

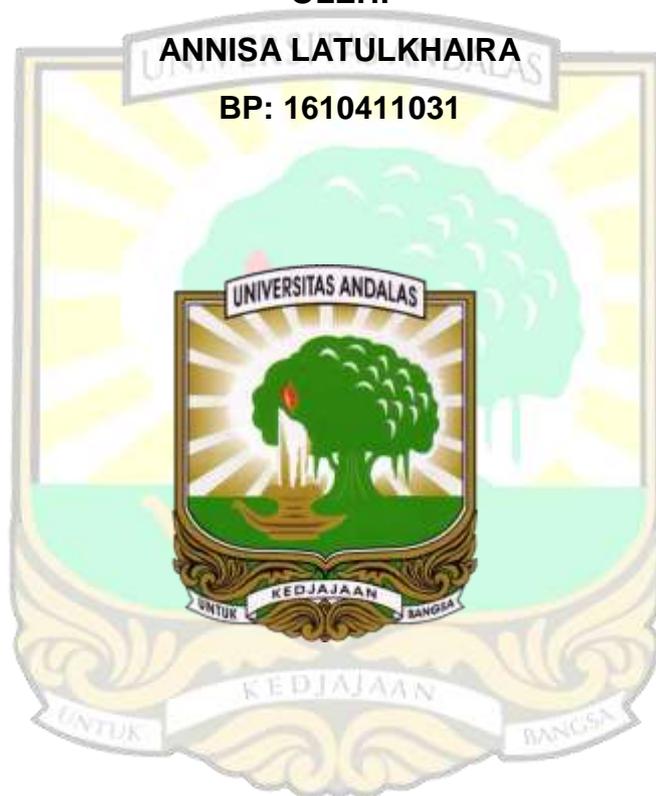
**Studi Komputasi Inhibisi Korosi Besi oleh Senyawa α -D-Glukopiranos,4-O, α -
D-Galaktopiranosil dan Turunannya dengan Metode DFT**

SKRIPSI SARJANA KIMIA

OLEH:

ANNISA LATULKHAIRA

BP: 1610411031



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

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

OLEH:

ANNISA LATULKHAIRA

BP: 1610411031



Skripsi diajukan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Andalas

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

HALAMAN PENGESAHAN

"Studi Komputasi Inhibisi Korosi Besi oleh Senyawa α -D-Glukopiranososa,4-O, α -D-Galaktopiranosil dan Turunannya dengan Metode DFT", skripsi oleh Annisa Latulkhaira (BP: 1610411031) sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains (S1) pada Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Andalas, Padang.

Disetujui Oleh:

Pembimbing I



Prof. Dr. Emriadi

NIP: 1961196204091987031003

Pembimbing II

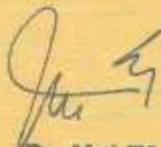


Yeni Stiadti, MS

NIP: 196310291989011001

Mengetahui:

Ketua Jurusan Kimia



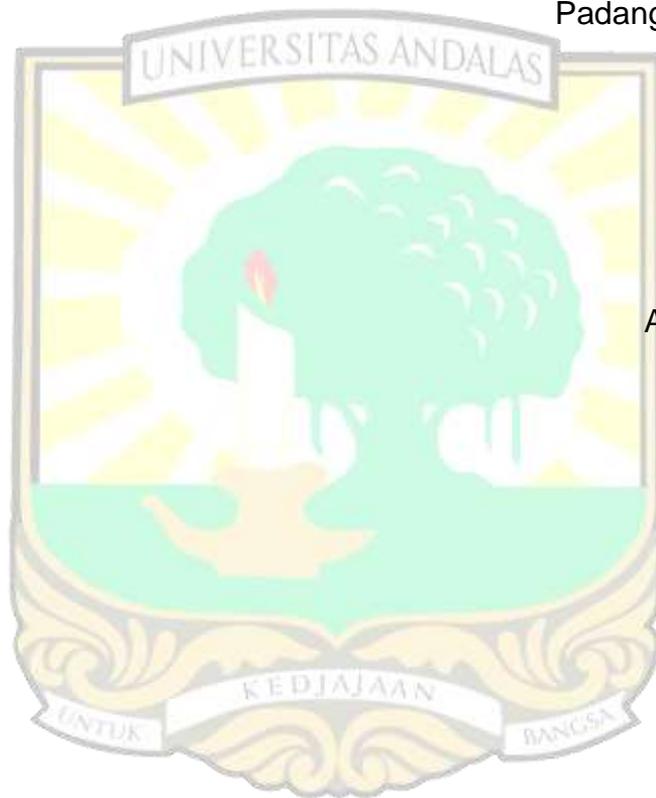
Dr. Mai Efdi

NIP: 197205301999031003

HALAMAN PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi ini tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu Perguruan Tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya juga tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah tertulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Padang, 21 Oktober 2020



A handwritten signature in black ink, appearing to read "Annisa", is placed over a light blue rectangular background.

Annisa Latulkhaira

HALAMAN PERSEMBAHAN



Alhamdulillahirabbil'alamiin..

Rasa syukur yang tiada hentinya hamba ucapkan kepada Sang Maha Pencipta dan shalawat serta salam untuk Baginda Rasulullah SAW. Tak terasa waktu bergulir begitu cepat sehingga 4 tahun lebih telah berlalu dan akhirnya aku sampai ke titik ini. Aku sadar ini bukanlah akhir dari perjuangan namun ini adalah awal untuk perjuangan selanjutnya dengan medan yang lebih menantang

Kupersembahkan karya kecilku ini dengan ketulusan dan keikhlasan hati sebagai bakti dan cintaku pada Papa (Yulizar) dan Ibu (Leni) yang tanpa hentinya selama ini memberikan semangat, doa dan kasih sayangnya. Apa yang aku raih ini tak lepas juga dari dukungan adikku (Wiska, Lathif, Satria dan Dira)

Terimakasih untuk papa dan Ibu yang selama ini senantiasa mendoakan disetiap sujud serta memberikan dukungan yang penuh cinta untukku. Aku sadar ini sungguh tidaklah sebanding dengan apa yang telah papa dan mama berikan kepadaku. Pengorbananmu tiada dapat terbalas hanya dengan selembar kertas yang bertuliskan cinta dan persembahan ini. Namun semoga ini dapat menjadi langkah awal untuk membuat papa dan ibu bangga, karena aku sadar selama ini belum bisa memberikan yang terbaik

Pa, bu maafkan aku belum bisa mewujudkan keinginan papa dan Ibu untuk lulus dengan predikat terbaik. Tapi aku akan berusaha kedepannya untuk memberikan yang terbaik. Doakan aku terus ya Bu, Pa.

Terimakasih untuk dosen pembimbingku (Bapak Prof. Dr. Emriadi, MS dan Bapak Yeni Stiadi, MS) yang dengan sabarnya membimbing, memberikan saran dan arahan dalam perjalanan menuju sarjana ini. Semoga ilmu yang telah bapak berikan bermanfaat dan berguna serta bernilai pahala disisi-Nya. Aamiin..

INTISARI

Studi Komputasi Inhibisi Korosi Besi oleh Senyawa α -D-Glukopiranososa,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-Glukopiranososa,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 ($\Delta E_{\text{binding}}$) 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, E_{HOMO} , E_{LUMO} , corrosion inhibition

UCAPAN TERIMA KASIH

Syukur Alhamdulillah penulis ucapkan kehadiran Allah SWT atas segala karunia dan rahmat-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan penelitian dan penyusunan penulisan skripsi dengan judul “ Studi Komputasi Inhibisi Korosi Besi oleh Senyawa α -D-Glukopiranosida, 4-O, α -D-Galaktopiranosil dan Turunannya dengan Metode DFT” sebagai syarat untuk menyelesaikan program studi Kimia pada Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Andalas Padang. Dalam penyusunan skripsi ini penulis banyak mendapat bimbingan, arahan, nasihat, bantuan serta dorongan dari berbagai pihak. Pada kesempatan ini penulis ingin menyampaikan ucapan terimakasih yang sebesar-besarnya kepada:

1. Keluarga tercinta (papa, Ibu, Bunda, Wiska, Lathif, Satria dan Dira) yang senantiasa memberikan dukungan dalam bentuk apapun sehingga penulis semangat dalam menyelesaikan skripsi ini.
2. Bapak Prof. Dr. Emriadi, MS selaku pembimbing I dan Bapak Yeni Stiadi, MS selaku dosen pembimbing II yang telah banyak memberikan ilmu, bimbingan, saran serta dukungan dalam pelaksanaan penelitian dan penyusunan skripsi ini.
3. Bapak Prof. Dr. Hermansyah Aziz, Ibu Imelda M, Si dan Ibu Dr. rer. nat Syafrizayanti selaku dosen penguji yang telah memberikan saran dan masukan dalam menyempurnakan skripsi ini.
4. Bapak Dr. Mai Efdi selaku ketua Jurusan Kimia.
5. Bapak Dr. Syukri selaku koordinator pendidikan Jurusan Kimia.
6. Ibu Dr. Refilda selaku dosen pembimbing akademik yang telah memberikan pegarahan akademik selama masa perkuliahan.
7. Bapak dan Ibu dosen Jurusan Kimia FMIPA Universitas Andalas yang telah memberikan ilmu dan bimbingan dalam perkuliahan.
8. Ronnie Ichsanul Irsal yang selalu memberikan dukungan, mendengarkan keluh kesah, memberikan berbagai bantuan dan selalu setia menemani dalam keadaan apapun sampai saat ini.
9. Sahabat tercinta (Putri Arwanda, Senandung Melany, Riri Aulia Putri, Nurul Handayani dan Mhd. Chairawan) yang selalu mengerti, menyemangati dan membantu dalam menyelesaikan skripsi ini.
10. AHA ku tercinta (HarryHidayat dan Ayu Sabrina, S.Si) yang selalu memberikan dukungan, doa dan semangat dalam menyelesaikan skripsi.

11. Sombing-sombing (Fadhilatul Wahyu, S.Si, Fitri Geronimo dan Fingki Puspita Sari) yang sama-sama berjuang dalam menyelesaikan penelitian dan studi S1 ini.
12. Rommante Kos tercinta (Roselin Indah, S.T dan Vira Friska S.Si) yang selalu mendengarkan dan memberikan dukungan dalam menyelesaikan penelitian.
13. Sombing jauhku (Iqbal Desriman dan Reasta Sidiq) yang selalu mendengarkan dan memberikan dukungan dalam menyelesaikan penelitian.
14. Teman-teman OKS16EN (Kimia 16), kelas A dan B yang telah menemani masa perkuliahan ku dan membuatnya bermakna.

Penulis menyadari bahwa kesempurnaan sepenuhnya hanyalah milik-Nya. Oleh karena itu kritik dan saran yang bersifat membangun sangat diperlukan. Semoga skripsi ini dapat memberikan manfaat bagi semua pihak.



Padang, 19 September 2020

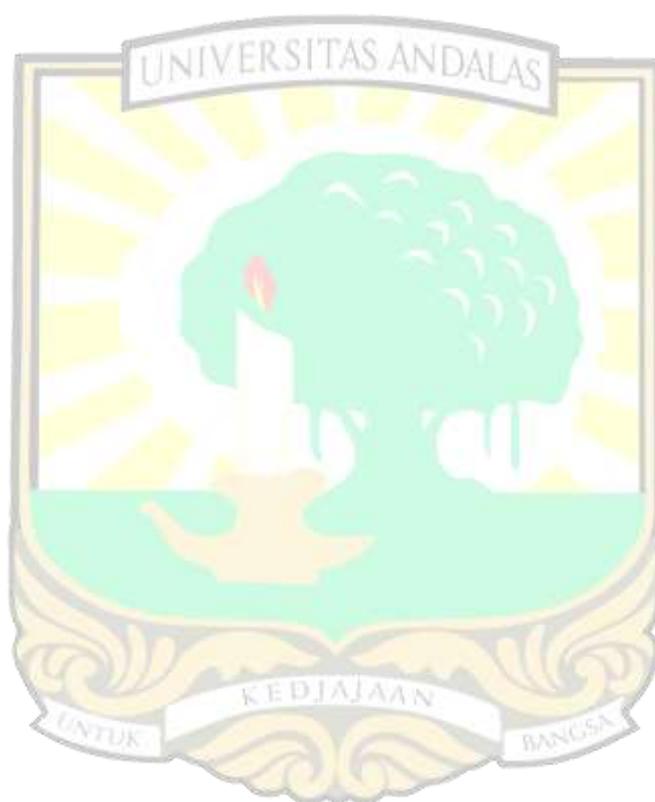
Penulis

DAFTAR ISI

HALAMAN PEGESAHAN.....	i
HALAMAN PERNYATAAN.....	ii
HALAMAN PERSEMBAHAN.....	iii
INTISARI.....	iv
ABSTRACT.....	v
UCAPAN TERIMAKASIH.....	vi
DAFTAR ISI.....	viii
DAFTAR GAMBAR.....	ix
DAFTAR TABEL.....	x
DAFTAR LAMPIRAN.....	xi
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG.....	xii
BAB I. PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	2
1.3 Tujuan Penelitian.....	3
1.4 Manfaat Penelitian.....	3
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA.....	4
2.1 Inhibitor Korosi.....	4
2.2 Kimia Komputasi.....	5
2.3 Senyawa α -D-Glukopiranosida,4-O- α -D-Galaktopiranosil dan turunannya.....	6
2.4 Pengaruh Substituen terhadap Inhibitor.....	7
2.5 Perhitungan Kimia Kuantum.....	7
BAB III. METODE PENELITIAN.....	11
3.1 Waktu dan Tempat Penelitian.....	11
3.2 Peralatan dan Molekul yang Dioptimasi.....	11
3.2.1 Peralatan.....	11
3.2.2 Molekul yang Dioptimasi.....	11
3.3 Prosedur Penelitian.....	11
3.3.1 Penggambaran Struktur Molekul.....	11
3.3.2 Optimasi Geometri Molekul.....	14
3.3.3 Membaca Luaran Data.....	16
BAB IV. HASIL DAN PEMBAHASAN.....	17
4.1 Parameter Kimia Kuantum Molekul G1 dan turunannya.....	17
4.2 Densitas Mulliken Senyawa G1, G2, G3 dan G4.....	20
4.3 Pengaruh penambahan substituen pada molekul inhibitor.....	21
4.4 Absorpsi Senyawa G4 pada Permukaan Logam.....	22
BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN.....	24
5.1 Kesimpulan.....	24
5.2 Saran.....	24
DAFTAR PUSTAKA.....	25

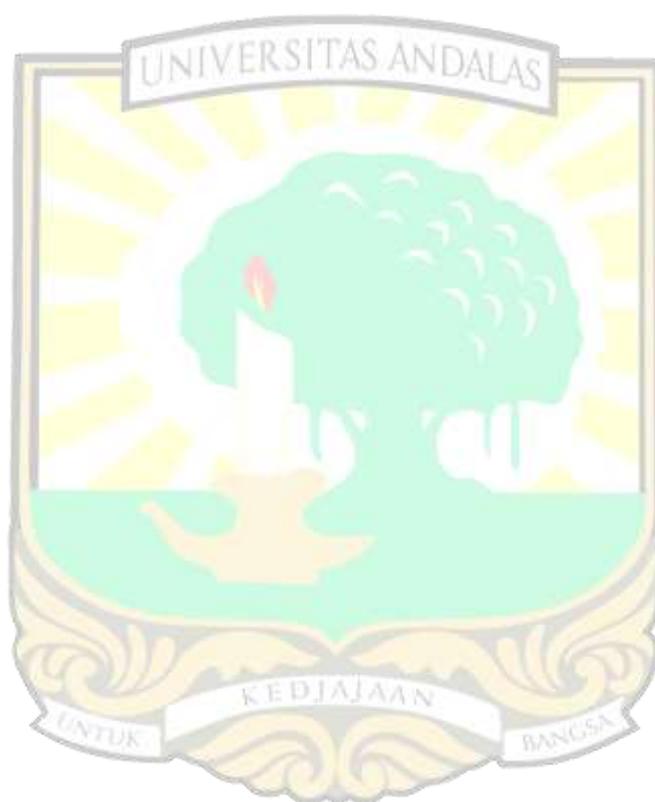
DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	Struktur Kerangka α -D-glukopiranos,4-o, α -D-galaktopiranosil (G1)	6
Gambar 2.2	Struktur Kerangka senyawa G2, G3 dan G4	7
Gambar 4.1	Distribusi kerapatan orbital molekul G1 dan turunannya	17
Gambar 4.2	Densitas muatan atom senyawa G1, G2, G3 dan G4	21
Gambar 4.3	Hasil Optimasi struktur molekul G1-Fe dan G4-Fe	23



