

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

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh

PUTRI SYIFA SHABRINA

NIM. 191041202



Dosen Pembimbing I : Dr. Imelda

Dosen Pembimbing II : Prof. Dr. Emriadi

**PROGRAM STUDI SARJANA
DEPARTEMEN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2023**

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

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh

PUTRI SYIFA SHABRINA

NIM. 1910412024



Dosen Pembimbing I : Dr. Imelda

Dosen Pembimbing II : Prof. DR. Emriadi

Skripsi ini diajukan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Program Studi 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 TEORITIK SENYAWA FITOKASIN SEBAGAI INHIBITOR KOROSI BESI MENGUNAKAN METODE *DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT)*

Oleh:

Putri Syifa Shabrina (1910412024)

Dr. Imelda, Prof. Dr. Emriadi, MS

Fitokasin merupakan salah satu jenis senyawa fitoaleksin dengan berat molekul rendah yang disintesis dan terakumulasi dalam sel tanaman setelah infeksi mikroba. Penelitian ini menggunakan paket program Gaussian 16W dengan metode perhitungan *Density Functional Theory (DFT)* dan basis set B3LYP/6-31G. Hasil optimasi menghasilkan struktur optimal molekul inhibitor, energi *Highest Occupied Molecular Orbital* (E_{HOMO}), energi *Lowest Unoccupied Molecular Orbital* (E_{LUMO}), contour HOMO dan LUMO, dan *Electrostatic Potential (ESP)*. Molekul yang dianalisis adalah fitokasin A - E. Analisis kereaktifan molekul inhibitor dilakukan dalam fasa gas dan dengan pelarut air menggunakan 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* ($\Delta E_{\text{b-d}}$). Berdasarkan hasil parameter yang didapatkan, senyawa fitokasin yang terbaik yang berpotensi sebagai inhibitor korosi besi dalam fasa gas adalah fitokasin E dan dengan pelarut air adalah fitokasin B. Interaksi fitokasin dengan Fe menggunakan data energi ikatan, energi bebas gibbs (ΔG) dan entropi (ΔS), panjang ikatan dan sudut dihedral. Hasil penelitian menunjukkan bahwa interaksi yang terjadi merupakan interaksi kimia dikarenakan interaksi antara fitokasin A dengan atom Fe memiliki nilai ΔG sebesar -537.00 kJ/mol.

Kata Kunci: Inhibitor, Korosi besi, Fitokasin, DFT

ABSTRAC

ANALYSIS OF PHYTOCASSANE COMPOUNDS AS AN IRON CORROSION INHIBITOR USING THE DFT METHOD

By:

Putri Syifa Shabrina (1910412024)

Dr. Imelda, Prof. Dr. Emriadi, MS

Phytocassane is a type of phytoalexin compound, a low molecular weight antimicrobial compound that is synthesized and accumulates in plant cells after microbial infection. 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 phytocassane A – E. Analysis of the reactivity of inhibitor molecules was carried out in the gas phase and with water as a solvent by calculating the values 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}). Based on the parameter results obtained, the best phytocassane compound which has the potential as an iron corrosion inhibitor in the gas phase is phytocassane E and with water solvent is phytocassane B. The interaction of phytocassane with Fe uses data on bond energy, Gibbs free energy (ΔG) and entropy (ΔS), bond length and dihedral angle. The results of the research show that the interaction that occurs is a chemical interaction because the interaction between phytocassane A and Fe atoms has a ΔG value of -537.00 kJ/mol.

Keywords: Inhibitor, Iron corrosion, Phytocassane, DFT