

BAB 1. PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Korosi adalah proses degradasi material atau kerusakan material baik secara kualitas maupun kuantitas akibat proses reaksi kimia dengan lingkungan (Ramadhani *et al*, 2020). Fenomena korosi mempengaruhi sebagian besar sektor industri dan dapat berdampak buruk terhadap lingkungan dan menghabiskan biaya yang banyak setiap tahunnya (Bouoidina *et al*, 2021). Besi dan paduannya banyak digunakan dalam aplikasi industri dan sangat rentan terhadap korosi (Berrissoul *et al*, 2020).

Beberapa cara untuk melindungi besi dan paduannya dari korosi antara lain pemilihan bahan konstruksi yang sesuai, pelapisan, proteksi katodik, proteksi anodik, dan penggunaan inhibitor. Inhibitor korosi yang banyak digunakan adalah inhibitor korosi hijau karena tidak mengandung logam berat atau senyawa beracun. Inhibitor korosi hijau dapat diambil dari ekstrak akar, biji, daun, batang, bunga, buah dari tanaman yang merupakan sumber senyawa inhibitor organik, ramah lingkungan dan tersedia secara luas (Golafshani *et al*, 2023; Bouoidina *et al*, 2021).

Penggunaan inhibitor salah satu strategi efektif untuk melindungi permukaan besi dari korosi. Inhibitor korosi melindungi logam dengan cara teradsorpsi pada permukaannya dan menghalangi terjadi kontak dengan lingkungannya, sehingga dapat mencegah korosi. Adsorpsi inhibitor pada permukaan terjadi melalui interaksi pasangan elektron dan/ elektron phi dari senyawa dengan permukaan besi. Molekul inhibitor dapat teradsorpsi pada permukaan melalui beberapa mekanisme berbeda termasuk adsorpsi kimia, adsorpsi fisik, dan adsorpsi fisiokimia yang membentuk lapisan untuk melindungi permukaan logam terhadap korosi (Golafshani *et al*, 2023).

Senyawa organik dalam ekstrak tanaman yang digunakan sebagai inhibitor korosi mengandung gugus heteroatom (N, O, S), ikatan π , cincin aromatik dan gugus polar misalnya -OH, C=O (Berrissoul *et al*, 2022). Contohnya senyawa yang terkandung pada ekstrak daun rimbang yang berpotensi sebagai inhibitor korosi yaitu asam heksadekanoat, etil ester (11,13%), 9,12,15 asam oktadekatrienoat, etil ester (Z,Z,Z) (7,47%) (Khunbutsri *et al*, 2022), metil 5-oksoprolinat (9,16%)

(Sani *et al*, 2022), alpha tokoferol-beta-d-manosida dan senyawa lainnya yang teridentifikasi (Murugesan *et al*, 2023).

Shauky (2023) telah melakukan secara eksperimen menggunakan ekstrak daun rimbang (*Solanum torvum*) dan efektif sebagai inhibitor korosi pada baja lunak dalam medium HCl. Ekstrak daun rimbang juga dilakukan secara eksperimen pada baja yang tertanam dalam beton (Dharmaraj *et al*, 2021). Dari penelusuran literatur, senyawa yang terkandung pada daun rimbang ini belum pernah diteliti sebagai inhibitor korosi secara komputasi oleh karena itu untuk memprediksi kemampuan dari senyawa tersebut dilakukanlah penelitian secara komputasi.

Dalam pengujian inhibitor korosi bisa dilakukan secara eksperimen dan komputasi. Komputasi dapat menyelidiki masalah kimia dengan menggunakan pendekatan-pendekatan kimia teoritis dikombinasikan dengan program komputer yang efisien untuk menentukan geometri molekul, orbital molekul, reaktivitas kimia, sifat kimia dan fisika molekul (Ayalew, 2022). Komputasi dapat dilakukan pengujian inhibitor korosi namun perlu dilakukan pendekatan eksperimen untuk memvalidasi hasil dari temuan secara teoritis. Metode komputasi yang biasa digunakan adalah teori fungsional densitas (DFT) karena metode ini yang efektif serta perhitungannya yang akurat (Ramadhani *et al*, 2020).

Penelitian mengenai inhibitor korosi besi secara komputasi telah dilakukan oleh Ramadhani *et al* (2020) mengenai turunan xanton menggunakan metode DFT dan Tullatif (2021) mengenai senyawa mirisitrin menggunakan metode DFT dan menyatakan bahwa perhitungan dengan DFT menunjukkan korelasi yang baik serta dilakukan perhitungan secara kimia kuantum dan memberikan informasi tentang parameter struktur dan orbital molekul.

Metode DFT pada molekul dapat dilakukan dengan berbagai kondisi seperti tanpa pelarut, pelarut air dan kondisi terprotonasi. Kondisi ini dapat mempengaruhi stabilitas, struktur dan nilai sifat elektroniknya. Penggunaan pelarut air untuk molekul inhibitor lebih mendekati kondisi pada lingkungan berair sedangkan terprotonasi atau penambahan proton pada molekul yang elektronegatif berada pada kondisi lingkungan asam (Ibrahim *et al*, 2023).

Parameter yang diperoleh dari metode *density functional theory* (DFT) digunakan untuk menentukan kemampuan inhibisi korosi seperti energi orbital

molekul tertinggi yang ditempati elektron (E_{HOMO}), energi orbital molekul tak terisi terendah (E_{LUMO}), momen dipol. Dari nilai E_{HOMO} dan E_{LUMO} yang telah diperoleh kemudian dapat dihitung nilai energi celah (ΔE), afinitas elektron (A), elektronegativitas (X), *hardness* (η), *softness* (σ), elektrofilisitas (ω), nukleofilisitas (ϵ), transfer elektron (ΔN) (Ramadhani *et al*, 2020).

Oleh karena itu, peneliti tertarik untuk melakukan pengujian analisis komputasi inhibisi korosi besi oleh senyawa kandungan ekstrak daun rimbang dengan pelarut dan tanpa pelarut menggunakan metode DFT.

1.2. Rumusan Masalah

1. Senyawa ekstrak daun rimbang mana yang lebih berpotensi sebagai inhibitor korosi pada besi berdasarkan parameter kimia kuantum?
2. Bagaimana pengaruh pelarut terhadap parameter kimia kuantum dari molekul yang berpotensi sebagai inhibitor korosi?
3. Bagaimana interaksi senyawa ekstrak daun rimbang dengan kristal Fe (1 1 0)?

1.3. Tujuan Penelitian

1. Menentukan senyawa ekstrak daun rimbang yang lebih berpotensi sebagai inhibitor korosi pada besi berdasarkan parameter kimia kuantum.
2. Menganalisis pengaruh pelarut terhadap parameter kimia kuantum dari molekul yang berpotensi sebagai inhibitor korosi.
3. Menganalisis interaksi senyawa ekstrak daun rimbang dengan kristal Fe (1 1 0).

1.4. Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan dapat memberikan informasi tentang senyawa kandungan ekstrak daun rimbang sebagai inhibitor korosi pada besi yang dilakukan secara komputasi dengan metode DFT dan dapat bermanfaat untuk mengendalikan kerugian akibat korosi.