). Senyawa α -Terpinen, β -Caryophilen, α -Elemen dan α -Humulen berpotensi sebagai inhibitor korosi besi dikarenakan memiliki ikatan rangkap dua pada kerangka strukturnya.

Berdasarkan uraian di atas, maka penulis tertarik untuk mempelajari senyawa α -terpinen, β -Caryophilen, α -elemen dan α -humulen sebagai inhibitor korosi dengan metode *density functional theory* (DFT).

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang yang telah dikemukakan sebelumnya, maka perumusan masalah dalam penelitian ini adalah :

1. Apakah kemampuan inhibisi korosi senyawa α -Terpinen, β - Caryophilen, α -Elemen dan α -Humulen dapat ditentukan dengan metode DFT?
2. Apakah ada hubungan parameter kimia kuantum dengan inhibisi korosi senyawa α -Terpinen, β - Caryophilen, α -Elemen dan α -Humulen?
3. Bagaimana pengaruh medium pelarut H₂O terhadap senyawa α -Terpinen, β -Caryophilen, α -Elemen dan α -Humulen?
4. Bagaimana interaksi senyawa α -Terpinen, β - Caryophilen, α -Elemen dan α -Humulen dengan permukaan logam Fe?

1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan dari penelitian ini adalah :

1. Menentukan inhibisi korosi senyawa α -Terpinen, β -Caryophilen, α -Elemen dan α -Humulen dengan metode DFT.
2. Menghitung nilai parameter kimia kuantum dari senyawa α -Terpinen, β -Caryophilen, α -Elemen dan α -Humulen.
3. Menentukan pengaruh medium pelarut H₂O terhadap senyawa α -Terpinen, β -Caryophilen, α -Elemen dan α -Humulen sebagai inhibitor korosi.
4. Mempelajari interaksi senyawa α -Terpinen, β -Caryophilen, α -Elemen dan α -Humulen dengan permukaan logam Fe.

1.4 Manfaat Penelitian

Hasil penelitian ini diharapkan dapat bermanfaat dan memberikan informasi untuk pendidikan, masalah lingkungan dan bidang lainnya yang memiliki kaitan dengan fungsi salah satu senyawa α -Terpinen, β -Caryophilen, α -Elemen dan α -Humulen sebagai inhibitor korosi. Penulis juga mengharapkan hasil penelitian secara kimia komputasi ini dapat melengkapi data eksperimen di Laboratorium.