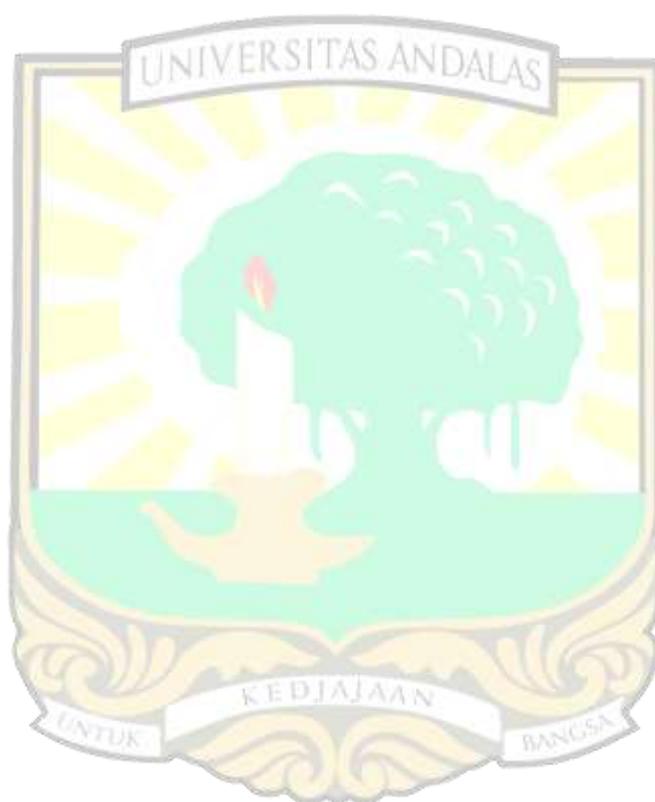
DAFTAR TABEL

Tabel 4.1	Nilai E_{HOMO} , E_{LUMO} dan energi total dari senyawa G1, G2, G3 dan G4	19
Tabel 4.2	Hasil perhitungan parameter kimia kuantum senyawa G1, G2, G3 dan G4	19
Tabel 4.3	Nilai energi interaksi dan energi <i>binding</i> dari molekul G1, G2, G3 dan G4	23



DAFTAR LAMPIRAN

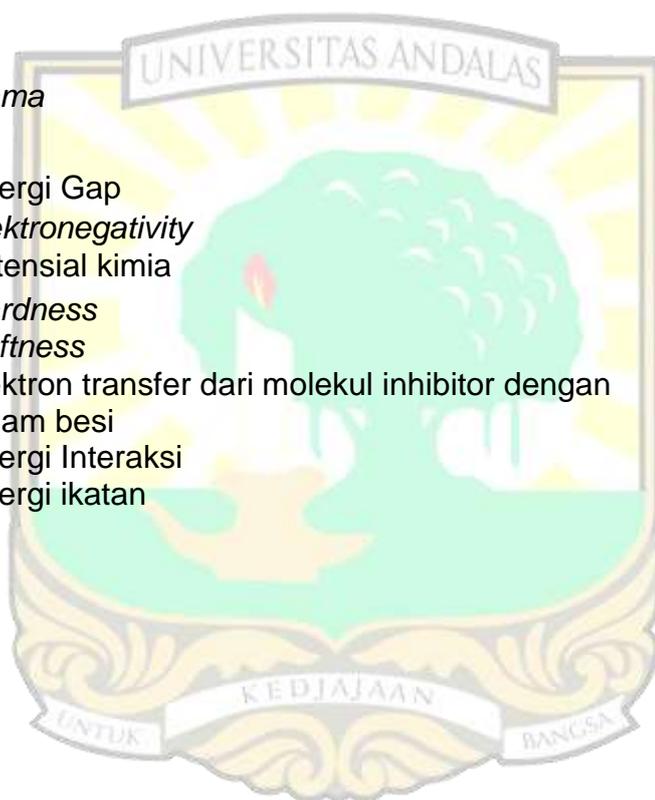
Lampiran 1.	Skema kerja	28
Lampiran 2.	Output Optimasi Molekul G1 dengan Metode DFT menggunakan software Gaussian	29
Lampiran 3.	Resume Output molekul G1	34
Lampiran 4.	Perhitungan	39
Lampiran 5.	Biodata Penulis	40



DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG

Singkatan	Nama	Pemakaian pertama kali pada halaman
DFT	<i>Density Functional Theory</i>	1
HOMO	<i>Highest Occupied Molecular Orbital</i>	2
LUMO	<i>Lowest Unoccupied Molecular Orbital</i>	2
G1	α -D-glucopyranose,4-o, α -D-galactopyranosyl	2
G2	Senyawa G1 yang tersubstitusi $-\text{NH}_2$	6
G3	Senyawa G1 yang tersubstitusi $-\text{Br}$	7
G4	Senyawa G1 yang tersubstitusi $-\text{SO}_3\text{H}$	7

Lambang	Nama	Pemakaian pertama kali pada halaman
ΔE	Energi Gap	2
χ	<i>elektronegativity</i>	2
μ	potensial kimia	7
η	<i>Hardness</i>	2
σ	<i>Softness</i>	2
ΔN	elektron transfer dari molekul inhibitor dengan logam besi	2
Eint	Energi Interaksi	2
Ebinding	Energi ikatan	2



BAB I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Korosi merupakan salah satu masalah serius dalam sektor industri karena menyebabkan kerugian di setiap tahunnya. Salah satu kerusakan karena korosi yaitu banyaknya korban jiwa dan kerugian harta benda yang sangat besar. Oleh karena itu banyak peneliti yang mengembangkan metode pencegahan korosi^{1,2}. Ada berbagai metode yang dapat dilakukan untuk melindungi baja dari korosi seperti *elektroplating*, perlindungan katodik atau anodik dan penambahan inhibitor korosi^{3,4}. Penambahan inhibitor korosi adalah salah satu metode yang efektif, efisien dan ekonomis untuk menghambat laju korosi^{3,5,6}.

Inhibitor korosi adalah senyawa yang ditambahkan dalam jumlah kecil yang dapat mengurangi tingkat korosi dalam media agresif secara efisien³. Inhibitor dibagi menjadi dua jenis, yaitu inhibitor organik dan inhibitor anorganik⁷. Sebagian besar inhibitor dapat efektif digunakan apabila mengandung heteroatom seperti O, N, S, ikatan π , pasangan elektron bebas dan ikatan rangkap dalam molekulnya yang akan teradsorpsi pada permukaan logam⁸.

Kemampuan suatu senyawa sebagai inhibitor korosi dapat diuji melalui eksperimen maupun komputasi. Penelitian secara eksperimen berguna dalam menjelaskan mekanisme inhibisi korosi, namun cara ini membutuhkan biaya yang mahal dan waktu yang lama untuk memperoleh hasil yang dibutuhkan. Oleh karena itu, dengan adanya kemajuan *hardware* dan *software* saat ini, membuka peluang untuk penggunaan kimia teori dalam penelitian inhibisi korosi. Perhitungan kimia komputasi dapat digunakan untuk memprediksi kemampuan suatu senyawa sebelum dilakukan penelitian di laboratorium⁸. Beberapa penelitian yang telah dilakukan seperti studi komputasi inhibisi korosi untuk senyawa turunan 1H-Imidazo [4,5-F] [1,10] phenanthroline⁸, studi komputasi inhibisi korosi dari senyawa (*e*)-3-(2-*p*-tolylidiazonyl)-1-nitrosonaphthalen-2-ol⁹, dan studi komputasi potensi inhibisi korosi senyawa 4-methyl-4H-1,2,4,-Triazole-3-Thiol dan 2-Mercaptonicotinic Acid¹⁰. Hal ini memperkuat fakta bahwa perhitungan kimia kuantum sangat penting dalam penentuan inhibisi korosi¹¹.

Density Functional Theory (DFT) adalah salah satu metode kimia komputasi yang populer digunakan dalam perhitungan parameter kimia kuantum. Metode ini sangat penting dalam perhitungan kimia kuantum karena dapat memberikan

parameter dasar yang akurat untuk suatu molekul¹². Metode ini dapat digunakan untuk mengilustrasikan pentingnya struktur dari suatu senyawa dan efisiensi adsorpsi inhibitor pada permukaan logam^{11,13}.

Senyawa α -D-glukopiranosida,4-O, α -D-galaktopiranosil (G1) merupakan salah satu senyawa yang dapat diisolasi dari daun ceremai (*Phyllanthus acidus* L. Skeels) dengan menggunakan pelarut metanol¹⁴. Senyawa ini memiliki pasangan elektron bebas dalam struktur molekulnya. Dari penelusuran literatur, senyawa G1 belum pernah diteliti sebagai inhibitor korosi secara eksperimen maupun komputasi, oleh karena itu untuk memprediksi kemampuan dari senyawa G1 dilakukanlah penelitian secara komputasi dengan menggunakan metode DFT basis set B3LYP/6-31G.

Parameter yang diperoleh dari hasil optimasi yaitu energi HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*), energi LUMO (*Lowest Uncoppied Molecular Orbital*) dan energi total (E_{tot}). 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)¹⁵. Kemudian energi total digunakan untuk menghitung nilai energi interaksi (E_{int}) dan energi ikatan ($\Delta E_{binding}$)¹⁶. Parameter diatas digunakan dalam penentuan kemampuan inhibisi korosi karena dari parameter tersebut dapat ditentukan kereaktifan suatu senyawa. Parameter lain yang dapat diperoleh dari hasil optimasi yaitu momen dipol, namun parameter ini sering menjadi perdebatan karena tidak dapat memberikan penjelasan yang baik tentang kemampuan suatu senyawa sebagai inhibisi korosi¹⁷.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang diatas, maka rumusan masalah pada penelitian ini adalah :

1. Apakah kemampuan inhibisi korosi senyawa G1 dan turunannya dapat ditentukan dengan metode DFT?
2. Apakah ada hubungan parameter kimia kuantum dengan inhibisi korosi senyawa G1 dan turunannya?
3. Apakah penambahan substituen berpengaruh terhadap kemampuan inhibisi korosi?

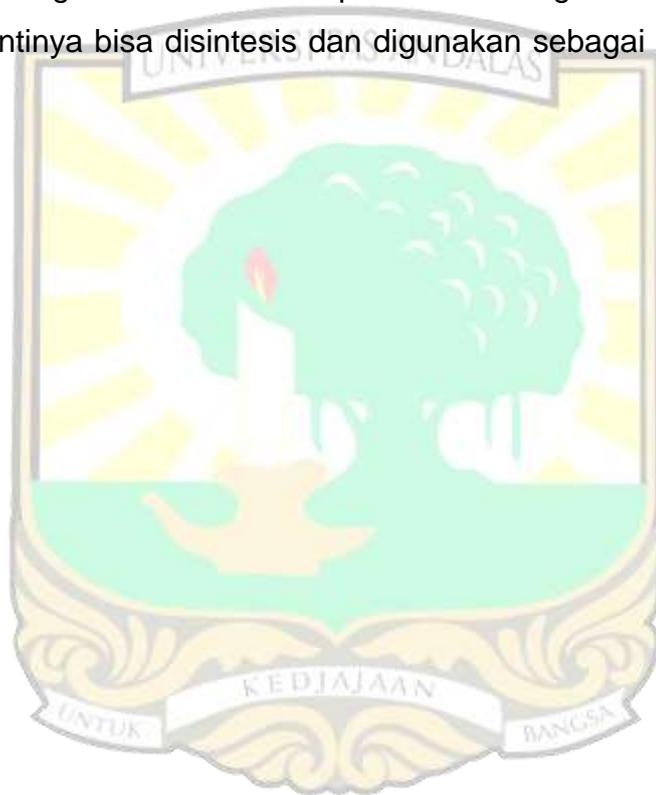
1.3 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini adalah:

1. Untuk menentukan kemampuan inhibisi senyawa G1 dan turunannya.
2. Untuk menentukan hubungan antara parameter kimia kuantum dengan kemampuan inhibisi korosi senyawa G1 dan turunannya.
3. Untuk menentukan pengaruh penambahan substituen pada kemampuan inhibisi

1.4 Manfaat Penelitian

Manfaat dari penelitian ini adalah memberikan informasi tentang struktur senyawa G1 yang efisien sebagai inhibitor korosi pada besi dengan menggunakan metode DFT. Sehingga nantinya bisa disintesis dan digunakan sebagai inhibitor korosi yang efisien.



BAB II. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Inhibitor Korosi

Inhibitor korosi adalah senyawa yang ditambahkan dalam jumlah kecil dapat mengurangi tingkat korosi dalam media agresif secara efisien³. Inhibitor dapat mengubah laju reaksi konsumsi logam dalam asam dan mempengaruhi kinetika reaksi elektrokimia yang mengatur proses korosi^{18,19,20}.

Penggunaan inhibitor korosi merupakan salah satu metode penghambat korosi yang paling efisien dan ekonomis, karena senyawa ini akan melindungi permukaan baja ringan dari medium korosif dengan membentuk lapisan pasif atau pelindung¹. Inhibitor korosi dibagi menjadi inhibitor anorganik dan organik. Penggunaan inhibitor anorganik biasanya kurang efektif dan memiliki dampak negatif bagi lingkungan, seperti beracun dan tidak ramah lingkungan, sehingga lebih disarankan untuk menggunakan inhibitor organik dari produk alami, tidak beracun dan *biodegradable*⁷. Struktur molekul penghambat korosi pada inhibitor organik memiliki peran penting dalam keberhasilan cara ini. Kehadiran ikatan rangkap, heteroatom seperti oksigen, nitrogen atau sulfur dapat langsung berkorelasi dengan kemampuan efisiensi inhibisi inhibitor dalam menghambat korosi¹⁸.

Proses korosi yang terjadi pada suatu logam pada medium korosif berawal dari logam yang teroksidasi di dalam larutan dan melepaskan elektron untuk membentuk ion logam yang bermuatan positif. Medium akan bertindak sebagai katoda dengan reaksi yang terjadi berupa pelepasan H₂ dan reduksi O₂ akibat ion H⁺ dan H₂O yang tereduksi. Reaksi oksidasi dan reduksi ini terjadi pada permukaan logam secara berulang-ulang yang mengakibatkan terjadinya pengelupasan pada permukaan logam. Mekanisme reaksi korosi pada besi (Fe) adalah⁷:



Besi(II) hidroksida (Fe(OH)_{2(s)}) merupakan hasil sementara yang secara alami akan teroksidasi oleh air dan udara membentuk besi(III) hidroksida. Reaksi yang terjadi selanjutnya adalah:



Besi(III) hidroksida (Fe(OH)_{3(s)}) yang terbentuk akan berubah menjadi Fe₂O₃ yang berwarna coklat kemerahan yang disebut karat. Reaksi yang terjadi adalah:



2.2 Kimia Komputasi

Kimia komputasi memainkan peranan yang sangat penting dalam perkembangan sains. Pada masa lalu, sains ditunjukkan oleh kaitan antara eksperimen dan teori. Dalam eksperimen, sistem diukur dan hasilnya dinyatakan dalam bentuk numerik. Penelitian kimia dengan alat komputer pada era 1950-an dimulai dengan kajian hubungan struktur kimia dengan aktifitas fisiologi dari senyawa²¹. Kimia komputasi dapat digunakan untuk memprediksi kemampuan suatu senyawa sebagai inhibitor korosi sebelum dilakukan percobaan di laboratorium^{8,22}. Salah satu ahli kimia yang berjasa besar dalam bidang ini adalah John Pople yang berhasil mengkonversi teori-teori fisika dan matematika ke dalam kimia dengan sarana program komputer. Metode kimia komputasi memungkinkan para kimiawan melakukan penentuan struktur dan sifat suatu sistem kimia dengan cepat dan lebih hemat biaya^{21,22}.

Metode kimia komputasi dapat dibedakan menjadi 2 bagian besar yaitu mekanika molekular dan mekanika kuantum. Dalam mekanika kuantum sistem digambarkan sebagai fungsi gelombang yang dapat diperoleh dengan menyelesaikan persamaan Schrodinger. Persamaan ini berkaitan dengan sistem dalam keadaan stationer dan energi dari sistem dinyatakan dalam operator Hamiltonian. Mekanika kuantum terdiri dari *ab initio*, semi empiris dan DFT. Metode yang berkembang pesat saat ini adalah metode DFT²¹.

1. *Ab initio*

Ab initio adalah istilah latin yang berarti "dari awal"²³. Nama ini diberikan untuk perhitungan yang diturunkan langsung dari prinsip-prinsip teoritis²². *Ab initio* merupakan salah satu pendekatan untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger. Metode ini dibuat tanpa menggunakan data empiris, kecuali untuk tetapan dasar seperti massa elektron dan tetapan planck²¹. Secara umum, perhitungan *ab initio* memberikan hasil yang sangat akurat seiring dengan semakin kecilnya molekul yang dianalisa, namun kelemahan dari metode ini yaitu membutuhkan biaya yang mahal, waktu yang lama serta memori dan kapasitas komputer yang besar²².

2. Semiempiris

Metode semiempiris dapat diterapkan dalam sistem yang besar dan menghasilkan fungsi gelombang elektronik yang baik sehingga sifat elektronik dapat diprediksi²¹. Metode semiempiris hanya memperhitungkan elektron valensi dalam proses perhitungannya sehingga membutuhkan waktu yang lebih cepat dibandingkan *ab initio*^{22,24}, namun kelemahan dari metode ini yaitu memiliki realibilitas hasil yang agak rendah dibandingkan metode lainnya²¹.

