

**STUDI TEORITIK INHIBISI KOROSI BESI OLEH KOMPONEN UTAMA
MINYAK ATSIRI DAUN PUCUK MERAH (*Syzygium myrtifolium* Walp.)**

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh

LIONY OKTA PUTRI

NIM: 2010413003



DOSEN PEMBIMBING I : Dr. Imelda

DOSEN PEMBIMBING II : Prof. Dr. Emriadi, MS

PROGRAM STUDI SARJANA

DEPARTEMEN KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2024

INTISARI

STUDI TEORITIK INHIBISI KOROSI BESI OLEH KOMPONEN UTAMA MINYAK ATSIRI DAUN PUCUK MERAH (*Syzygium myrtifolium* Walp.)

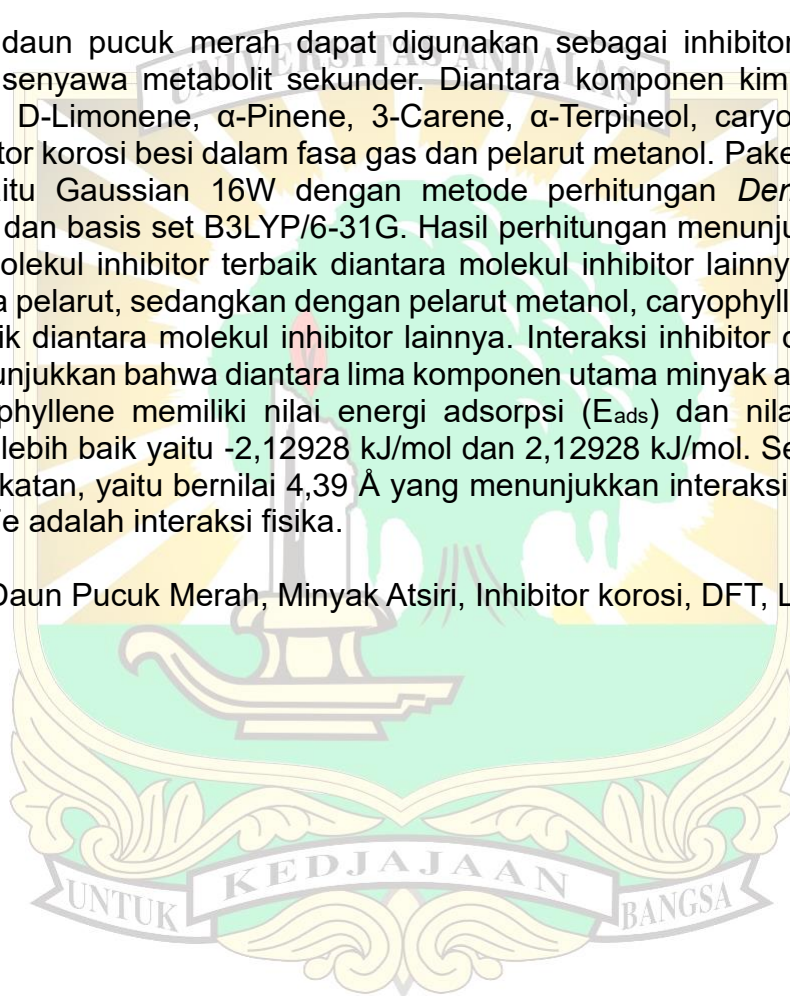
Oleh:

Liony Okta Putri (2010413003)

Dr. Imelda, Prof. Dr. Emriadi, MS

Minyak atsiri daun pucuk merah dapat digunakan sebagai inhibitor korosi karena mengandung senyawa metabolit sekunder. Diantara komponen kimia minyak atsiri tersebut yaitu D-Limonene, α -Pinene, 3-Carene, α -Terpineol, caryophyllene diteliti sebagai inhibitor korosi besi dalam fasa gas dan pelarut metanol. Paket program yang digunakan yaitu Gaussian 16W dengan metode perhitungan *Density Functional Theory (DFT)* dan basis set B3LYP/6-31G. Hasil perhitungan menunjukkan 3-Carene merupakan molekul inhibitor terbaik diantara molekul inhibitor lainnya untuk kondisi optimasi tanpa pelarut, sedangkan dengan pelarut metanol, caryophyllene merupakan inhibitor terbaik diantara molekul inhibitor lainnya. Interaksi inhibitor dengan molekul Fe (100) menunjukkan bahwa diantara lima komponen utama minyak atsiri daun pucuk merah, caryophyllene memiliki nilai energi adsorpsi (E_{ads}) dan nilai energi ikatan ($E_{binding}$) yang lebih baik yaitu -2,12928 kJ/mol dan 2,12928 kJ/mol. Sedangkan untuk nilai panjang ikatan, yaitu bernilai 4,39 Å yang menunjukkan interaksi antara inhibitor dan molekul Fe adalah interaksi fisika.

Kata Kunci: Daun Pucuk Merah, Minyak Atsiri, Inhibitor korosi, DFT, Logam Fe



ABSTRACT

THEORETICAL STUDY OF IRON CORROSION INHIBITOR OF RED SHOOT LEAF ESSENTIAL OIL MAIN COMPONENT (*Syzygium myrtifolium* Walp.)

By:

Liony Okta Putri (2010413003)

Dr. Imelda, Prof. Dr. Emriadi, MS

Red shoot leaf essential oil can be used as a corrosion inhibitor because it contains secondary metabolite compounds. Among the chemical components of essential oil, namely D-Limonene, α -Pinene, 3-Carene, α -Terpineol, caryophyllene were studied as iron corrosion inhibitors in the gas phase and methanol solvent. The program package used is Gaussian 16W with Density Functional Theory (DFT) calculation method and B3LYP/6-31G basis set. The calculation results show that 3-Carene is the best inhibitor molecule among other inhibitor molecules for optimization conditions without solvent, while with methanol solvent, caryophyllene is the best inhibitor among other inhibitor molecules. The interaction of inhibitors with Fe (100) molecules shows that among the five main components of red shoots leaf essential oil, caryophyllene has a better adsorption energy (E_{ads}) and binding energy ($E_{binding}$) value of -2.12928 kJ/mol and 2.12928 kJ/mol. As for the bond length value, it is 4.39 Å which indicates the interaction between the inhibitor and Fe molecules is a physical interaction.

Keywords: Red Shoot Leaf, Essential Oil, Corrosion Inhibitor, DFT, Fe Metal

