

**Analisis Teoritik Senyawa Flavonoid Terprenilasi dari Ekstrak Tanaman Sukun
(*Artocarpus altilis*) sebagai Inhibitor Korosi Besi**



INTISARI

Analisis Teoritik Senyawa Flavonoid Terprenilasi dari Ekstrak Tanaman Sukun (*Artocarpus altilis*) sebagai Inhibitor Korosi Besi

Oleh:

Muhammad Raffi Azhariadi (NIM: 2010413010)

Prof. Dr. Yeni Stiadi, MS.*, Dr. Imelda.*

***Pembimbing**

Senyawa flavonoid terprenilasi pada ekstrak tanaman sukun dapat digunakan sebagai inhibitor korosi karena memiliki gugus π dan gugus π berkonjugasi. Penelitian ini menggunakan paket program Gaussian 16W dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) dan basis set B3LYP/6-31G. Molekul yang dianalisis adalah kudraflavon C, kudraflavon B, morusin, dan santohumol yang diteliti dalam fasa gas dan menggunakan pelarut air. Berdasarkan hasil penelitian komponen senyawa flavonoid terprenilasi dari ekstrak tanaman sukun yang terbaik sebagai inhibitor korosi besi adalah santohumol. Inhibisi korosi besi oleh senyawa flavonoid terprenilasi dari ekstrak tanaman sukun lebih baik dalam pelarut air. Interaksi Inhibitor dengan Fe (110) merupakan interaksi kimia dikarenakan panjang ikatan yang diperoleh antara santohumol dengan atom Fe kecil dari 2 Å dan energi adsorpsi sebesar 130,215 kJ/mol pada fasa gas dan 233,442 kJ/mol dengan pelarut air. Hasil ini menunjukkan bahwa santohumol adalah inhibitor korosi besi yang potensial dan air adalah pelarut yang cocok untuk santohumol.

Kata kunci: Senyawa flavonoid terprenilasi, Ekstrak tanaman sukun, Inhibitor korosi, Metode DFT, Energi interaksi.

ABSTRACT

Analisis Teoritik Senyawa Flavonoid Terprenilasi dari Ekstrak Tanaman Sukun (*Artocarpus altilis*) sebagai Inhibitor Korosi Besi

By:

Muhammad Raffi Azhariadi (NIM: 2010413010)

Prof. Dr. Yeni Stiadi, MS.*, Dr. Imelda.*

***supervisor**

Prenylated flavonoid compounds from breadfruit (*Artocarpus altilis*) extract can be used as corrosion inhibitors due to the presence of π -electron systems and conjugated π systems. This study employed the Gaussian 16W software package using the Density Functional Theory (DFT) method with the B3LYP/6-31G basis set. The molecules analyzed were kudraflavone C, kudraflavone B, morusin, and santohumul, which were examined both in the gas phase and in water as solvent. Based on the results, the most effective prenylated flavonoid compound from breadfruit extract as an iron corrosion inhibitor was identified to be santohumul. The inhibition of iron corrosion by these compounds was found to be more effective in water. The interaction between the inhibitor and Fe (110) was classified as chemical adsorption, as indicated by the bond length between santohumul and Fe atom being less than 2 Å and adsorption energies of 130.215 kJ/mol in the gas phase and 233.442 kJ/mol in water. These findings suggest that santohumul is a promising iron corrosion inhibitor and that water is a suitable solvent for santohumul.

Keywords: Terpenylated Flavonoid Compounds, Breadfruit plants Extract, Corrosion Inhibitor, DFT Method, Interaction Energy.