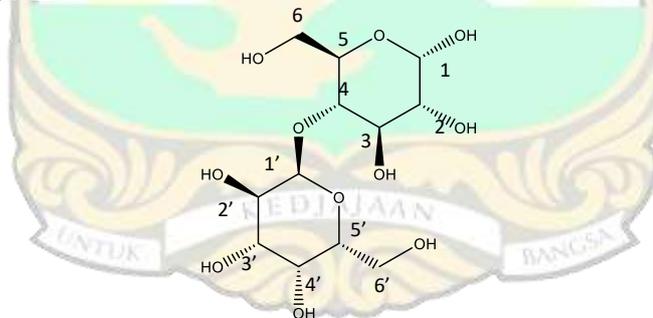
3. *Density Functional Theory* (DFT)

Metode DFT merupakan salah satu metode dalam kimia komputasi yang populer digunakan dalam perhitungan kimia kuantum²⁵. Metode ini sangat penting dalam perhitungan kimia kuantum karena dapat memberikan parameter dasar yang akurat untuk suatu molekul. Metode DFT muncul dengan semakin berkembangnya teknologi komputer¹². Metode ini merupakan metode yang efektif digunakan untuk memahami reaktivitas kimia dan selektivitas molekul dalam menggambarkan sifat struktural inhibitor pada proses korosi²⁶. Metode ini didasarkan pada energi dari suatu molekul dapat ditentukan dari kerapatan molekul tersebut²².

Beberapa senyawa telah diteliti menggunakan metode DFT untuk mengetahui kemampuannya sebagai inhibisi korosi seperti turunan senyawa *benzimidazole*¹³, senyawa *8-HydroxyGuinoline*²⁷, turunan *pyrazine*²⁸, *carbohydrates*²⁹, *Guercetin* dan *Coumarin*³⁰, senyawa turunan *1H-Imidazo [4,5-F] [1,10] phenanthroline*⁸, dan senyawa turunan *tiophene*¹⁵.

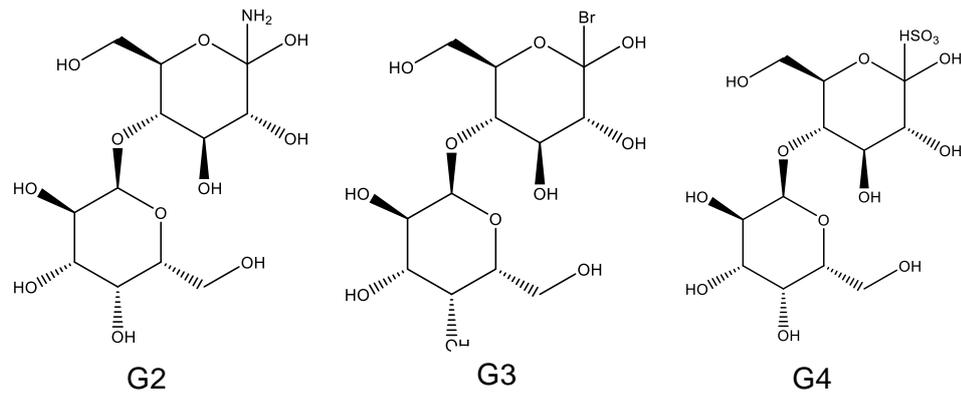
2.3 Senyawa α -D-glukopiranososa,4-o, α -D-galaktopiranosil

Senyawa α -D-glukopiranososa,4-o, α -D-galaktopiranosil (G1) merupakan salah satu senyawa yang dapat diisolasi dari daun ceremai (*Phyllanthus acidus* L. Skeels)¹⁴. Senyawa ini merupakan salah satu jenis karbohidrat. Struktur dari senyawa ini dapat dilihat pada Gambar 2.1:



Gambar 2.1 Struktur Kerangka α -D-glukopiranososa,4-o, α -D-galaktopiranosil (G1)

Turunan senyawa G1 merupakan senyawa G1 yang tersubstitusi gugus penarik atau pendorong elektron. Senyawa ini disimbolkan dengan G2 (tersubstitusi gugus NH_2), G3 (tersubstitusi gugus Br) dan G4 (tersubstitusi gugus SO_3H). struktur dari senyawa ini dapat dilihat pada Gambar 2.2



Gambar 2.2 Struktur Kerangka senyawa G2, G3 dan G4

2.4 Pengaruh Substituen terhadap Inhibitor

Luas permukaan molekul inhibitor dipengaruhi oleh substituen yang menempati suatu molekul inhibitor. Luas permukaan molekul akan lebih besar dengan penambahan substituen dibandingkan tanpa penambahan substituen, sehingga molekul dengan penambahan substituen memiliki kemampuan inhibisi yang lebih besar⁸. Hal ini terjadi karena semakin luas permukaan molekul inhibitor, maka semakin besar molekul yang akan menutupi permukaan logam²⁷.

Molekul yang memiliki cincin aromatik dalam struktur penyusunnya, akan mengalami kenaikan kemampuan inhibisi korosi apabila ditambahkan gugus pendorong elektron seperti, $-OH$, $-NH_2$, $-CH_3$, dan $-OCH_3$ ²⁷. Sedangkan gugus penarik elektron seperti $-NO_2$, $-Br$, $-SO_3H$, $-CN$, dan $-COOH$ akan menyebabkan penurunan kemampuan inhibisi korosi¹³. Hal ini terjadi karena substituen yang merupakan gugus penarik elektron akan menarik elektron keluar dari cincin aromatik, sehingga mengurangi kontribusi cincin aromatik untuk donor elektron ke atom logam³¹.

2.5 Perhitungan Kimia Kuantum

Menurut teorema Koopmans yang diusulkan pada tahun 1930 yang dapat mempertimbangkan hubungan antara Teori Orbital Molekul dan konseptual *Density Functional Theory* dan memberikan metode alternatif untuk memprediksi nilai energi ionisasi (I) dan afinitas elektron (A)²⁶. Dari teori ini, energi ionisasi dan afinitas elektron dari suatu molekul merupakan nilai negatif dari energi orbital HOMO dan LUMO seperti persamaan (4) dan (5) berikut^{26,32}:

$$I = -E_{\text{HOMO}} \quad (4)$$

$$A = -E_{\text{LUMO}} \quad (5)$$

Nilai E_{HOMO} berkaitan dengan kemampuan molekul untuk mendonasikan elektron, dan nilai E_{LUMO} berhubungan dengan kemampuan molekul untuk menerima elektron²², sedangkan energi gap (ΔE) adalah parameter yang sangat berguna dalam kuantum yang dapat dihitung melalui persamaan (6)³³:

$$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}} \quad (6)$$

Inhibitor korosi dengan nilai ΔE yang rendah mempunyai nilai inhibisi korosi yang lebih baik³⁰. Hal ini karena energi yang dibutuhkan untuk elektron pada kulit terluar tereksitasi akan rendah. Molekul dengan ΔE yang rendah mudah untuk dipolarisasi, ini biasanya berkaitan dengan reaktivitas kimia yang tinggi dan kestabilan kinetik yang rendah, yang dikenal juga dengan *soft molecule*^{15,30}.

Energi total molekul merupakan jumlah dari energi kinetik dan energi potensial suatu molekul. Energi ini digunakan untuk menentukan reaktivitas dan stabilitas sebuah molekul. Energi total yang tinggi menunjukkan semakin stabilnya molekul tersebut, sehingga kemampuannya untuk mendonasikan elektron ke permukaan logam semakin kecil¹¹.

Hardness dan *softness* adalah parameter kimia yang penting dalam mengukur kestabilan dan reaktivitas molekul. Kekerasan kimia secara mendasar menandakan resistansi terhadap deformasi atau polarisasi awan elektron dari atom, ion atau molekul dari gangguan kecil reaksi kimia. *Hard molecule* memiliki nilai ΔE yang besar dan *soft molecule* memiliki nilai ΔE yang rendah. Oleh karena itu molekul dengan nilai *global hardness* yang kecil diharapkan dapat menjadi inhibitor korosi yang baik dalam media asam^{11,26,30}. *Hardness* dapat dihitung dengan persamaan (7)¹:

$$\eta = \frac{I-A}{2} = -\frac{1}{2} (E_{\text{HOMO}} - E_{\text{LUMO}}) \quad (7)$$

Parameter *softness* merupakan kebalikan dari *hardness* dengan persamaan³⁴:

$$\sigma = \frac{1}{\eta} = -\left(\frac{2}{E_{\text{HOMO}} - E_{\text{LUMO}}}\right) \quad (8)$$

Elektronegativitas (χ) mengungkapkan kecenderungan atom dalam molekul untuk menarik elektron ke arah itu. Jadi elektron akan ditransfer sebagian dari molekul yang memiliki elektronegativitas rendah ke molekul yang memiliki elektronegativitas tinggi (elektron mengalir dari potensial kimia tinggi ke potensial kimia rendah), hal ini karena nilai potensial kimia (μ) merupakan negatif dari elektronegativitas. Elektronegativitas diperoleh dengan menggunakan persamaan^{16,20,29}:

$$\chi = \frac{I+A}{2} = -\frac{1}{2} (E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}}) \quad (9)$$

Transfer elektron (ΔN) adalah perpindahan elektron dari molekul dengan elektronegativitas rendah (inhibitor organik) ke elektronegativitas yang lebih tinggi (permukaan logam) hingga potensialnya menjadi sama. Dengan demikian transfer elektron (ΔN) dari molekul inhibitor ke permukaan logam dihitung menggunakan nilai elektronegativitas^{16,30,34} dengan persamaan:

$$\Delta N = \frac{\chi_{\text{Fe}} - \chi_{\text{inh}}}{2(\eta_{\text{Fe}} + \eta_{\text{inh}})} \quad (10)$$

Keterangan:

ΔN : jumlah elektron yang ditransfer

χ_{Fe} : elektronegativitas Fe

η_{Fe} : *global hardness* Fe

χ_{inh} : elektronegativitas inhibitor

η_{inh} : *global hardness* inhibitor

Menurut teori *Hard Soft Acid Base*, besi bertindak sebagai asam Lewis. Pearson menunjukkan bahwa perbedaan elektronegativitas antara dua sistem (permukaan logam dan molekul inhibitor) menggerakkan terjadinya transfer elektron. Menurut Pearson, untuk menghitung fraksi elektron yang ditransfer digunakan nilai elektronegativitas besi $\chi_{\text{Fe}} = 7,0$ eV dan nilai *hardness* besi $\eta_{\text{Fe}} = 0$ eV dengan $I = A$ ^{26,28}.

Densitas Mulliken adalah suatu analisis yang digunakan untuk mengetahui distribusi muatan di seluruh kerangka molekul inhibitor dan memperkirakan tempat terjadinya adsorpsi inhibitor. Semakin elektronegatif suatu atom, maka akan semakin besar kemampuan atom tersebut untuk teradsorpsi pada permukaan logam⁸.

Interaksi antara molekul inhibitor dengan permukaan logam dapat diprediksi dengan menghitung nilai energi interaksi (E_{int}) menggunakan persamaan³⁵:

$$E_{\text{int}} = E_{\text{kompleks}} - (E_{\text{Fe}} - E_{\text{inh}}) \quad (11)$$

Keterangan:

E_{int} : energi interaksi antara inhibitor dengan Fe

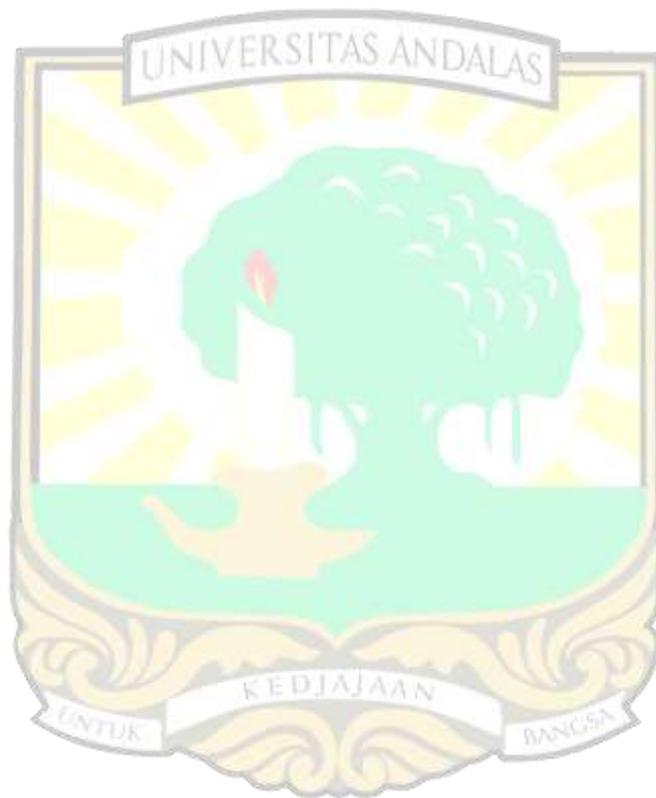
E_{kompleks} : energi total inhibitor yang berikatan dengan Fe

E_{Fe} : energi total Fe

E_{inh} : Energi total inhibitor

Energi interaksi yang bernilai negatif menunjukkan adsorpsi terjadi secara spontan. Semakin rendah nilai E_{int} maka akan semakin stabil kompleks yang terbentuk^{35,36}. Selain itu, energi ikatan (E_{binding}) adalah negatif dari nilai energi interaksi yang dihitung melalui persamaan²:

$$E_{\text{binding}} = - E_{\text{interaksi}}$$



BAB 3. METODE PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian dilaksanakan dari bulan Maret 2020 hingga Juli 2020 di Laboratorium Komputasi Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Andalas.

3.2 Peralatan dan Molekul yang Dioptimasi

3.2.1 Peralatan

Pada penelitian ini digunakan peralatan komputer dengan processor intel® Core™ Intel Core i5-7200U, 2,50 GHz, memory 8 GB. Adapun perangkat lunak (*software*) yang digunakan *Windows*™ 2010 dan *Gaussian*™ 016 untuk mengoptimasi senyawa G1 beserta turunannya.

3.2.2 Molekul yang Dioptimasi

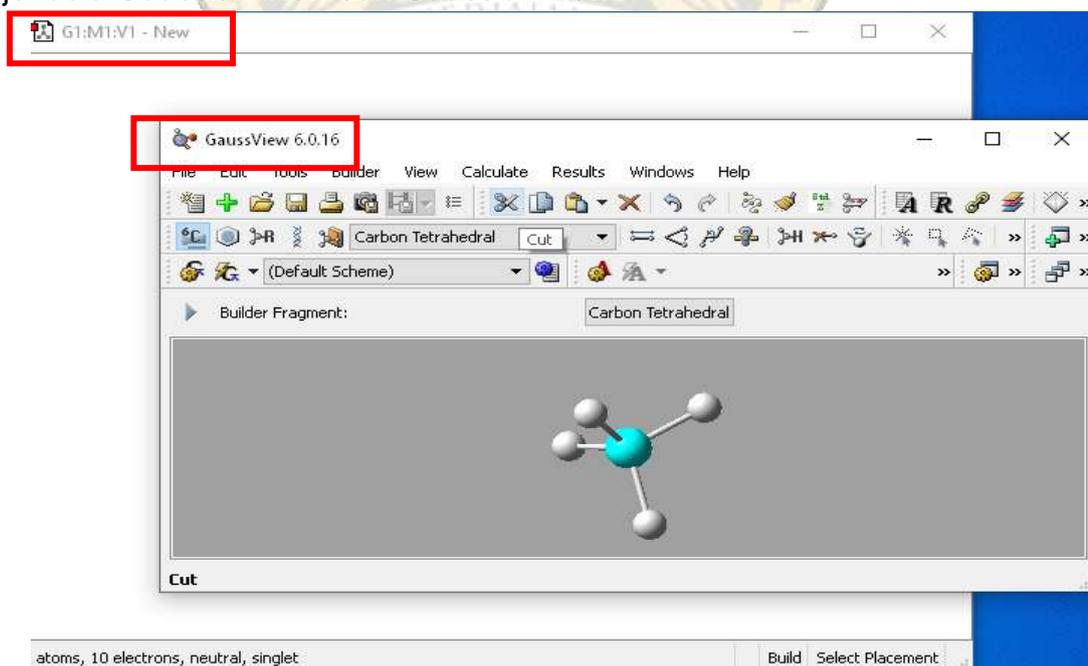
Struktur molekul yang dianalisa dalam penelitian ini adalah senyawa G1 beserta turunannya. Struktur senyawa ini dapat dilihat pada Gambar 2.1 dan Gambar 2.2

3.3 Prosedur Penelitian

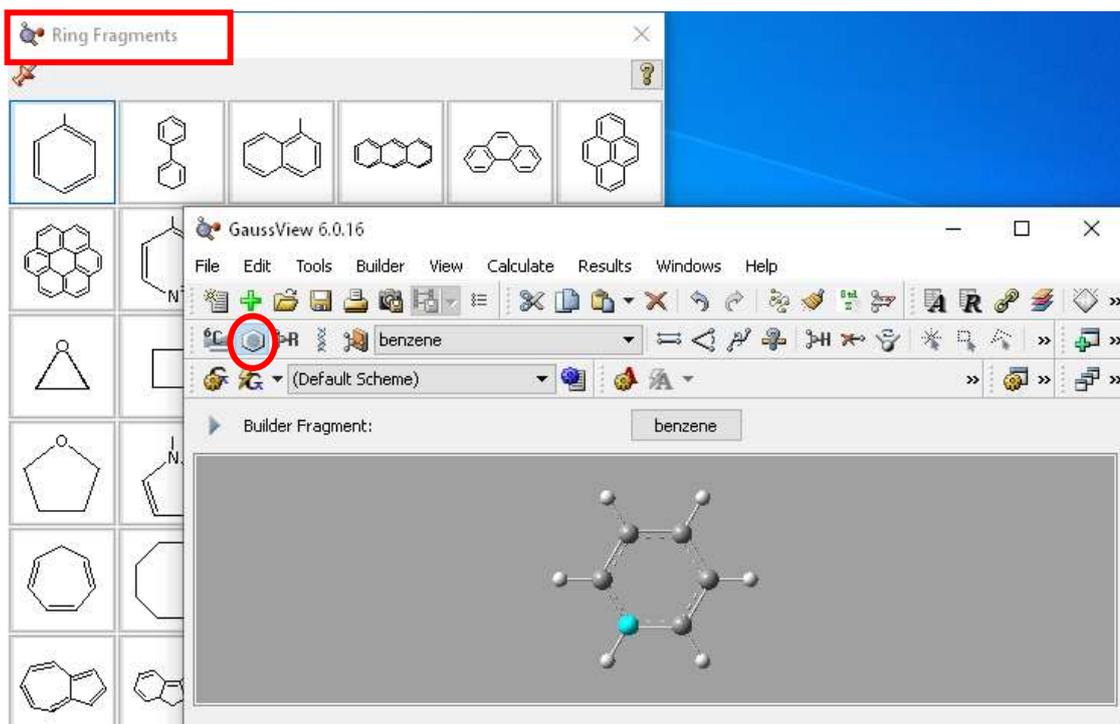
3.3.1 Penggambaran Struktur Molekul

Struktur molekul G1 dan turunannya digambar dengan menggunakan program *Gaussian for Windows* versi 0.16.

