

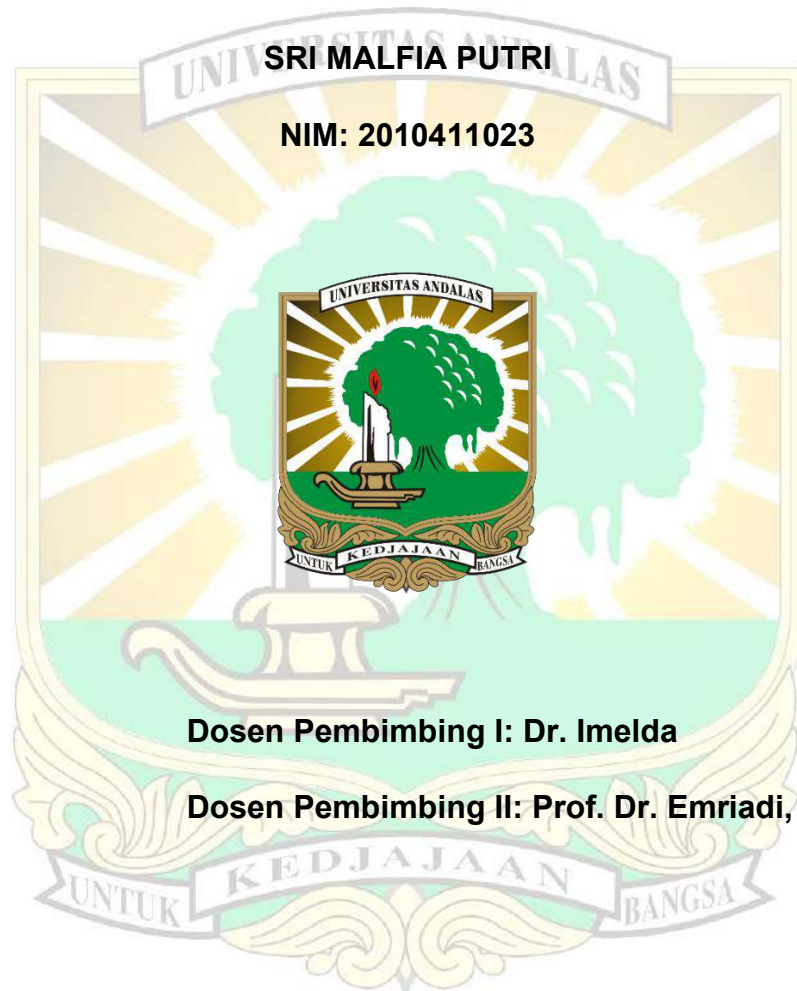
STUDI TEORITIK KOMPONEN MINYAK ATSIRI DAUN LENGKUAS (*Alpinia galanga*) GINGEROL DAN DIARYLHEPTANOIDA SEBAGAI INHIBITOR KOROSI BESI

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh:

SRI MALFIA PUTRI

NIM: 2010411023



Dosen Pembimbing I: Dr. Imelda

Dosen Pembimbing II: Prof. Dr. Emriadi, MS

PROGRAM SARJANA

DEPARTEMEN KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

2024

STUDI TEORITIK KOMPONEN MINYAK ATSIRI DAUN LENGKUAS (*Alpinia galanga*) GINGEROL DAN DIARYLHEPTANOIDA SEBAGAI INHIBITOR KOROSI BESI

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh:

SRI MALFIA PUTRI

NIM: 2010411023



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

Universitas Andalas

PROGRAM SARJANA

DEPARTEMEN KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

2024

INTISARI

STUDI TEORITIK KOMPONEN MINYAK ATSIRI DAUN LENGKUAS (*Alpinia galanga*) GINGEROL DAN DIARYLHEPTANOIDA SEBAGAI INHIBITOR KOROSI BESI

Oleh:

Sri Malfia Putri (2010411023)

Dr. Imelda, Prof. Dr. Emriadi, MS

*Pembimbing

Minyak atsiri pada daun lengkuas dapat digunakan sebagai inhibisi korosi karena mengandung senyawa metabolit sekunder fenolik. Minyak atsiri dihasilkan pada rimpang, daun, akar lengkuas. Diantara minyak atsiri tersebut adalah gingerol dan diarylheptanoida. Penelitian ini menggunakan paket program Gaussian 16W dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) dan basis set B3LYP/6-31G. Molekul yang dianalisa adalah gingerol dan turunan diarylheptanoida dengan simbol Inh-G, Inh-DH1, Inh-DH2, Inh-DH3 yang diteliti dalam fasa gas dan menggunakan pelarut metanol. Berdasarkan hasil penelitian komponen minyak atsiri daun lengkuas yang terbaik sebagai inhibitor korosi besi adalah Inh-G. Inhibisi korosi besi oleh komponen minyak atsiri daun lengkuas lebih baik dalam pelarut metanol. Interaksi Inhibitor dengan Fe (100) merupakan interaksi kimia dikarenakan panjang ikatan yang diperoleh antara Inh-G dengan atom Fe kecil dari 2,5 Å dan energi adsorpsi sebesar 145,277 kJ/mol tanpa pelarut dan 244,266 kJ/mol dengan pelarut metanol.

Kata kunci: Daun Lengkuas, Minyak Atsiri, Inhibitor, DFT, Logam Fe

ABSTRACT

THEORETICAL STUDY OF THE ESSENTIAL OIL COMPONENTS OF GALANGAL LEAVES (*ALPINIA GALANGA*) GINGEROL AND DIARYLHEPTANOIDA AS IRON CORROSION INHIBITORS

By:

Sri Malfia Putri (2010411023)

Dr. Imelda, Prof. Dr. Emriadi, MS

*Supervisor

The essential oil in galangal leaf can be used as a corrosion inhibitor because it contains phenolic secondary metabolite compounds. Essential oils are produced in rhizomes, leaves, roots of galangal. Among these essential oils are gingerol and diarylheptanoids. The study uses the Gaussian 16W program package with the Density Functional Theory (DFT) method and the B3LYP/6-31G base set. The molecules analyzed are gingerol and diaryleptanoid derivatives with symbols of Inh-G, InH-DH1, InH-DH2, InH-DH3 studied) in a gas phase and using a methanol solvent. Based on the research results, the component of galangal leaf essential oil which is best as an iron corrosion inhibitor is Inh-G. Inhibition of iron corrosion by the component of galangal leaf essential oil was better in methanol solvent. Inhibitor interaction with Fe (100) is a chemical interaction caused by the bond length obtained between Inh-G with a small Fe atom of 2,5 Å and the adsorption energy of 145,2777 kJ/mol without a solvent and 244,266 kJ/mol with a methanol solvent.

Keywords: Galangal Leaves, Essential Oil, Inhibitors, DFT, Metal Fe