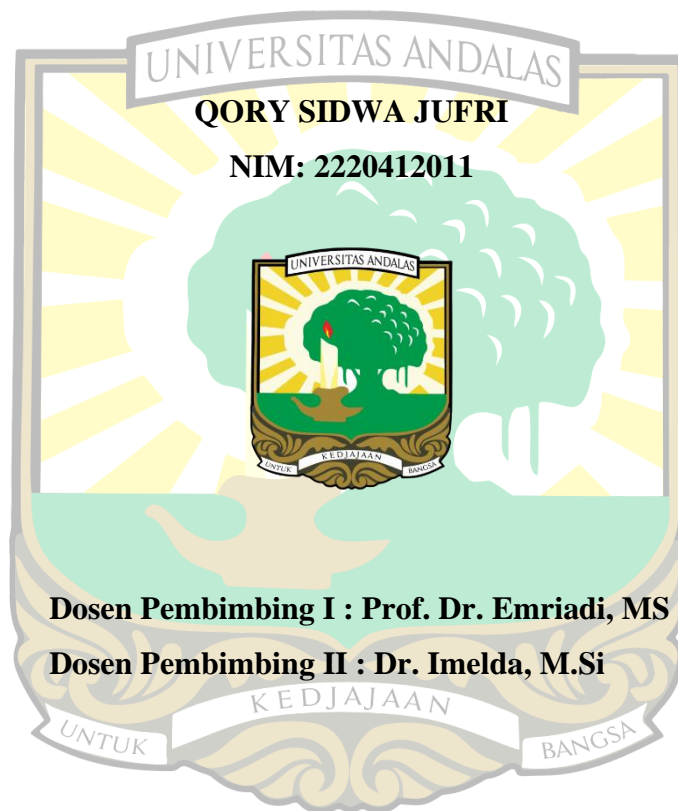


**ANALISIS KOMPUTASI INHIBISI KOROSI BESI OLEH SENYAWA
KANDUNGAN EKSTRAK DAUN RIMBANG (*Solanum torvum*) DENGAN
METODE *DENSITY FUNCTIONAL THEORY* (DFT)**

TESIS



**Dosen Pembimbing I : Prof. Dr. Emriadi, MS
Dosen Pembimbing II : Dr. Imelda, M.Si**

**PROGRAM STUDI MAGISTER KIMIA
DEPARTEMEN KIMIA FAKULTAS MIPA**

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2025

Analisis Komputasi Inhibisi Korosi Besi Oleh Senyawa Kandungan Ekstrak Daun Rimbang (*Solanum Torvum*) Dengan Metode *Density Functional Theory* (DFT)

Oleh: Qory Sidwa Jufri (2220412011)

(Di bawah bimbingan: Prof. Dr. Emriadi, MS dan Dr. Imelda, M.Si)