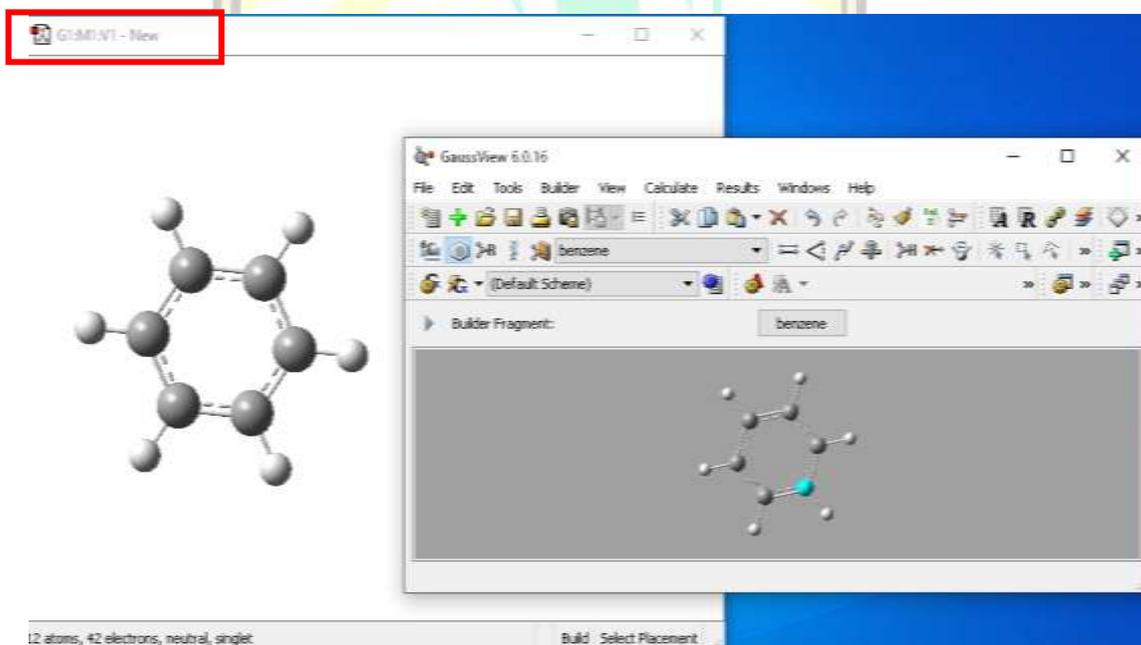
1. Jendela *Gaussian View* dibuka, kemudian akan muncul 2 jendela aktif yaitu jendela *Gaussian View* dan *Gaussian New*



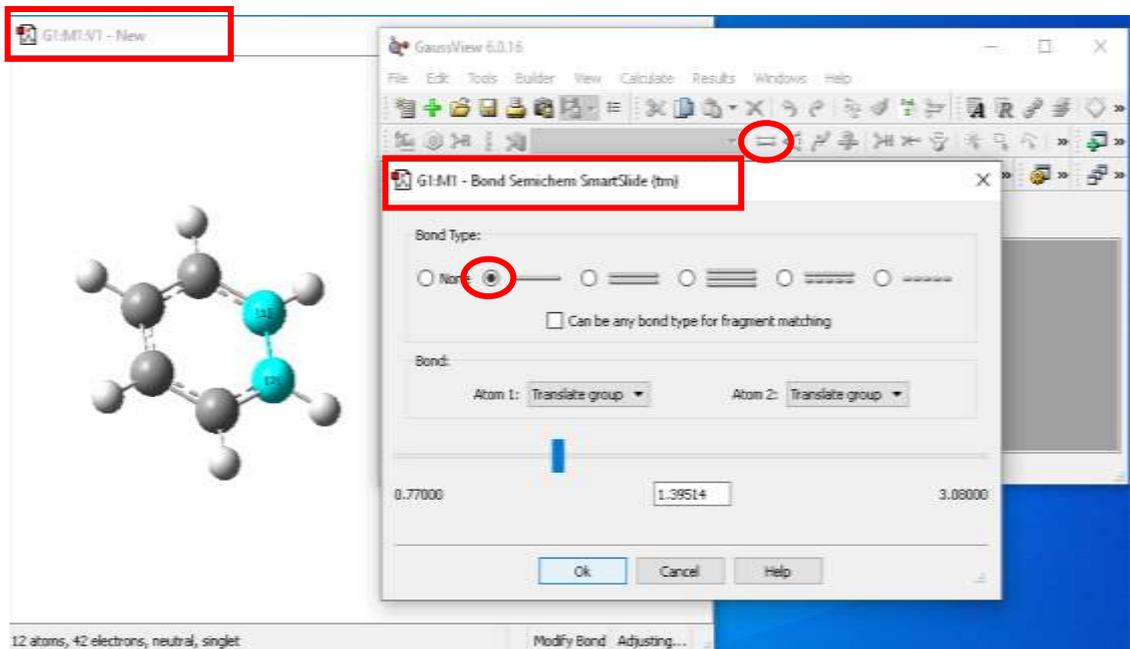
2. Menu *ring fragment* diklik, sehingga muncul kotak dialog *ring fragment*, lalu senyawa benzena dipilih



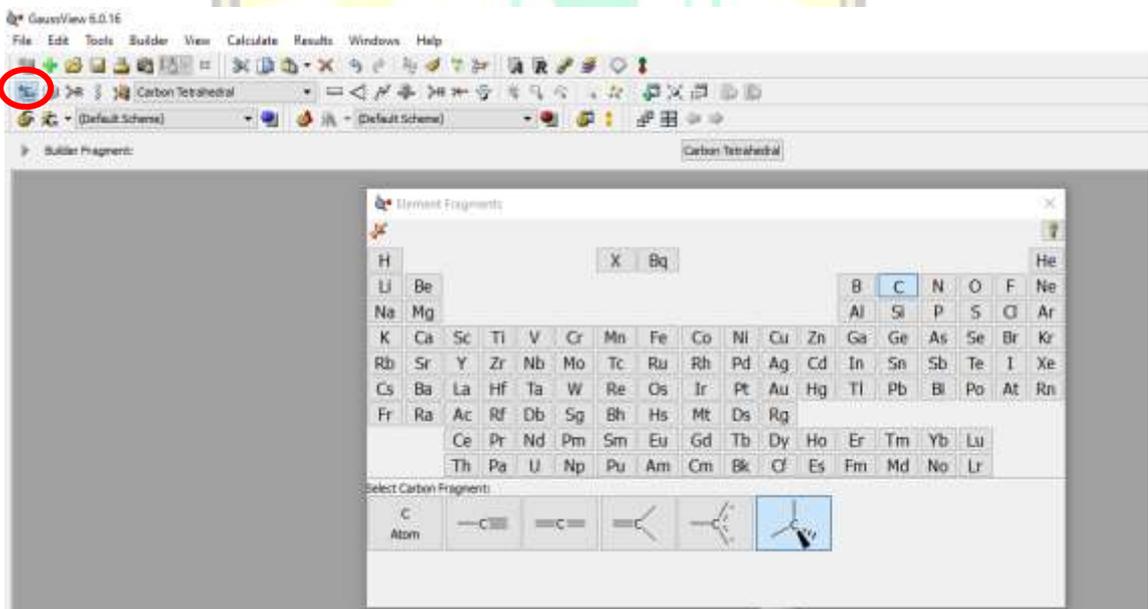
3. Senyawa benzena dipindahkan ke jendela aktif *gaussian new* dengan cara mengklik pada jendela *gaussian new*.



4. Untuk menghilangkan ikatan rangkap pada benzena, digunakan menu *modify bond*, diambil kembali jendela *gaussian new* dan klik dua unsur yang terikat ikatan rangkap dua, lalu akan muncul jendela *Bond Semichem SmartSlide*, menu *bond type* dipilih menjadi ikatan tunggal.



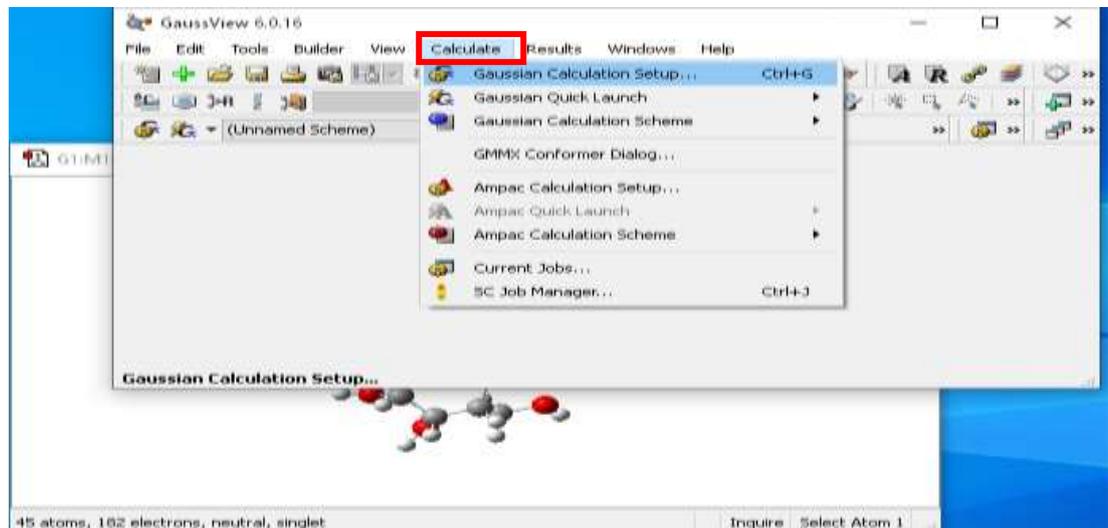
5. Untuk penambahan substituen, menu *elemen fragment* dipilih, unsur yang akan ditambahkan dipilih dan diklik pada atom yang akan diganti



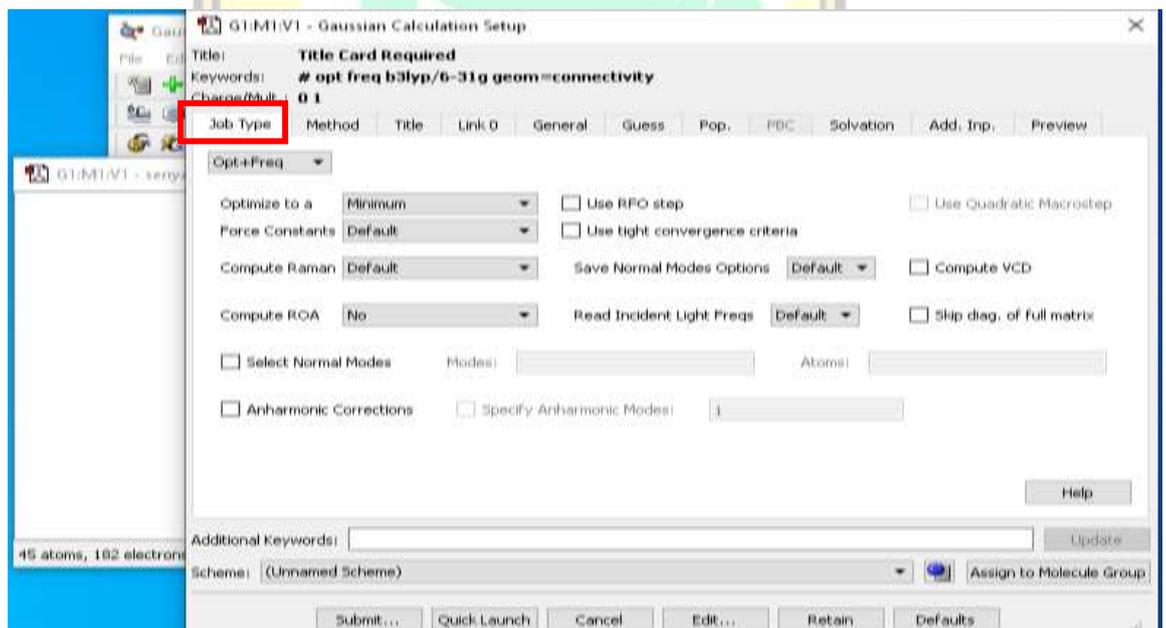
3.3.2 Optimasi Geometri Molekul

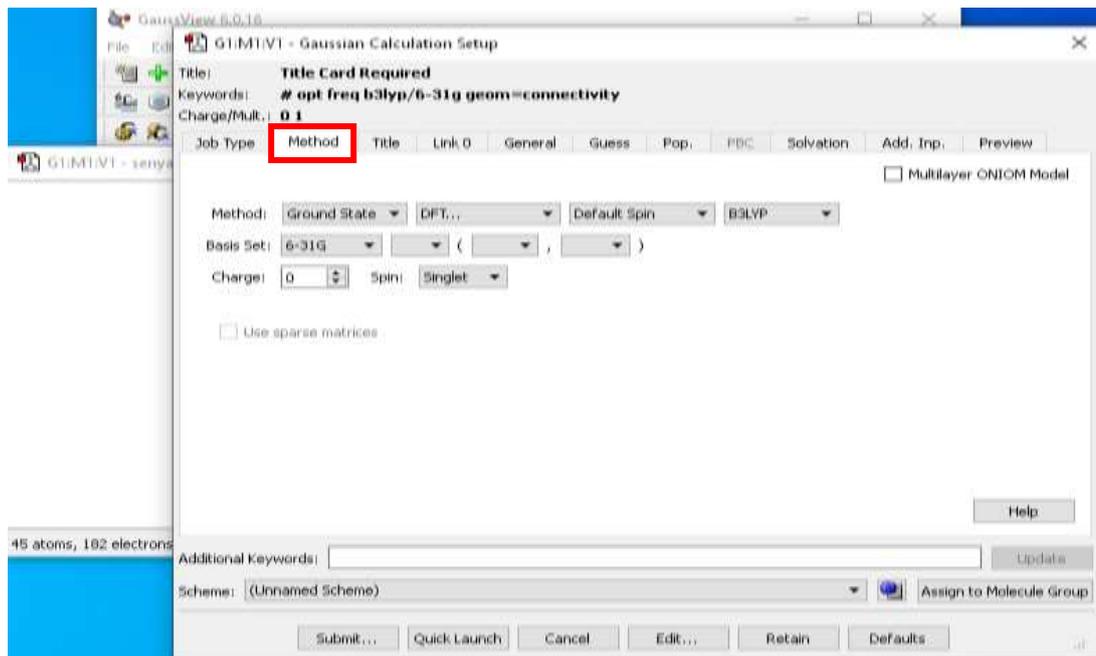
Langkah yang dilakukan untuk menjalankan perhitungan program yaitu:

