

BAB I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Metode komputasi dapat digunakan untuk menghitung parameter kimia kuantum dan menggambarkan struktur molekul senyawa organik sebagai inhibitor korosi. Salah satu metode komputasi adalah *Density Functional Theory* (DFT) yang dapat digunakan untuk menentukan mekanisme reaksi inhibisi korosi dari senyawa organik. DFT juga dapat digunakan untuk menganalisa karakteristik interaksi inhibitor, dan mengetahui pengaruh sifat struktural inhibitor pada proses korosi¹⁻⁴.

Inhibitor korosi dapat diklasifikasikan atas inhibitor anorganik dan organik. Inhibitor anorganik berasal dari senyawa-senyawa anorganik misalnya fosfat, kromat, molibdat yang umumnya bersifat toksik. Dengan demikian digunakan inhibitor yang bersifat ramah lingkungan dengan menggunakan inhibitor organik. Inhibitor organik dapat berasal dari ekstrak bahan alam yang mengandung atom O, N, S, P dan atom yang mempunyai pasangan elektron bebas. Atom yang mengandung pasangan elektron bebas akan berfungsi sebagai ligan dan membentuk senyawa kompleks dengan logam. Pembentukan kompleks tersebut dapat berikatan secara kovalen koordinasi (adsorpsi kimia) dan elektrostatik (adsorpsi fisika)⁵⁻⁸.

Beberapa penelitian telah dilakukan secara eksperimen maupun teoritis mengenai inhibitor korosi dengan menggunakan ekstrak tumbuhan contohnya ekstrak dari daun kacang gude (*Pigeon pea*). Ekstrak daun kacang gude ini mengandung senyawa Luteolin yang memiliki heteroatom yaitu O dan atom yang mempunyai pasangan elektron bebas yang berikatan pada cincin heterosiklik sehingga dapat berperan sebagai donor elektron. Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa Luteolin memiliki efisiensi inhibisi sebesar 91% pada suhu 300 K⁹. Dengan demikian pada penelitian ini dilakukan uji teoritis untuk membahas lebih lanjut tentang senyawa Luteolin beserta turunannya yang tersubstitusi gugus pendorong dan penarik elektron menggunakan metode DFT pada basis set B3LYP/6-31G^{10,11}. Substituen yang digunakan tersebut memiliki pengaruh terhadap luas permukaan atau ukuran molekul inhibitor¹². Biasanya luas yang akan terkorosi, jika semakin luas ukuran molekul inhibitor yang digunakan maka kemampuannya dalam menutupi permukaan logam semakin besar¹³.

Output data yang diperoleh berupa struktur geometri molekul, sedangkan parameter yang diperoleh dari hasil optimasi pada penelitian ini ialah E_{HOMO} , E_{LUMO} , nilai energi celah (ΔE), potensial ionisasi (I), afinitas elektron (A), elektronegativitas (χ), *global hardness* (η), *global softness* (σ), elektrofilitas (ω), kerapatan muatan Mulliken, energi *back-donation* ($E_{\text{b-d}}$), transfer elektron (ΔN), energi interaksi (E_{int}) dan $E_{\text{Iteori}} \%$ ^{9,14}.

1.2 Rumusan Masalah

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

1. Apakah kemampuan inhibisi korosi senyawa Luteolin dan turunannya dapat ditentukan dengan metode DFT?
2. Apakah ada hubungan parameter kimia kuantum dengan inhibisi korosi senyawa Luteolin dan turunannya?
3. Apakah substituen (gugus pendorong dan penarik elektron) berpengaruh terhadap efisiensi inhibisi senyawa Luteolin dan turunannya?
4. Apakah senyawa Luteolin dan turunannya memiliki interaksi dengan permukaan logam besi?

1.3 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan penelitian ini adalah :

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

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 Luteolin dan turunannya sebagai inhibitor korosi. Selain itu, juga diharapkan dapat digunakan untuk melengkapi data eksperimen di laboratorium.