Abstrak

Besi merupakan salah satu logam yang paling banyak digunakan dalam industri. Penelitian ini dilakukan terhadap kinerja senyawa inhibitor pada ekstrak daun rimbang terhadap korosi besi berdasarkan beberapa pendekatan teoritis. Senyawa yang terkandung pada ekstrak daun rimbang yaitu neophytadiena, asam heksadekanoat, etil ester, 9,12,15 asam oktadekatrienoat, etil ester, 3,3',4',7-tetrahidroksiflavon, metil 5-oksoprolinat, alpha tokoferol-beta-d-manosida, 5-isopropil-2-metilfenil heptanoat, 1-bromo-3-nitrobenzena. Metode yang digunakan adalah *Density Functional Theory* (DFT) dan basis set B3LYP/6-31G dalam fasa gas, pelarut air dan terprotonasi. Parameter kimia kuantum yang diperoleh dari hasil optimasi adalah E_{HOMO} , E_{LUMO} , momen dipol, energi gap (ΔE), elektronegativitas (χ), potensial ionisasi (I), afinitas elektron (A), *hardness* (η), *softness* (σ), elektrofilitas (ω) dan nukleofilitas (ϵ). Parameter kekuatan interaksi inhibitor dengan atom Fe yaitu transfer muatan (ΔN), energi interaksi (ΔE_{ψ}), dan energi *back-donation* ($\Delta E_{\text{b-d}}$). Hasil perhitungan menunjukkan 3,3',4',7-tetrahidroksi flavon, alpha tokoferol-beta-d-manosida dan 1-bromo-3-nitrobenzena merupakan molekul inhibitor yang paling berpotensi dari senyawa lain dalam fasa gas, pelarut air dan terprotonasi berdasarkan parameter kimia kuantum. Penggunaan pelarut air dan protonasi dapat meningkatkan sifat polaritas molekul. Interaksi inhibitor dengan kristal Fe (1 1 0) dilihat dari energi adsorpsi (E_{ads}) dan energi ikatan (E_{binding}). Ketiga senyawa paling berpotensi yang terkandung pada ekstrak rimbang, alpha tokoferol-beta-d-manosida memiliki nilai paling besar yaitu 200,13 kJ/mol dan nilai panjang ikatan Inh-Fe terkecil yaitu 1,84 Å. Data panjang ikatan dan energi ikatan ketiga senyawa tersebut menunjukkan bahwa interaksi antara inhibitor dan Fe adalah interaksi kimia.

Kata Kunci: *Solanum torvum*, Inhibitor korosi, DFT, Parameter kuantum

Computational Analysis of Iron Corrosion Inhibition by Compounds in Rimbang Leaf Extract (*Solanum torvum*) Using Density Functional Theory Method (DFT)

by: Qory Sidwa Jufri (2220412011)

(Supervised by: Prof. Dr. Emriadi, MS and Dr. Imelda, M.Si)

Abstract

Iron is one of the most widely used metals in industry. This study was conducted on the performance of inhibitor compounds in rimbang leaf extract against iron corrosion based on several theoretical approaches. Compounds contained in rimbang leaf extract, namely neophytadiene, hexadecenoic acid, ethyl ester, 9,12,15 octadecatrienoic acid, ethyl ester, 3,3',4',7-Tetrahydroxyflavone, methyl 5-oxoprolinate, alpha-tocopherol-beta-d-mannoside, 5-isopropyl-2-methylphenyl heptanoate, 1-bromo-3-nitro benzene. The method used is Density Functional Theory (DFT) and B3LYP/6-31G basis set in the gas phase, water solvent and protonated. The chemical parameters of the spots obtained from the optimization results are E_{HOMO} , E_{LUMO} , dipole moment, energy gap (ΔE), electronegativity (χ), ionization potential (I), electron affinity (A), hardness (η), softness (σ), electrophilicity (ω), and nucleophilicity (ϵ). The parameters of the strength of the inhibitor interaction with the Fe atom are charge transfer (ΔN), interaction energy (ΔE_{ψ}), and back-donation energy ($\Delta E_{\text{b-d}}$). The calculation results show that 3,3',4',7 tetrahydroxyflavone, alpha-tocopherol beta-mannoside, and 1-bromo-3-nitro benzene are the most potential inhibitor molecules from other compounds in the gas phase, water solvent, and protonated based on quantum chemical parameters. The use of water solvent and protonation can increase the polarity properties of the molecule. The interaction of the inhibitor with Fe (1 1 0) crystals is seen from the adsorption energy (E_{ads}) and binding energy (E_{binding}). The third most potential compound contained in rimbang extract, alpha-tocopherol beta-mannoside has the largest value of 200.13 kJ/mol with an Inh-Fe bond length of 1.84 Å. Based on the bond length and bond energy for the three compounds indicate that the interaction between the inhibitor and Fe is a chemical interaction.

Keywords: *Solanum torvum*, Corrosion inhibitor, DFT, quantum parameters