1. Menu *calculate* dipilih, lalu pilih *Gaussian Calculation Setup*

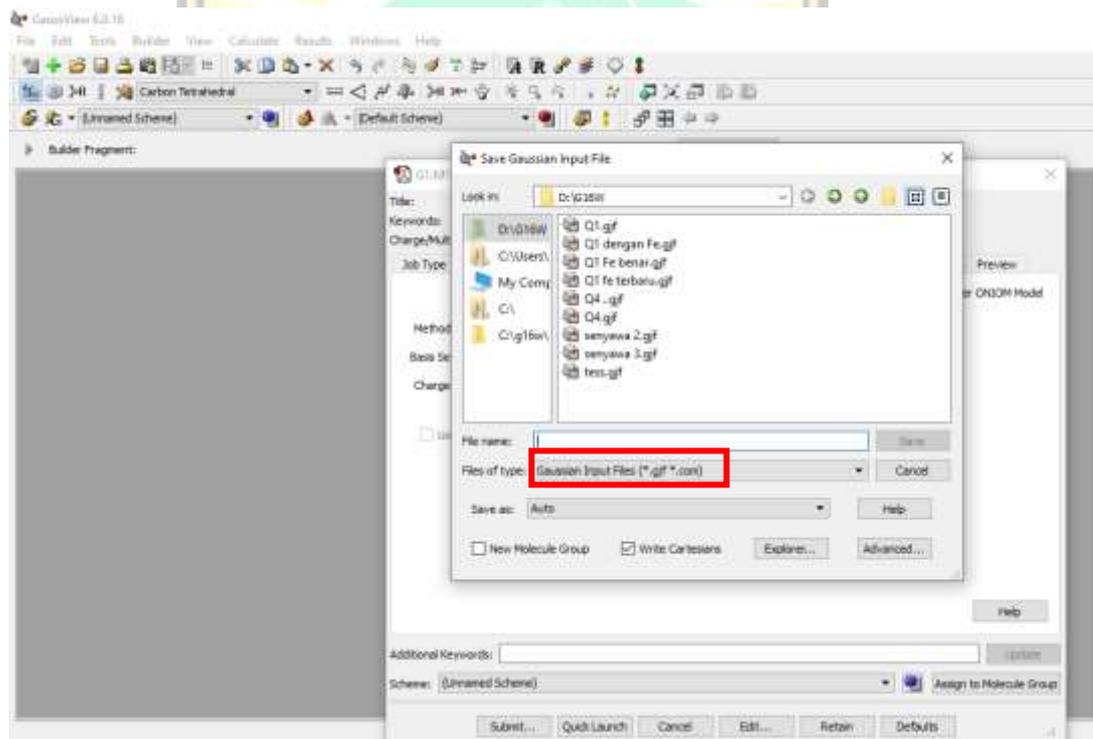


2. Pada *job type* diklik *opt+freq*, kemudian pada menu *method* dipilih *groundstate*, *DFT*, *default spin* B3LYP dan basis set 6-31G

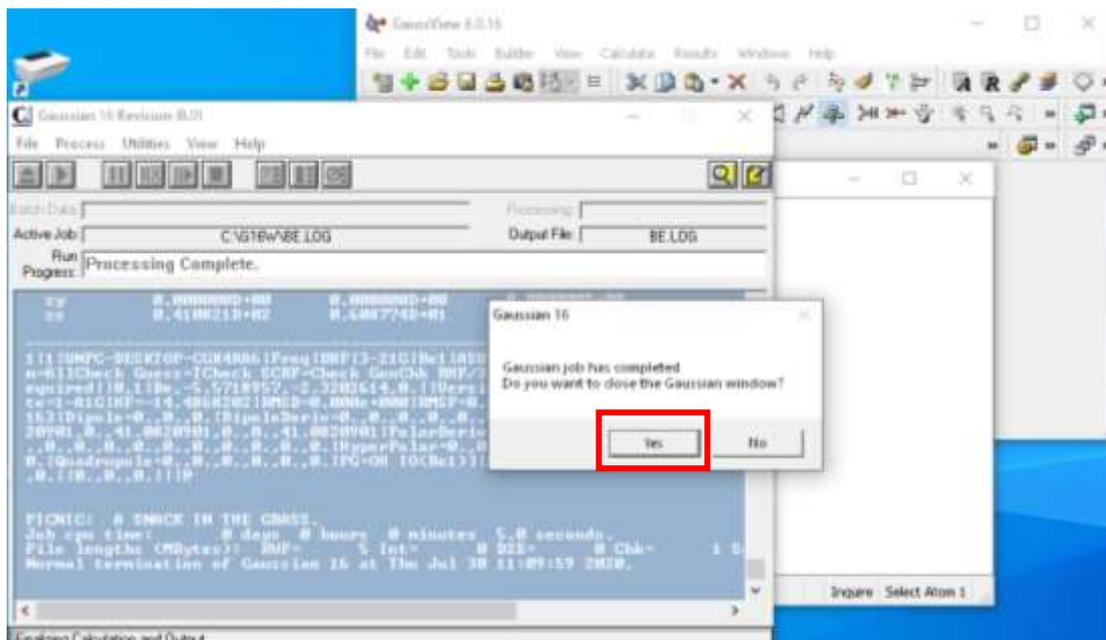




3. Diklik *submit*, kemudian file disimpan dalam bentuk file *.gff*



- Setelah perhitungan selesai akan muncul jendela *gaussian job has complete*, kemudian diklik YES



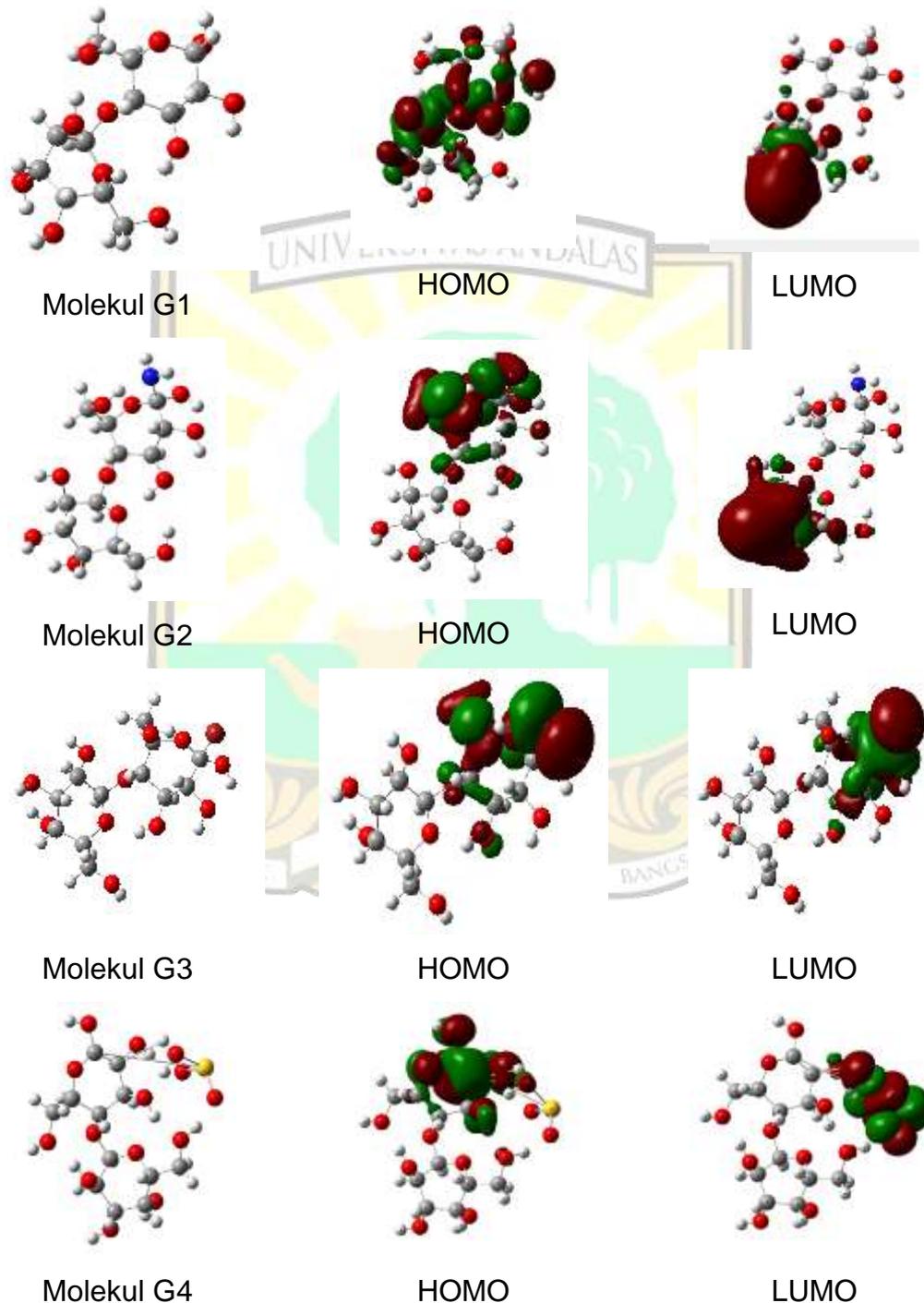
3.3.3 Membaca Luaran Data

Senyawa G1 dan turunan yang telah dioptimasi disimpan dalam bentuk 3 file yaitu *gfi* untuk menyimpan penggambaran awal senyawa, *chk* penggambaran setelah dioptimasi dan *notepad* untuk menyimpan data setelah dilakukan optimasi geometri molekul. Hasil optimasi yang didapatkan berupa struktur geometri optimal, E_{HOMO} , E_{LUMO} , dan energi total. Nilai E_{HOMO} dan E_{LUMO} digunakan untuk menentukan nilai energi gap (ΔE), potensial ionisasi (I), afinitas elektron (A), *hardness* (η), *softness* (σ), elektronegativitas (χ) dan transfer elektron (ΔN). Setelah perhitungan, didapatkan senyawa yang memiliki kemampuan inhibisi terbaik. Senyawa tersebut dioptimasi dengan penambahan atom Fe pada posisi yang paling elektronegatif, dan ditentukan nilai energi interaksi dan energi ikatan dari senyawa tersebut.

BAB IV. HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1 Parameter Kimia Kuantum Molekul G1 dan turunannya

Senyawa G1 dan turunannya dioptimasi dengan menggunakan program Gaussian 16W metode DFT dan basis set B3LYP/6-31G, sehingga diperoleh hasil optimasi seperti gambar 4.1 di bawah:



Gambar 4.1 Distribusi kerapatan orbital molekul G1 dan turunannya (atom: merah=O; putih=H ; abu-abu=C; biru= N; merah tua= Br; kuning = S)

Gambar 4.1 memperlihatkan distribusi kerapatan orbital molekuler HOMO dan LUMO dari senyawa G1 dan turunannya. Distribusi kerapatan elektron HOMO dan LUMO dapat memprediksi pusat adsorpsi dan pusat interaksi molekuler inhibitor. *Contour* HOMO merupakan daerah donor elektron dan *contour* LUMO sebagai akseptor elektron³⁰. Distribusi kerapatan orbital HOMO pada senyawa G1 terlokalisasi pada atom C2, C3, C4, C2', C3' dan C4' (gambar 2.1). Molekul G2, G3 dan G4 memiliki distribusi elektron yang hampir sama yaitu pada glukosa yang mengikat substituen -NH₂, -Br, dan -SO₃H. Hal ini menunjukkan jika daerah tersebut berperan sebagai donor elektron.

Distribusi kerapatan elektron orbital LUMO untuk senyawa G1 hampir sama dengan senyawa G2, yang mana terlokalisasi atom C1', C2', C3', C4' dan C5' (Gambar 2.1). Hal ini dikarenakan -NH₂ merupakan gugus pendorong elektron yang akan mendorong elektron ke arah yang berlawanan dengan posisinya. Sedangkan untuk senyawa G3 dan G4, elektron terlokalisasi ke arah substituen yang ditambahkan (-Br dan -SO₃H) yang merupakan gugus penarik elektron.

Dengan menggunakan perhitungan kimia kuantum, diperoleh nilai E_{HOMO} , E_{LUMO} , dan energi total dari senyawa G1 dan turunannya. Dari Tabel 4.1 terlihat bahwa senyawa G4 memiliki nilai E_{HOMO} yang paling besar yaitu -5,5634 eV. Hal ini menunjukkan kemampuan G4 yang lebih baik untuk mendonasikan elektron ke permukaan logam^{2,22}. Selain itu, nilai E_{LUMO} terendah juga terdapat pada molekul G4 dengan nilai -3,4223 eV. Nilai ini menunjukkan bahwa G4 merupakan akseptor yang baik untuk menerima pasangan elektron dari logam. Semakin besar nilai E_{HOMO} atau semakin kecil nilai E_{LUMO} maka semakin kuat suatu molekul organik untuk melekat pada kation logam sehingga molekul organik tersebut akan memiliki efisiensi inhibisi korosi yang tinggi³⁷.

Tabel 4.1 juga memperlihatkan nilai energi total senyawa G1, G2, G3 dan G4. Senyawa G3 memiliki nilai energi total terkecil yaitu -1015,4974 kJ/mol. Hal ini menandakan bahwa senyawa G3 merupakan senyawa yang lebih reaktif dibandingkan senyawa G1, G2 dan G4. Senyawa ini akan cenderung mendonasikan elektronnya ke permukaan logam. Suatu senyawa yang memiliki nilai energi total yang tinggi menunjukkan semakin stabilnya senyawa tersebut, sehingga kemampuannya untuk mendonasikan elektron ke permukaan logam semakin kecil^{11,38}. Dari Tabel 4.1 terlihat bahwa energi total $Q3 < Q4 < Q2 < Q1$.

Tabel 4,1 Nilai E_{HOMO} , E_{LUMO} dan energi total dari senyawa G1, G2, G3, dan G4

Parameter	Senyawa			
	G1	G2	G3	G4
E_{HOMO} (eV)	-6,4322	-5,7144	-6,6569	-5,5634
E_{LUMO} (eV)	0,7118	0,5581	-0,6800	-3,4229
Energi total (10^4) (kJ/mol)	-340,4885	-355,0165	-1015,4974	-504,1559

Nilai E_{HOMO} dan E_{LUMO} dari senyawa G1, G2, G3 dan G4 dapat digunakan untuk menghitung berbagai parameter kimia kuantum seperti energi gap (ΔE), potensial ionisasi (I), afinitas elektron (A), *hardness* (η), *softness* (σ), elektronegativitas (χ) dan transfer elektron (ΔN). Nilai ΔE pada Tabel 4.2 memperlihatkan bahwa senyawa G4 memiliki energi gap yang lebih rendah dibandingkan senyawa-senyawa lainnya yaitu sebesar 2,14044 eV. Nilai energi gap yang rendah menunjukkan tingginya reaktifitas suatu senyawa dan rendahnya stabilitas senyawa tersebut^{28,39,40}. Hal ini terjadi karena dengan rendahnya energi gap maka energi yang dibutuhkan untuk elektron tereksitasi dari pita HOMO ke LUMO juga akan semakin rendah, sehingga menyebabkan molekul menjadi reaktif^{8,28,39}.

Tabel 4.2 Hasil perhitungan parameter kimia kuantum senyawa G1,G2,G3 dan G4

Parameter	G1	G2	G3	G4
Energi Gap / ΔE (eV)	7,1440	6,2725	5,9770	2,1404
Potensial ionisasi (I) (eV)	6,4322	5,7144	6,6569	5,5634
Afinitas elektron (A) (eV)	-0,7118	-0,5581	0,6800	3,4229
Global Hardness (η) (eV)	3,5720	3,1362	2,9884	1,0702
Global softness (σ) (eV^{-1})	0,2799	0,3188	0,3346	0,9344
Elektronegativitas (X) (eV)	2,8602	2,5781	3,6685	4.4931
Transfer elektron (ΔN)	0,5795	0,7049	0,5574	1,1712

Nilai potensial ionisasi senyawa G4 (5,5634 eV) lebih rendah dibandingkan senyawa G1, G2 dan G3, serta nilai afinitas elektron G4 (3,4229) lebih besar dibandingkan senyawa G1, G2, dan G3. Hal ini menunjukkan bahwa senyawa G4 lebih reaktif dari senyawa G1, G2 dan G3. Semakin kecil nilai potensial ionisasi semakin mudah sudah senyawa untuk melepaskan elektron dan bereaksi dengan logam. Semakin besar nilai afinitas elektron semakin sulit suatu senyawa untuk menerima elektron dari logam^{12,41,42}. Parameter kimia kuantum lain yang dapat

digunakan untuk penentuan kereaktifan dan kestabilan suatu molekul adalah *hardness* dan *softness*. Tabel 4.2 menunjukkan bahwa senyawa G4 memiliki nilai *hardness* yang lebih kecil (1,0702) dan nilai *softness* yang lebih besar (0,9344) dibandingkan senyawa G1, G2 dan G3. Hal ini menandakan bahwa senyawa G4 lebih reaktif dan lebih tidak stabil dibandingkan senyawa lainnya, sehingga dapat diprediksi bahwa senyawa G4 merupakan senyawa yang memiliki kemampuan inhibisi yang baik dibandingkan senyawa G1, G2 dan G3. Semakin rendah nilai *hardness* dan semakin tinggi nilai *softness* maka akan semakin mudah suatu senyawa untuk bereaksi dengan permukaan logam².

Senyawa G4 memiliki nilai elektronegativitas yang lebih tinggi dibandingkan senyawa G1, G2, dan G3 yaitu sebesar 4.4931 eV. Nilai elektronegativitas yang tinggi menandakan bahwa senyawa G4 memiliki kemampuan menarik elektron lebih tinggi dibandingkan senyawa G1, G2, dan G3. Oleh sebab itu, senyawa G4 merupakan senyawa yang memiliki kemampuan inhibisi yang lebih baik dibandingkan senyawa G1, G2 dan G3. Nilai elektronegativitas yang besar menyebabkan molekul lebih mudah menarik elektron ke arahnya sehingga lebih mudah teradsorpsi pada permukaan logam³⁰.

