

BAB I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Korosi merupakan kerusakan suatu material atau logam akibat interaksinya dengan lingkungan yang bersifat korosif (Obi-Egbedi et al., 2011). Korosi pada logam dapat menimbulkan masalah besar, terutama dalam dunia industri karena menyebabkan kerugian dalam setiap tahunnya. Oleh sebab itu, untuk memperkecil kerugian perlu dilakukan pencegahan korosi dengan menggunakan inhibitor korosi (Shihab dan Al-Doori, 2014). Inhibitor korosi umumnya berasal dari senyawa-senyawa anorganik dan organik. Senyawa anorganik seperti fosfat, kromat dan dikromat merupakan inhibitor anorganik yang digunakan sebagai inhibitor korosi, akan tetapi penggunaannya perlu dibatasi karena senyawa ini sebagian besar beracun dan tidak ramah lingkungan (Muthukrishnan et al., 2015).

Salah satu solusi yang tepat untuk mengganti penggunaan inhibitor anorganik adalah menggunakan inhibitor organik yang berasal dari ekstrak bahan alam yang mengandung atom N, O, P, S dan atom-atom yang mempunyai pasangan elektron bebas. Unsur-unsur yang mengandung pasangan elektron bebas ini nantinya dapat berfungsi sebagai ligan yang akan membentuk senyawa kompleks dengan logam (Nathiya dan Raj, 2017). Ekstrak bahan alam telah banyak digunakan sebagai senyawa inhibitor korosi seperti ekstrak kulit melinjo (*Gnetum gnemon. L*) (Emriadi et al., 2018), ekstrak daun kakao (*Theobroma cacao*) (Yetri et al., 2017), ekstrak daun singkong (*Manihot esculenta*) (Gusti et al., 2016) dan ekstrak daun suren merah (*Toona sinensis*) (Emriadi et al., 2016).

Beberapa penelitian telah dilakukan terhadap senyawa organik yang dapat dijadikan sebagai inhibitor korosi, salah satunya penelitian terhadap efisiensi inhibisi korosi senyawa mirisetin secara eksperimen maupun secara teoritis oleh Haldhar et al., (2018). Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa mirisetin yang terdapat pada ekstrak buah ara merupakan komponen utama sebagai inhibitor korosi. Karena senyawa mirisetin memiliki heteroatom (O) yang terikat pada cincin heterosiklik yang berperan sebagai donor elektron ke atom Fe^{2+} pada permukaan logam. Efisiensi inhibisi korosi yang diperoleh pada konsentrasi 500mg/L ekstrak buah ara dengan suhu 298K sebesar 92,26%. Oleh sebab itu

peneliti tertarik membandingkan inhibisi korosi senyawa mirisetin dan turunannya (mirisetin 3-O-L-rhamnosida (mirisitrin), mirisetin 3- α -L-arabinofuranosida dan mirisetin 3'-glukosida) (Arumugam et al., 2014). Kemudian mempelajari interaksi senyawa mirisetin dan turunannya dengan penambahan atom Fe dan penambahan substituen pada senyawa inhibisi korosi tertinggi.

Pada penelitian ini digunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dengan basis set B3LYP/6-31G (d,p) untuk optimasi molekul senyawa mirisetin dan turunannya. Metode ini dipilih karena data yang diperoleh berkorelasi secara signifikan dengan hasil eksperimen seperti yang dilakukan oleh Khaled, (2006); Obot dan Obi-Egbedi, (2010). Udhayakala et al., (2012) penelitian menggunakan metode DFT dengan basis set B3LYP/6-31G (d,p) untuk mempelajari inhibisi korosi dari tiga senyawa flavonoid (apigenin (C1), luteolin-3'-metil eter (C2) dan kuersetin-3,3'-dimetileter (C3)). Arthur et al., (2019) juga melakukan penelitian menggunakan metode DFT dengan basis set B3LYP/6-31G (d,p) untuk mempelajari inhibisi korosi dari senyawa [(4-hidroksi-6-metil-2-okso-2H-piran-3-il)-fenil-metil]-urea (HU1) dan [(4-hidroksi-6-metil-2-okso-2H-piran-3-il)-(4-metoksi-fenil)-metil]-urea (HU2).

Parameter yang diperoleh dari hasil optimasi geometri pada penelitian ini yaitu energi HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*), energi LUMO (*Lowest Uncoppied Molecular Orbital*), momen dipol (μ) dan energi total (E_{tot}) (Gece, 2008). Dari nilai E_{HOMO} dan E_{LUMO} yang diperoleh kemudian dihitung nilai energi gap (ΔE), potensial ionisasi (I), afinitas elektron (A), elektronegativitas (χ), *hardness* (η), *softness* (σ), dan transfer elektron (ΔN) (Ikpi dan Abeng, 2018). Energi total (E_{tot}) untuk menghitung energi interaksi ($\Delta E_{interaksi}$) dan energi ikatan ($\Delta E_{binding}$) (Xia et al., 2008).

1.2 Perumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang yang telah dikemukakan sebelumnya, maka perumusan masalah dalam penelitian ini adalah :

1. Apakah kemampuan inhibisi korosi senyawa mirisetin dan turunannya dapat ditentukan dengan metode DFT?

2. Apakah ada hubungan parameter kimia kuantum dengan inhibisi korosi senyawa mirisetin dengan turunannya?
3. Apakah penambahan substituen berpengaruh terhadap inhibisi korosi?
4. Bagaimana interaksi senyawa mirisetin dan turunannya dengan permukaan logam Fe?

1.3 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan penelitian adalah :

1. Menentukan inhibisi korosi senyawa mirisetin dan turunannya dengan metode DFT.
2. Menghitung nilai parameter kimia kuantum dari senyawa mirisetin dengan turunannya.
3. Mengetahui pengaruh penambahan substituen terhadap inhibisi korosi.
4. Mempelajari interaksi senyawa mirisetin dan turunannya dengan permukaan logam Fe.

1.4 Manfaat Penelitian

Hasil penelitian ini diharapkan dapat bermanfaat dan memberikan informasi untuk pendidikan, masalah lingkungan, dan bidang lainnya yang memiliki kaitan dengan fungsi salah satu senyawa mirisetin dan turunannya sebagai inhibitor korosi. Penulis juga mengharapkan hasil penelitian secara kimia komputasi ini dapat melengkapi data eksperimen di Laboratorium.

