

Studi Komputasi Inhibisi Korosi Besi oleh Senyawa α -D-Glukopiranosa,4-O, α - D-Galaktopiranosil dan Turunannya dengan Metode DFT

SKRIPSI SARJANA KIMIA

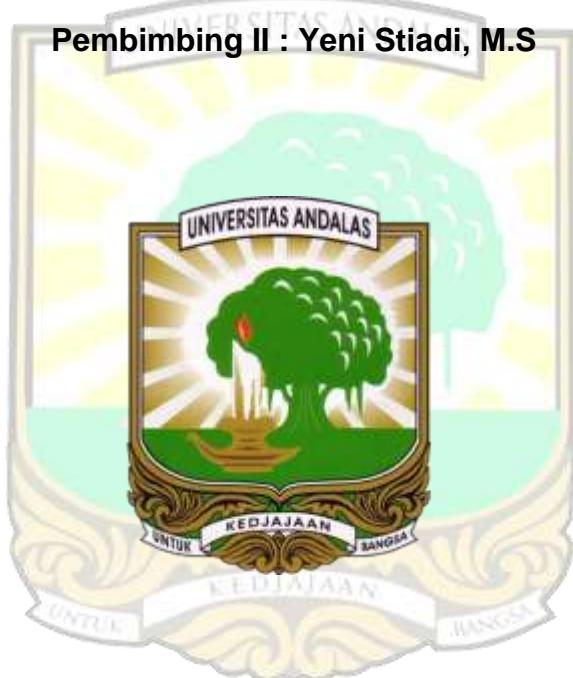
OLEH:

ANNISA LATULKHAIRA

BP: 1610411031

Pembimbing I : Prof. Dr. Emriadi

Pembimbing II : Yeni Stiadi, M.S



JURUSAN KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

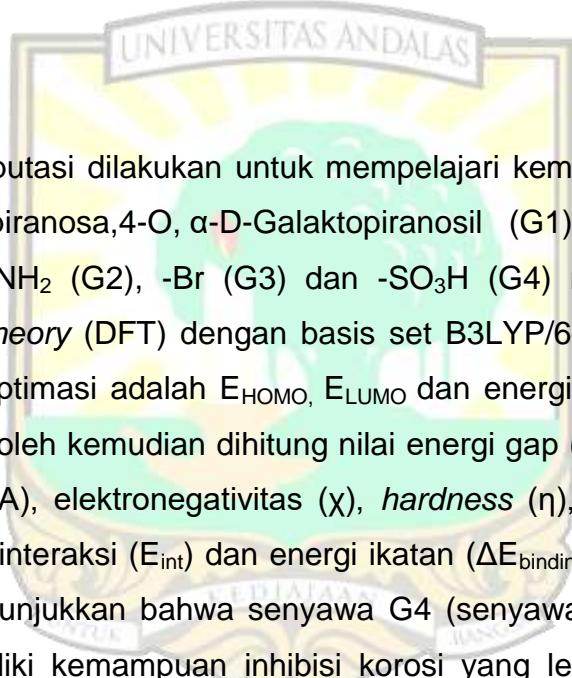
2020

INTISARI

Studi Komputasi Inhibisi Korosi Besi oleh Senyawa α -D-Glukopiranosa,4-O, α -D-Galaktopiranosil dan Turunannya dengan Metode DFT

Oleh:

Annisa Latulkhaira (1610411031)
Prof. Dr. Emriadi*, Yeni Stiadi, MS*
Pembimbing*



Penelitian kimia komputasi dilakukan untuk mempelajari kemampuan inhibisi korosi senyawa α -D-Glukopiranosa,4-O, α -D-Galaktopiranosil (G1), senyawa G1 yang tersubstitusi gugus $-\text{NH}_2$ (G2), $-\text{Br}$ (G3) dan $-\text{SO}_3\text{H}$ (G4) menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dengan basis set B3LYP/6-31G. Parameter yang diperoleh dari hasil optimasi adalah E_{HOMO} , E_{LUMO} dan energi total. 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), transfer elektron (ΔN), energi interaksi (E_{int}) dan energi ikatan ($\Delta E_{\text{binding}}$). Perhitungan secara kimia komputasi menunjukkan bahwa senyawa G4 (senyawa G1 yang tersubstitusi gugus $-\text{SO}_3\text{H}$) memiliki kemampuan inhibisi korosi yang lebih baik dibandingkan senyawa G1, G2, dan G3.

Kata kunci: DFT, E_{HOMO} , E_{LUMO} , inhibisi korosi

ABSTRACT

Computational Study of Iron Corrosion Inhibition with α -D-Glucopyranose,4-O, α -D-Galactopyranosyl Compounds and their Derivatives using the DFT Method

by :

**Annisa Latulkhaira (1610411031)
Prof. Dr. Emriadi*, Yeni Stiadi, MS*
Supervisor***

Computational chemistry research was conducted to study the corrosion inhibition ability of α -D-Glucopyranose,4-O, α -D-Galactopyranosyl (G1) compounds, group-substituted G1 compounds -NH₂ (G2), -Br (G3) and -SO₃H (G4) using the Density Functional Theory (DFT) method with the basis set B3LYP / 6-31G. The parameters obtained from the optimization results are E_{HOMO}, E_{LUMO} and total energy. From the E_{HOMO} and E_{LUMO} values obtained the value of the energy gap (ΔE), ionization potential (I), electron affinity (A), electronegativity (χ), hardness (η), softness (σ), electron transfer (ΔN), energy interaction (E_{int}) and bond energy ($\Delta E_{binding}$) are calculated. Computational chemistry calculations show that the compound G4 (G1 compound substituted for the group -SO₃H) have better corrosion inhibition abilities than compounds G1, G2, and G3.

Keywords: DFT, EHOMO, ELUMO, corrosion inhibition