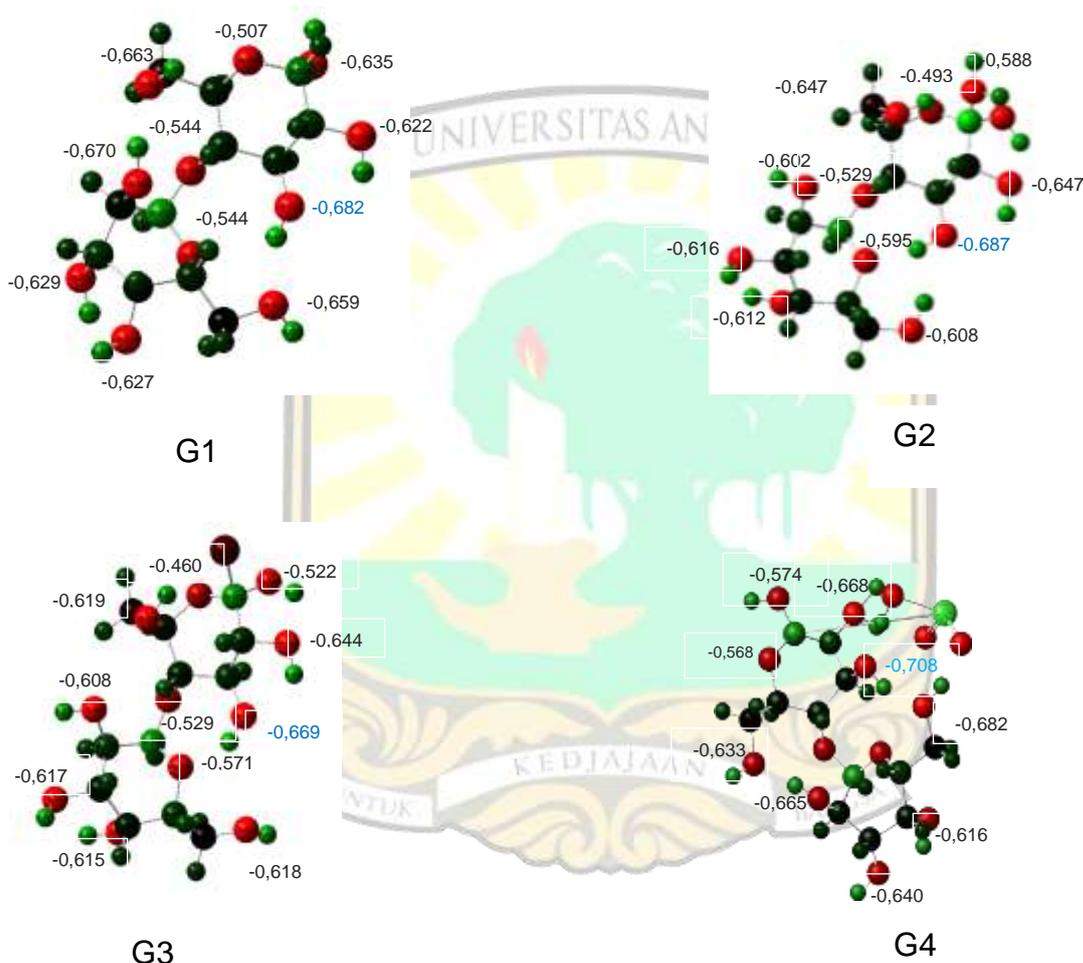
Tabel 4.2 menunjukkan bahwa nilai transfer elektron (ΔN) senyawa G1, G2, G3 dan G4 lebih kecil dari 3,6 eV. Berdasarkan studi literatur, jika nilai ΔN lebih kecil dari 3,6 eV maka kemampuan inhibisi korosi akan meningkat dengan meningkatnya kemampuan donor elektron ke permukaan logam. Nilai $\Delta N < 3,6$ eV menunjukkan kecenderungan molekul untuk menyumbangkan elektron ke permukaan logam^{26,34}. Senyawa G4 memiliki nilai transfer elektron yang lebih tinggi dibandingkan senyawa G1, G2 dan G3 yaitu sebesar 1,1712 eV. Dari nilai tersebut menandakan bahwa senyawa G4 memiliki kemampuan donor elektron yang lebih baik dibandingkan tiga senyawa lainnya. Dari berbagai parameter kimia kuantum yang telah dihitung dapat diketahui bahwa senyawa G4 memiliki kemampuan inhibisi korosi yang lebih baik dibandingkan senyawa G1, G2 dan G3.

4.2 Densitas Mulliken Senyawa G1, G2, G3 dan G4

Nilai muatan atom (Mulliken) dari molekul G1, G2, G3 dan G4 dapat dilihat pada Gambar 4.2. Berdasarkan Gambar 4.2 molekul G1, G2, G3 dan G4 memiliki lebih dari satu nilai muatan atom yang negatif pada atom oksigen. Hal ini menandakan bahwa atom O memiliki kemampuan yang paling besar untuk berikatan dengan permukaan logam. Semakin negatif muatan suatu atom, maka akan semakin besar

kemampuan atom tersebut untuk teradsorpsi pada permukaan logam dan akan semakin mudah molekul inhibitor mendonorkan elektronnya ke permukaan logam⁸.

Gambar 4.2 menunjukkan bahwa muatan atom yang paling negatif terletak pada atom O yang terikat dengan atom C3 (Gambar 2.1), hal ini menandakan bahwa atom tersebut memiliki kemampuan yang paling besar untuk berikatan dengan Fe. Dari nilai densitas mulliken terlihat jika G4 memiliki nilai muatan atom yang paling negatif dibandingkan G1, G2, dan G3, sehingga dapat diketahui bahwa senyawa G4 memiliki kemampuan yang lebih baik dalam mendonorkan elektronnya ke permukaan logam.



Gambar 4.2 Densitas muatan atom senyawa G1,G2, G3 dan G4

4.3 Pengaruh Penambahan Substituen pada Molekul Inhibitor

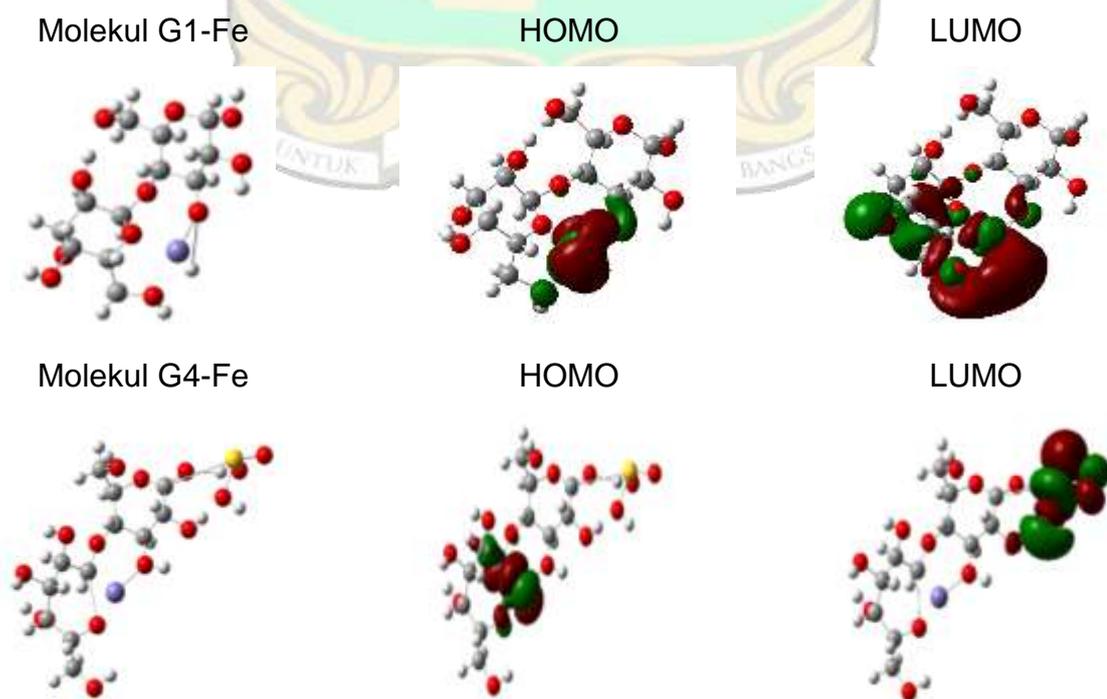
Dari perhitungan parameter kimia kuantum, diketahui bahwa dengan penambahan substituen maka akan semakin baik kemampuan inhibisi suatu inhibitor. Hal ini terlihat dari hasil perhitungan parameter kimia kuantum yang pada umumnya menunjukkan kemampuan inhibisi $G4 > G3 > G2 > G1$. Luas permukaan molekul dengan penambahan substituen menjadi lebih besar dibandingkan tanpa substituen,

sehingga molekul dengan penambahan substituen memiliki permukaan yang lebih besar untuk menutupi permukaan logam^{8,27}.

G2 adalah senyawa G1 yang tersubstitusi gugus pendorong -NH_2 . Gugus pendorong -NH_2 akan mendorong elektron ke arah atom O yang terikat dengan H, sehingga atom O akan bersifat sangat elektronegatif dan ikatan antara O-H akan semakin kuat. G3 dan G4 merupakan senyawa G1 yang tersubstitusi gugus penarik elektron -Br dan $\text{-SO}_3\text{H}$. $\text{-SO}_3\text{H}$ adalah gugus penarik elektron yang lebih kuat dibandingkan -Br . Gugus penarik elektron akan menarik elektron dari atom O sehingga atom O akan bersifat elektropositif dan ikatan antara O-H akan melemah. Namun berdasarkan data Densitas Mulliken, atom O pada senyawa G4 lebih elektronegatif dibandingkan senyawa lainnya, hal ini menandakan bahwa pada senyawa G2 terjadi mekanisme reaksi substitusi nukleofilik 2 (SN2) dan senyawa G4 terjadi mekanisme reaksi substitusi nukleofilik 1 (SN1) yang menyebabkan atom O pada senyawa G4 lebih elektronegatif.

4.4 Absorpsi Senyawa G4 pada Permukaan Logam

Berdasarkan perhitungan parameter kimia kuantum dan nilai muatan densitas mulliken didapatkan bahwa senyawa G4 merupakan senyawa yang memiliki kemampuan inhibisi yang lebih baik dibandingkan tiga senyawa lainnya. Senyawa G4 dengan penambahan Fe pada posisi O yang terikat dengan C3 (Gambar 2.1) dioptimasi berdasarkan pada nilai muatan yang paling negatif dari atom O.



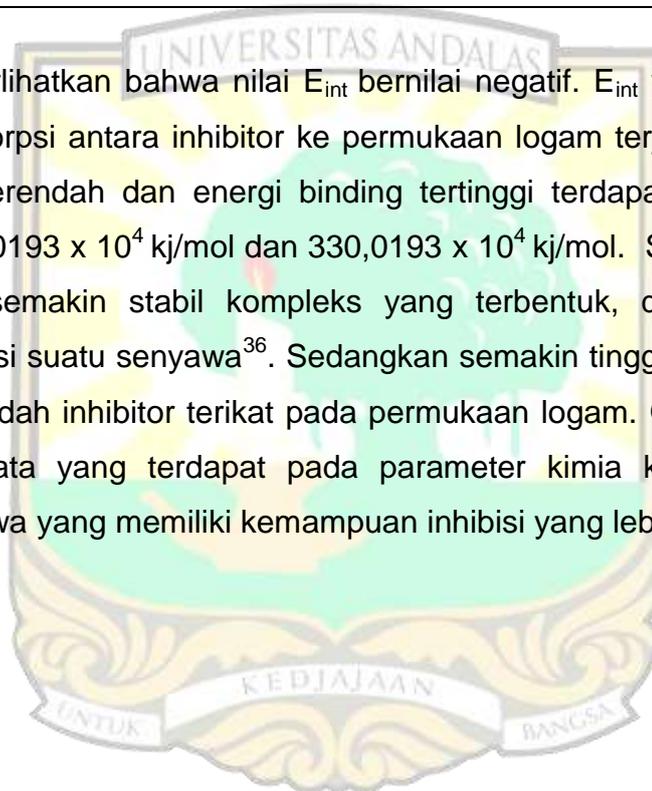
Gambar 4.3 Optimasi Struktur Molekul G1-Fe dan G4-Fe

Dari Gambar 4.3 dapat terlihat bahwa adsorpsi yang terjadi antara inhibitor dengan atom Fe merupakan adsorpsi kimia, hal ini terlihat dari ikatan antara Fe dengan inhibitor berupa garis lurus yang tidak putus-putus. Dari hasil optimasi molekul G1-Fe dan G4-Fe didapatkan nilai energi total seperti pada Tabel 4.3.

Tabel 4.3 Nilai energi interaksi dan energi *binding* dari molekul G1-Fe dan G4-Fe

Senyawa	Energi total (10^4 kJ/mol)	Energi interaksi (10^4 kJ/mol)	Energi binding (10^4 kJ/mol)
G1	-340,4526	-329,5848	329,5848
G4	-504,1558	-330,0193	330,0193
Fe	-1,9659		

Tabel 4.3 memperlihatkan bahwa nilai E_{int} bernilai negatif. E_{int} yang bernilai negatif menunjukkan adsorpsi antara inhibitor ke permukaan logam terjadi secara spontan. Energi interaksi terendah dan energi binding tertinggi terdapat pada molekul G4 dengan nilai $-330,0193 \times 10^4$ kJ/mol dan $330,0193 \times 10^4$ kJ/mol. Semakin rendah nilai E_{int} maka akan semakin stabil kompleks yang terbentuk, dan semakin bagus kemampuan inhibisi suatu senyawa³⁶. Sedangkan semakin tinggi nilai energi *binding* maka semakin mudah inhibitor terikat pada permukaan logam. Oleh karena itu data ini mendukung data yang terdapat pada parameter kimia kuantum bahwa G4 merupakan senyawa yang memiliki kemampuan inhibisi yang lebih baik.



BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

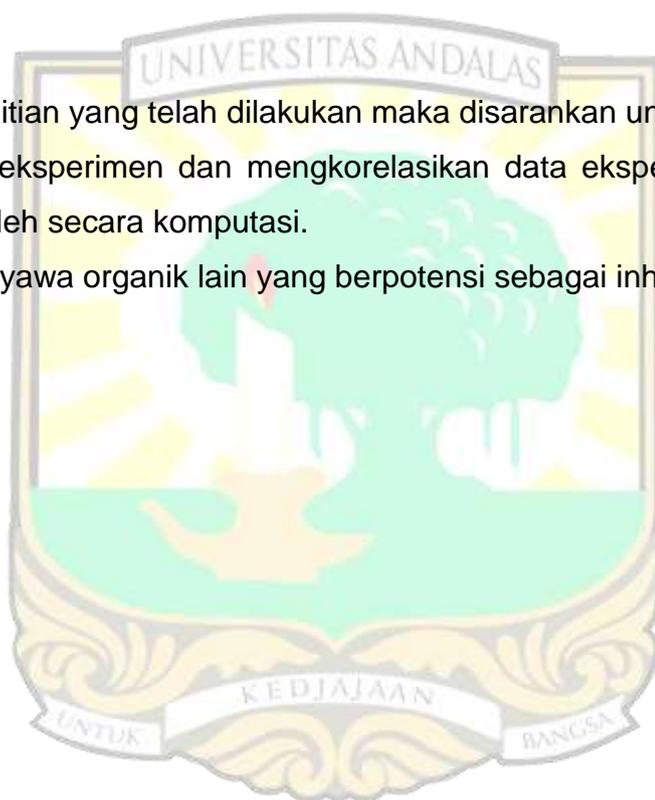
5.1 Kesimpulan

Kemampuan inhibisi korosi senyawa G1 dan turunannya dapat ditentukan dengan metode DFT. Nilai dari parameter kimia kuantum dapat digunakan untuk mengetahui senyawa yang memiliki kemampuan inhibisi korosi yang lebih baik, dimana berdasarkan perhitungan parameter kimia kuantum, senyawa G4 memiliki kemampuan inhibisi korosi yang lebih baik dibandingkan tiga senyawa lainnya. Penambahan substituen dapat meningkatkan kemampuan inhibisi korosi dan substituen SO_3H merupakan substituen yang memiliki kemampuan inhibisi yang lebih baik dibandingkan tiga substituen lainnya.

