

**STUDI KOMPUTASI SENYAWA LUTEOLIN DAN TURUNANNYA SEBAGAI
INHIBITOR KOROSI BESI DENGAN METODE DFT**

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh

FADHILATUL WAHYU

1610411011



**JURUSAN S1 KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2020**

INTISARI

STUDI KOMPUTASI SENYAWA LUTEOLIN DAN TURUNANNYA SEBAGAI INHIBITOR KOROSI BESI DENGAN METODE DFT

Oleh:

Fadhilatul Wahyu (1610411011)
Prof. Dr. Emriadi, MS dan Yeni Stiadi, MS

Inhibitor korosi senyawa Luteolin dan turunannya (L-CH₃, L-NH₂, L-NO₂, L-CN) telah dikaji menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada tingkatan teori B3LYP/6-31G dengan program Gaussian. Pengaruh substitusi gugus pendorong (CH₃, NH₂) dan penarik (NO₂, CN) elektron dipelajari terhadap inhibisi korosi besi secara teori untuk senyawa Luteolin dan turunannya. Parameter kimia kuantum yang dihitung adalah E_{HOMO} , E_{LUMO} , energi celah (ΔE), potensial ionisasi (I), afinitas elektron (A), elektronegativitas (χ), *global hardness* (η), *global softness* (σ), elektrofilisitas (ω), kerapatan muatan Mulliken, energi *back-donation* ($E_{\text{b-d}}$), transfer elektron (ΔN) dan energi interaksi (E_{int}). Perhitungan teoritis menunjukkan bahwa senyawa L-NH₂ memiliki E_{I} yang paling tinggi (91,1314%) dibandingkan senyawa turunan lain. Urutan kenaikan inhibisi secara teori untuk penambahan gugus pendorong dan penarik elektron ialah CH₃ < CN < NO₂ < NH₂. Kajian teoritis ini akan berkontribusi besar pada senyawa inhibitor organik untuk mengetahui apakah ada hubungan yang jelas antara efek inhibitor dan sifat kuantum.

Kata kunci: Inhibisi Korosi, Luteolin dan Turunannya, DFT