5.2 Saran

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan maka disarankan untuk:

1. Melakukan eksperimen dan mengkorelasikan data eksperimen dengan data yang diperoleh secara komputasi.
2. Meneliti senyawa organik lain yang berpotensi sebagai inhibitor korosi



DAFTAR PUSTAKA

1. Belghiti, M. E. *et al.* Applied Surface Science Computational simulation and statistical analysis on the relationship between corrosion inhibition efficiency and molecular structure of some hydrazine derivatives in phosphoric acid on mild steel surface. *Applied Surface Science* 2019, 491, 707-722.
2. Guo L, Safi ZS, Kaya S, Shi W, Tüzün B, Altunay N and Kaya C (2018) Anticorrosive Effects of Some Thiophene Derivatives Against the Corrosion of Iron: A Computational Study 2018, 6, 155.
3. Bagga, M.K.; Gadi, R.; Yadav, O.S.; Kumar, R.; Chopra, R.; Singh, G.: Investigation of phytochemical components and corrosion inhibition property of *Ficus racemosa* stem extract on mild steel in H₂SO₄ medium. *Journal of Environmental Chemical Engineering* 2016, 4, 699-707.
4. Phuonga, N.V.; Park, M.S.; Yima, C.D.; You, B.S.; Moon, S.: Corrosion protection utilizing Ag layer on Cu coated AZ31 Mg alloy. *Corrosion Science* 2018.
5. Huong, D. G., Duong, T. & Nam, P. C. Effect of the Structure and Temperature on Corrosion Inhibition of Thiourea Derivatives in 1,0 M HCl Solution. *Corrosion Science* 2019
6. Nurudeen; Odewunmia; Umorena, S.A.; Gasema, Z.M.; Ganiyub, S.A.; Muhammad, G.: L-citrulline: an active corrosion inhibitor component of watermelon rind extract for mild steel in HCl medium. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers* 2015, 1-9.
7. Kamal, C.; Sethuraman, M. G.: *Spirulina platensis* – A novel green inhibitor for acid corrosion of mild steel. *Arabian Journal of Chemistry* 2012, 5, 155-161.
8. Obi-Egbedi, N.O., Obot, I.B., Umoren, S., Ebenso, E. Computational Simulation and Statistical Analysis on the Relationship Between Corrosion Inhibition Efficiency and Molecular Structure of Some Phenanthroline Derivatives on. *International Journal of Electrochemical Science* 2011, 6, 5649–5675.
9. Amoko, J., Akinyele, O., Dare, S. & Oyeneyin, O. E. Synthesis , characterization and computational studies on the corrosion inhibitive potentials of (e) -3- (2-p-tolyldiazenyl) -1-nitrosophthalen-2-ol. 28–48. *Leonardo Journal of Sciences* 2019, 29-48.
10. Mehmeti, V. V & Berisha, A. R. Corrosion Study of Mild Steel in Aqueous Sulfuric Acid Solution Using and 2-Mercaptopyridine-3-carboxylic Acid-An Experimental and Theoretical Study. *Frontiers in Chemistry* 2017, 5, 1–12.
11. Zarrok, H., Assouag, M., Zarrouk, A., Oudda, H., Hallaoui, A., Touzani, R., Allali, M., Hammouti, B., El Hezzat, M., and Bouachrine, M. Quantum chemical study on the corrosion inhibition of some bipyrazoles. *Research Journal of Pharmaceutical, Biological and Chemical Sciences* 2015, 6, 1853–1860
12. Ramadhani, F; Emriadi; Syukri. Theoretical Study of Xanthone Derivative Corrosion Inhibitors Using Density Functional Theory (DFT). *Jurnal Kimia Valensi* 2020, 6, 97–105.
13. Obayes, H. R., Alwan, G. H., Hameed, A., Alobaidy, M. J., Al-amiry, A. A., and Kadhum, A. A. H. Quantum chemical assessment of benzimidazole derivatives

as corrosion inhibitors. *Chemical Central Journal* 2014, 8, 2–9.

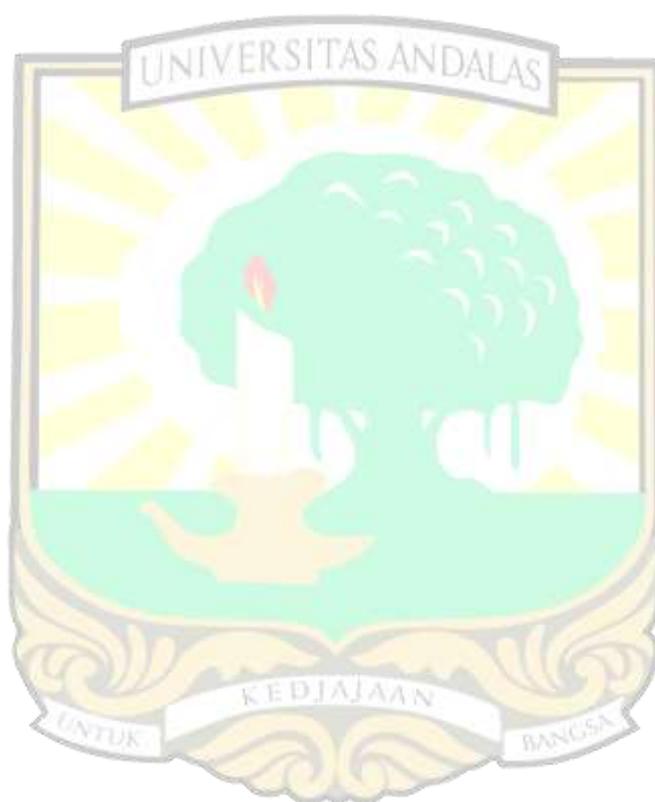
14. Phatak, R. S.; Hendre, A.; Pushpa Prakash Durgawale. Phytochemical Composition of Methanolic Extract of *Phyllanthus acidus* L (Skeels) Fresh Leaves by GC / MS Analysis. *Research Journal Pharmacy and technology* 2016, 9(5), 20–23.
15. Ikpi, M. E., and Abeng, F. E. Theoretical study on the corrosion inhibitor potential of moxifloxacin for API 5L X-52 steel in acidic environment. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science* 2018, 173, 1-7.
16. Guo, L. A; Zaki Safi; Savas Kaya; Wei Shi; Burak Tuzun; Nail Altunay; Cemal Kaya. Anti corrosive of some tiophene derivatives against the corrosion of iron : A Computational study. *Frontiers in Chemistry* 2017, 6, 155
17. K.F. Khaled, M.A. Amin, Computational and electrochemical investigation for corrosion inhibition of nickel in molar nitric acid by piperidines. *Journal Application of Electrochemia* 2008, 38, 1609-1629
18. Alibakhshi, E.; Ramezanzadeh, M.; Bahlakeh, G.; Ramezanzadeh, B.; Mahdavian, M.; Motamedi, M.: *Glycyrrhiza glabra* leaves extract as a green corrosion inhibitor for mild steel in 1 M hydrochloric acid solution : Experimental, molecular dynamics, Monte Carlo and Quantum mechanics study. *Journal of Molecular Liquids* 2018, 255, 185-198.
19. Soltani, N.; Tavakkoli, N.; Kashani, M. K.; Mosavizadeh, A. E. E. O.; Jalali, M. R.: *Silbum marianum* extract as a natural source inhibitor for 304 stainless steel corrosion in 1 M HCl. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry* 2014, 8, 1-11.
20. Sodani, K.A.A.; Amoudi, O.S.B.; Maslehuddin, M.; Shameem, M.: Efficiency of corrosion inhibitors in mitigating corrosion of steel under elevated temperature and chloride concentration. *Construction and Building Material* 2018, 163, 97-112.
21. Pranowo, H.D, *Pengantar Kimia Komputasi*; Pusat Kimia Komputasi Indonesia Austria: Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Gajah Mada, Yogyakarta, 2003
22. Ramachandran, G Deepa, K. Namboori, *Computational Chemistry and Molecular Modeling Principles and Applications*, Verlag Berlin Heidelberg, India, 2008
23. Cramer C.J., *Essentials of Computational Chemistry Theories and Models*, 2 Edition, John Wiley and Sons, Ltd, England, 2004
24. Jensen Frank, *Introduction to Computational Chemistry*, Second Edition, John Wiley and Sons, Ltd, England, 2007
25. Baerends, E. J., and Gritsenko, O. V. A Quantum chemical view of density functional theory. *The Journal of Physical Chemistry* 1997 A 101, 5383-5403.
26. Endorgan, Saban; Zaki S. Safi; Savas Kaya; Dilara Ozabak; Lei Guo; Cemal Kaya. A computational study on corrosion inhibition performances of novel Guinoline derivatives against the corrosion of iron. *Journal of Molecular Structure* 2017, 1134, 751-761
27. Rbaa, M.; Meriem, F; Verma, C.; Ashraf S. Abousalem; M.Galai.; Ebenso.; T. Guedira.; B.Lakhrissi; Warad A. Zarrouk. 8-HydroxyGuinoline based chitosan

derived carbohydrate polymer as biodegradable and sustainable acid corrosion inhibitor for mild steel: Experimental and computational analyses. *International Journal of Biological Macromolecules* 2020, 1-11

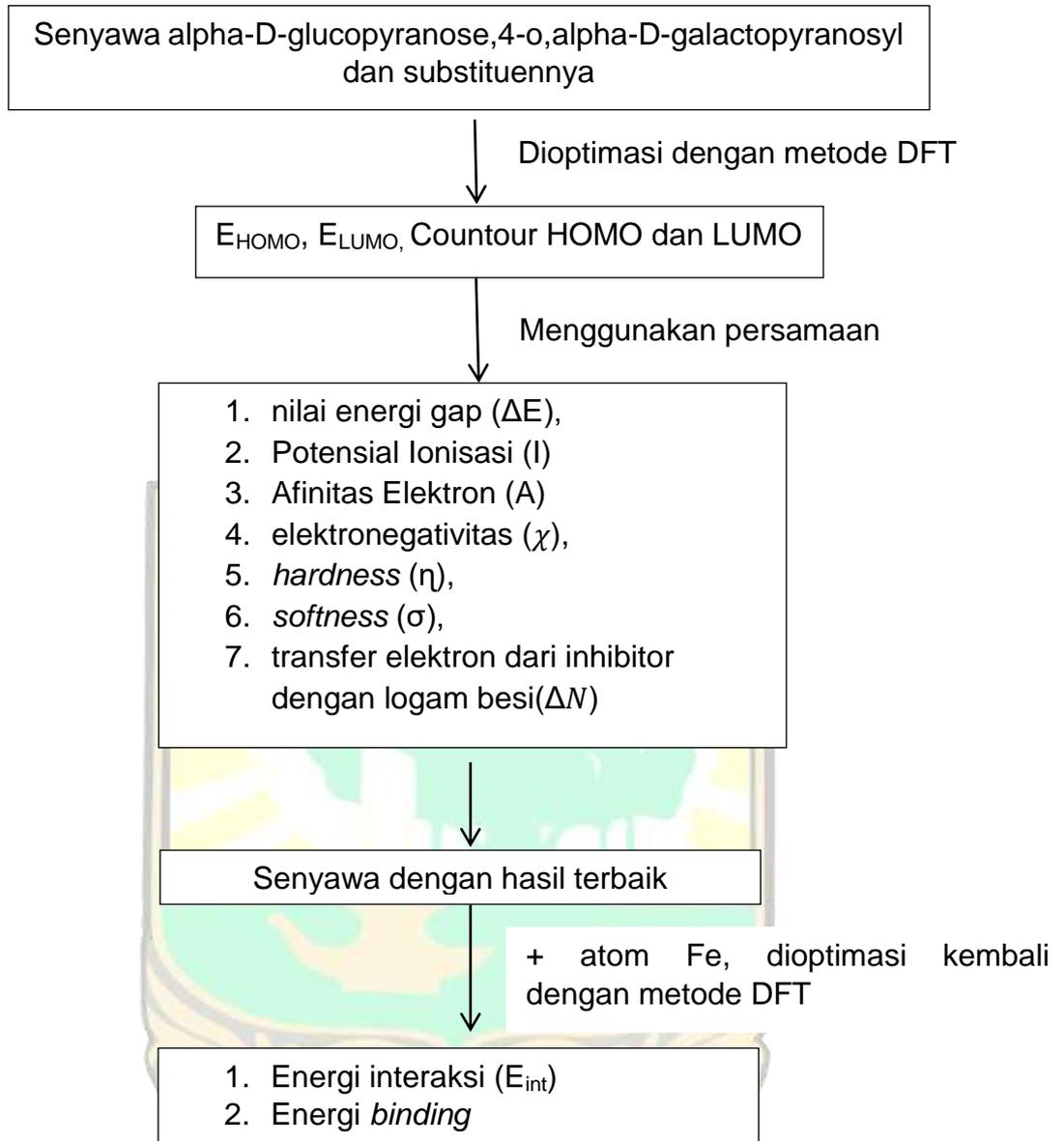
28. Saha, S. K., Hens, A., Roychowdhury, A., Lohar, A. K., Murmu, N. C., and Banerjee, P. Molecular dynamics and density functional theory study on corrosion inhibitory action of three substituted pyrazine derivatives on steel surface. *Canadian Chemical Transactions* 2014, 2, 489–503.
29. Khalil, N. Quantum chemical approach of corrosion inhibition. *Electrochimica Acta* 48: 2003, 2635–2640.
30. Udowo, V. M. Computational Studies of the Corrosion Inhibition Potentials of Guercetin and Coumarin. *Archives of Organic and Inorganic Chemical Sciences* 2018, 2, 168–171.
31. Harvey, T. G., Hardin, S. G., Hughes, A. E., Muster, T. H., White, P. A., Markley, T. A., Corrigan, P. A., Mardel, J., Garcia, S. J., Mol, J. M. C., and Glenn, A. M. The effect of inhibitor structure on the corrosion of AA2024 and AA7075. *Corrosion Science* 2011, 53, 2184–2190.
32. Jisha, M.; N.H. Zeinul Hukuman; P. Leena; A.K Abdussalam. Electrochemical , computational and adsorption studies of leaf and floral extracts of Pogostemon Guadrifolius (Benth .) as corrosion inhibitor for mild steel in hydrochloric acid. *Journal of Materials and Environmental Sciences* 2019, 10, 840–853.
33. Dagdag, O.; Zaki Safi; Hamid Erramli.;Omar Cherkaoui; Nuha Wazzan; Lei Guo; Chandrabhan Verma; Ebenso; Ahmed El Harfia. Adsorption and anticorrosive behavior of aromatic epoxy monomers on carbon steel corrosion in acidic solution : computational studies and sustained experimental studies. *Royal Society of Chemistry* 2019, 9, 14782–14796.
34. Gece, G. & Bilgiç, S. A computational study of two hexitol borates as corrosion inhibitors for steel. *International Journal Corrosion Scale Inhibitor* 2017, 6, no. 4, 476–484
35. Shahraki, M., Dehdab, M. & Elmi, S. Theoretical studies on the corrosion inhibition performance of three amine derivatives on carbon steel : Molecular dynamics simulation and density functional theory approaches. *Journal of Taiwan Insitute of Chemical Engineers* 2016, 1–9.
36. Şahin, M., Gece, G., Karıcı, F., and Bilgiç, S. Experimental and theoretical study of the effect of some heterocyclic compounds on the corrosion of low carbon steel in 3.5% NaCl medium. *Journal of Applied Electrochemistry* 2008, 38, 809–815.
37. Ladha, D. G; N.K Shah; Z.Ghelichkha; I.B Obot; F.Khorrami Dekharghani; J.Z Yao;D.D Macdonald. Experimental and computational evaluation of illicium verum as a novel eco-friendly corrosion inhibitor for aluminium. *Materials and corrosion* 2017,1-15
38. Arthur, D. E., Uzairu, A., Mustapha, A., and Adeniji, E. S. A Computational adsorption and DFT studies on corrosion inhibition potential of some derivatives of phenyl-UREA. *Journal of Nanotechnology & Nanoscience* 2019, 5, 19–32.
39. Laarej, K., Bouachrine, M., Radi, S., Kertit, S. & Hammouti, B. Quantum Chemical Studies on the Inhibiting Effect of Bipyrazoles on Steel Corrosion in

HCl. *Journal of Chemistry* 2010, 7, 419–424.

40. Obot, I. B., and Obi-Egbedi, N. O. Adsorption properties and inhibition of mild steel corrosion in sulphuric acid solution by ketoconazole: *Experimental and theoretical investigation. Corrosion Science* 2010, 52, 198–204.
41. Pearson, R.G. Absolute Electronegativity and Hardness: Application to Inorganic Chemistry. *Inorganik Chemistry* 1998, 27, 734-740
42. Kazem, M. PM3 and DFT Quantum Mechanical Calculations of Two New N-Benzyl-5-Bromolsatin Derivatives as Corrosion Inhibitors 2016, 5, 16–27.



Lampiran 1. Skema Kerja



Lampiran 2. Output Optimasi Molekul G1 dengan Metode DFT menggunakan software Gaussian

```
Gaussian 16: IA32W-G16RevB.01 16-Dec-2017
                    05-May-2020
*****
%chk=D:\GLUKOPYRONASE IISA\SEIYAWA 1 CHEMDRAW FIX siap cas mati.chk
-----
# opt freq b3lyp/6-31g geom=connectivity
-----
1/18=20,19=15,26=3,38=1,57=2/1,3;
2/9=110,12=2,17=6,18=5,40=1/2;
3/5=1,6=6,11=2,25=1,30=1,71=1,74=-5/1,2,3;
4//1;
5/5=2,38=5/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2,28=1/1;
7//1,2,3,16;
1/18=20,19=15,26=3/3(2);
2/9=110/2;
99//99;
2/9=110/2;
3/5=1,6=6,11=2,25=1,30=1,71=1,74=-5/1,2,3;
4/5=5,16=3,69=1/1;
5/5=2,38=5/2;
7//1,2,3,16;
1/18=20,19=15,26=3/3(-5);
2/9=110/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2,19=2,28=1/1;
99/9=1/99;
```

Title Card Required

Symbolic Z-matrix:

Charge = 0 Multiplicity = 1

C	0.9163	-0.24835	-0.14216
H	0.43944	-0.04734	-1.08392
C	1.82077	-1.34111	-0.34869
H	1.73717	-1.62093	-1.38298
C	3.20941	-1.17383	-0.07985
H	3.46862	-1.91411	0.65511
C	3.69833	0.08463	0.40263

H	4.17078	-0.1059	1.34963
C	2.78059	1.16424	0.60618
H	2.85157	1.44302	1.64196
O	1.41524	0.97613	0.32799
C	3.23331	2.35916	-0.26054
H	4.24172	2.62723	-0.00754
H	3.18597	2.08684	-1.29859
O	2.36299	3.47379	-0.01354
H	2.79735	4.28914	-0.28631
O	4.69351	0.54391	-0.53124
H	5.55698	0.19652	-0.28444
O	3.90609	-1.46483	-1.30714
H	4.1437	-2.39878	-1.32955
O	1.39092	-2.43937	0.47672
H	0.88295	-3.06603	-0.04793
O	-0.09216	-0.65241	0.80652
C	-1.39762	-0.33119	0.30907
H	-2.37622	-0.08177	-0.06167
C	-2.13884	0.71944	0.93868
H	-1.73839	1.71983	0.90793
C	-1.94582	-1.05337	-0.80933
H	-1.4122	-0.95798	-1.74197
C	-3.44056	1.05422	0.44219
H	-4.0625	0.94157	1.3122
C	-3.98827	0.33195	-0.6793
H	-4.91628	-0.08505	-0.33006
O	-2.04637	0.21864	2.28948
H	-2.64412	0.71321	2.86614
O	-3.4625	2.42989	0.02314
H	-4.29771	2.83592	0.27841
O	-4.26628	1.2356	-1.75718
H	-5.1683	1.09976	-2.06831
O	-3.23336	-0.69561	-1.28248
C	-1.83981	-2.53932	-0.33397
H	-2.79664	-3.0094	-0.47575
H	-1.10005	-3.04041	-0.93246
O	-1.48746	-2.66345	1.0488
H	-1.85551	-3.48255	1.40196

Requested convergence on RMS density matrix=1.00D-08 within 128 cycles.
 Requested convergence on MAX density matrix=1.00D-06.
 Requested convergence on energy=1.00D-06.
 No special actions if energy rises.
 Integral accuracy reduced to 1.0D-05 until final iterations.
 Initial convergence to 1.0D-05 achieved. Increase integral accuracy.
 SCF Done: E(RB3LYP) = -1296.85216234 A.U. after 17 cycles
 HFock= 17 Conv=0.64D-08 -V/T= 2.0020

Population analysis using the SCF Density.

Mulliken charges:

1		
1	C	0.279478
2	H	0.134126
3	C	0.009852
4	H	0.167492
5	C	0.048934
6	H	0.178309
7	C	0.037315
8	H	0.148175
9	C	0.100651
10	H	0.146336
11	O	-0.478492
12	C	0.031647
13	H	0.117193
14	H	0.145474
15	O	-0.615309
16	H	0.346635
17	O	-0.557487
18	H	0.351438
19	O	-0.572795
20	H	0.349302
21	O	-0.556114
22	H	0.357911
23	O	-0.402600
24	C	0.245987
25	H	0.118841
26	C	-0.111547
27	H	0.205530
28	C	-0.001507
29	H	0.137554
30	C	0.006463



31	H	0.165005
32	C	0.269426
33	H	0.142467
34	O	-0.504720
35	H	0.306419
36	O	-0.518705
37	H	0.358024
38	O	-0.504334
39	H	0.361174
40	O	-0.482682
41	C	0.014359
42	H	0.128558
43	H	0.092752
44	O	-0.541929
45	H	0.345397

Sum of Mulliken charges = 0.00000

Mulliken charges with hydrogens summed into heavy atoms:

	1	
1	C	0.413604
3	C	0.177344
5	C	0.227242
7	C	0.185490
9	C	0.246987
11	O	-0.478492
12	C	0.294314
15	O	-0.268674
17	O	-0.206049
19	O	-0.223494
21	O	-0.198203
23	O	-0.402600
24	C	0.364827
26	C	0.093982
28	C	0.136047
30	C	0.171468
32	C	0.411894
34	O	-0.198300
<hr/>		
36	O	-0.160682
38	O	-0.143160
40	O	-0.482682
41	C	0.235669
44	O	-0.196532

Electronic spatial extent (au): $\langle R^{*2} \rangle =$ 8083.4524
 Charge= 0.0000 electrons
 Dipole moment (field-independent basis, Debye):
 X= -3.3697 Y= -3.1999 Z= -0.0431 Tot= 4.6472
 Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):
 XX= -72.1951 YY= -119.7876 ZZ= -142.0014
 XY= -6.2251 XZ= -1.1039 YZ= 8.3879
 Traceless Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):
 XX= 39.1330 YY= -8.4596 ZZ= -30.6734
 XY= -6.2251 XZ= -1.1039 YZ= 8.3879
 Octapole moment (field-independent basis, Debye-Ang^{**2}):
 XXX= -105.8079 YYY= -34.6778 ZZZ= 14.0559 XYY= 16.5895
 XXY= 38.0971 XXZ= 57.4728 XZZ= -16.5565 YZZ= 9.5212
 YYZ= -7.6668 XYZ= -5.9782
 Hexadecapole moment (field-independent basis, Debye-Ang^{**3}):
 XXXX= -4751.4281 YYYY= -1798.7062 ZZZZ= -777.7629 XXXY= -388.1170
 XXXZ= 200.5178 YYYY= 120.3702 YYYZ= -46.6411 ZZZX= -24.0433
 ZZZY= 1.7654 XXYY= -1153.6790 XXZZ= -1207.3538 YYZZ= -493.3045
 XXYZ= 30.5107 YYXZ= -143.3435 ZZXY= -32.6355



Lampiran 3. Resume Output molekul G1

G1:M1:V1 - Gaussian Calculation Summary

Overview Thermo Opt

Title Card Required		
D:/GLUKOPYRONASE NISA/senyawa 1 cermai.chk		
File Type	.chk	
Calculation Type	FREQ	
Calculation Method	RB3LYP	
Basis Set	6-31G	
Charge	0	
Spin	Singlet	
Solvation	None	
Electronic Energy	-1297.488081	Hartree
RMS Gradient Norm	0.000008	Hartree/Bohr
Imaginary Freq	1	
Dipole Moment	2.765410	Debye
Polarizability (α)	155.057140	a.u.
Point Group		

Ok File Help



Lampiran 4. Perhitungan

1. Energi gap (ΔE)

$$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$$

- Molekul G1

$$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$$

$$\Delta E = (0,71185 \text{ eV}) - (-6,43223 \text{ eV})$$

$$\Delta E = 7,1441 \text{ eV}$$

- Molekul G2

$$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$$

$$\Delta E = (0,55810 \text{ eV}) - (-5,71439 \text{ eV})$$

$$\Delta E = 6,2725 \text{ eV}$$

- Molekul G3

$$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$$

$$\Delta E = (-0,68001 \text{ eV}) - (-6,6569 \text{ eV})$$

$$\Delta E = 5,9770 \text{ eV}$$

- Molekul G4

$$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$$

$$\Delta E = (-3,42292 \text{ eV}) - (-5,56337 \text{ eV})$$

$$\Delta E = 2,1404 \text{ eV}$$

2. Potensial ionisasi (I)

$$I = -E_{\text{HOMO}}$$

- Molekul G1

$$I = -E_{\text{HOMO}}$$

$$I = -(-6,43223 \text{ eV})$$

$$I = 6,4322 \text{ eV}$$

- Molekul G2

$$I = -E_{\text{HOMO}}$$

$$I = -(-5,71439 \text{ eV})$$

$$I = 5,7144 \text{ eV}$$

- Molekul G3

$$I = -E_{\text{HOMO}}$$

$$I = -(-6,6569 \text{ eV})$$

$$I = 6,6569 \text{ eV}$$

- Molekul G4

$$I = -E_{\text{HOMO}}$$

$$I = -(-5,56337 \text{ eV})$$

$$I = 5,5634 \text{ eV}$$

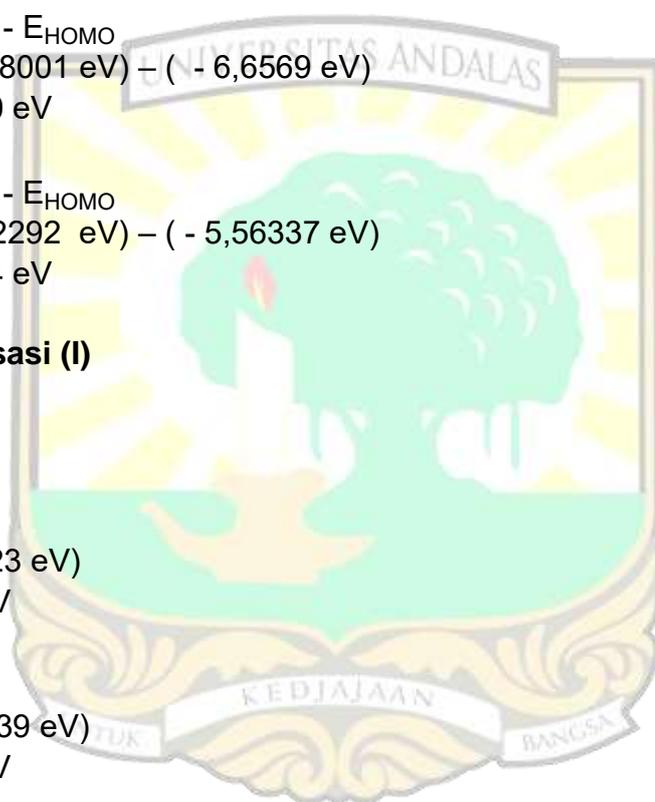
3. Afinitas elektron (A)

$$A = -E_{\text{LUMO}}$$

- Molekul G1

$$A = -E_{\text{LUMO}}$$

$$A = -(0,71185 \text{ eV})$$



- $A = -0,7118 \text{ eV}$
- Molekul G2
 $A = -E_{\text{LUMO}}$
 $A = -(0,55810 \text{ eV})$
 $A = -0,5581 \text{ eV}$
- Molekul G3
 $A = -E_{\text{LUMO}}$
 $A = -(-0,68001 \text{ eV})$
 $A = 0,6800 \text{ eV}$
- Molekul G4
 $A = -E_{\text{LUMO}}$
 $A = -(-3,387373 \text{ eV})$
 $A = 3,3874 \text{ eV}$

4. Perhitungan global hardness (η)

$$\eta = \frac{I-A}{2} = -\frac{1}{2} (E_{\text{HOMO}} - E_{\text{LUMO}})$$

- Molekul G1
 $\eta = \frac{1-A}{2} = -\frac{1}{2} (-6,43223 - 0,71185) \text{ eV} = 3,5720 \text{ eV}$
- Molekul G2
 $\eta = \frac{1-A}{2} = -\frac{1}{2} (-5,71439 - 0,55810) \text{ eV} = 3,1362 \text{ eV}$
- Molekul G3
 $\eta = \frac{1-A}{2} = -\frac{1}{2} (-6,6569 - (-0,68001)) \text{ eV} = 2,9885 \text{ eV}$
- Molekul G4
 $\eta = \frac{1-A}{2} = -\frac{1}{2} (-5,56337 - (-3,42292)) \text{ eV} = 1,0702 \text{ eV}$

5. Perhitungan global softness (σ)

$$\sigma = \frac{1}{\eta} = -\left(\frac{2}{E_{\text{HOMO}} - E_{\text{LUMO}}}\right)$$

- Molekul G1
 $\sigma = \frac{1}{\eta} = -\left(\frac{2}{-6,43223 - 0,71185}\right) = 0,2799 \text{ eV}^{-1}$
- Molekul G2
 $\sigma = \frac{1}{\eta} = -\left(\frac{2}{-5,71439 - 0,55810}\right) = 0,3188 \text{ eV}^{-1}$
- Molekul G3
 $\sigma = \frac{1}{\eta} = -\left(\frac{2}{-6,6569 - (-0,68001)}\right) = 0,3346 \text{ eV}^{-1}$
- Molekul G4
 $\sigma = \frac{1}{\eta} = -\left(\frac{2}{-5,56337 - (-3,42292)}\right) = 0,9343 \text{ eV}^{-1}$

6. Perhitungan nilai elektronegativitas (χ)

$$\chi = \frac{I+A}{2} = -\frac{1}{2} (E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}})$$

- Molekul G1

$$\chi = \frac{I+A}{2} = -\frac{1}{2}(-6,43223 + 0,71185) = 2,8602 \text{ eV}$$

- Molekul G2

$$\chi = \frac{I+A}{2} = -\frac{1}{2}(-5,71439 + 0,55810) = 2,5781 \text{ eV}$$

- Molekul G3

$$\chi = \frac{I+A}{2} = -\frac{1}{2}(-6,6569 + (-0,68001)) = 3,6685 \text{ eV}$$

- Molekul G4

$$\chi = \frac{I+A}{2} = -\frac{1}{2}(-5,56337 + (-3,42292)) = 4,4931 \text{ eV}$$

7. Perhitungan elektron transfer muatan (ΔN)

$$\Delta N = \frac{\chi_{\text{Fe}} - \chi_{\text{inh}}}{2(\eta_{\text{Fe}} + \eta_{\text{inh}})}$$

- Molekul G1

$$\Delta N = \frac{7 - 2,86019}{2(0 + 3,57204)} = 0,5795$$

- Molekul G2

$$\Delta N = \frac{7 - 2,57814}{2(0 + 3,13625)} = 0,7050$$

- Molekul G3

$$\Delta N = \frac{7 - 3,66850}{2(0 + 2,98849)} = 0,5574$$

- Molekul G4

$$\Delta N = \frac{7 - 4,49314}{2(0 + 1,07022)} = 1,1712$$

8. Perhitungan energi interaksi (E_{int})

$$E_{\text{interaksi}} = E_{\text{kompleks}} - E_{\text{Fe}} - E_{\text{inhibitor}}$$

- Penambahan Fe pada G1

$$\begin{aligned} E_{\text{interaksi}} &= E_{\text{kompleks}} - E_{\text{Fe}} - E_{\text{inhibitor}} \\ &= (-2559,53375 \text{ a.u.}) - (-7,488 \text{ a.u.}) - (-1296,72328) \\ &= -1255,3225 \text{ a.u.} \\ &= -329,5847 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

- Penambahan Fe pada G4

$$\begin{aligned} E_{\text{interaksi}} &= E_{\text{kompleks}} - E_{\text{Fe}} - E_{\text{inhibitor}} \\ &= (-3184,69373 \text{ a.u.}) - (-7,488 \text{ a.u.}) - (-1920,22841 \text{ a.u.}) \\ &= -1256,9773 \text{ a.u.} \\ &= -330,0193 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

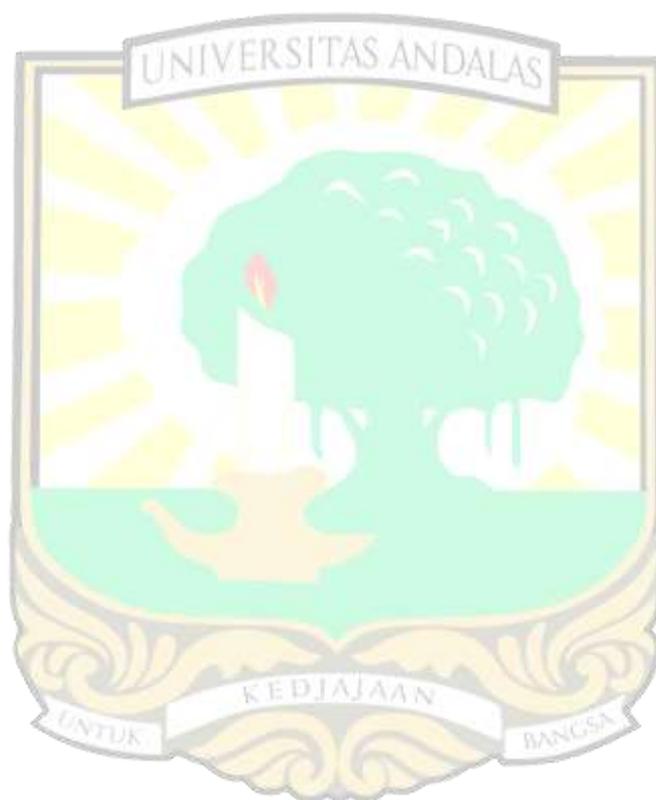
9. Perhitungan *binding energy* (E_{binding})

$$E_{\text{binding}} = - E_{\text{interaksi}}$$

- Penambahan Fe pada G1

$$E_{\text{binding}} = - E_{\text{interaksi}} = 329,5847 \text{ kJ/mol}$$

- Penambahan Fe pada G4
 $E_{\text{binding}} = - E_{\text{interaksi}} = 330,0193 \text{ kJ/mol}$



BIODATA PENULIS

Nama Lengkap : Annisa Latulkhaira
Tempat dan Tanggal Lahir : Bukittinggi, 04 Juli 1999
Jenis Kelamin : Perempuan
No. Telp/Hp : 082391124815
Asal SMA : SMAN 3 Bukittinggi
Orang Tua
Nama Ayah : Yulizar
Pekerjaan : Tani
Nama Ibu : Leni
Pekerjaan : Tani
Anak ke : 1 dari 2 bersaudara
Alamat Rumah : Jorong Simpang, Nagari Batagak, Kecamatan Sungai Pua, Kabupaten Agam
Email : annisalatulkhaira12@gmail.com
Visi Hidup : Menjadi manusia yang bermanfaat bagi manusia lainnya

