

**ANALISIS KOMPUTASI INHIBISI KOROSI BESI OLEH SENYAWA
DERIVAT KUINOLIN**



OLEH:

RAESTA SIDIQ

BP: 1610412060

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2021

**ANALISIS KOMPUTASI INHIBISI KOROSI BESI OLEH SENYAWA
DERIVAT KUINOLIN**



LEMBARAN PENGESAHAN

“ANALISIS KOMPUTASI GREEN INHIBISI KOROSI BESI OLEH SENYAWA DERIVAT KUINOLIN” merupakan skripsi sarjana kimia yang diajukan oleh Raesta Sidiq (1610412060) sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains (Strata 1) pada Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Andalas.

Disetujui Oleh:

Pembimbing I

Pembimbing II



Imelda, M.Si

Prof. Dr. Emriadi

NIP.197711082005012002

NIP. 196204091987031003

Mengetahui,

Ketua Jurusan Kimia

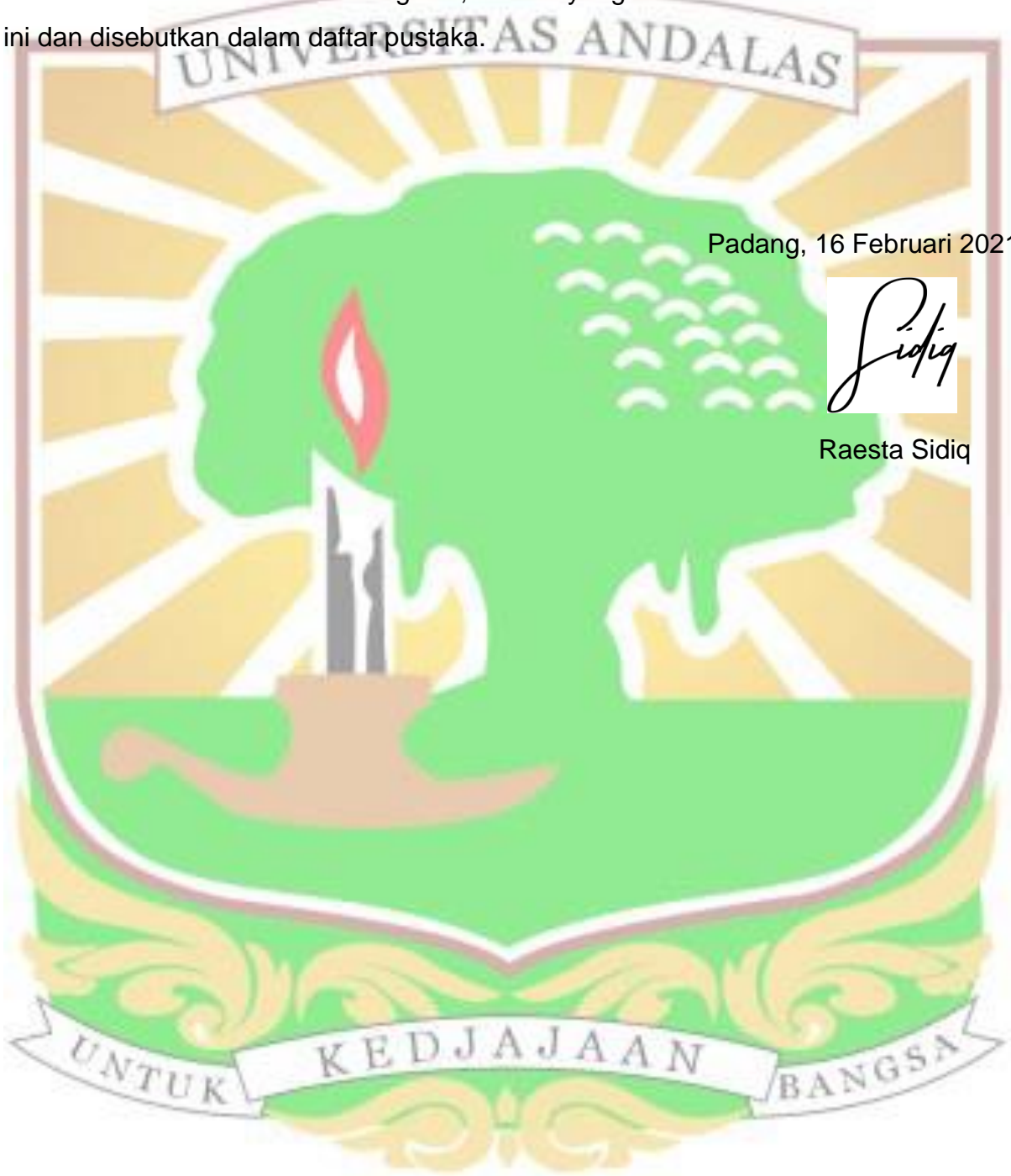


Dr. Mai Efdi

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 tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.



Padang, 16 Februari 2021

Raesta Sidiq

HALAMAN PERSEMBAHAN



Alhamdulillahirabbil'alamin, puji syukur diucapkan kepada Allah SWT yang telah memberikan rahmat dan karunia-Nya dalam menyelesaikan tugas akhir.

Skripsi ini dipersembahkan untuk kedua Orang Tua yang selalu mendo'akan, memberi semangat, serta selalu sabar dalam hal mendengarkan keluh kesah dalam menyelesaikan skripsi ini.

Untuk Ayah (Rasmai Nurdianto) , Ibu (Erni Dewita) , Adik-Adik (Raesta Al Farhan dan Raesta Nailah Fitri) dan seluruh keluarga besar yang selalu memberikan do'a dalam kelancaran studi, serta memberi semangat, nasehat dan materi selama menempuh pendidikan dan dalam menyelesaikan skripsi ini.

Terimakasih atas semua dukungan yang telah diberikan. Semoga apa yang telah diharapkan dapat diwujudkan oleh Allah SWT. Aamiin Ya Rabbal'alamiin

Wassalam

Raesta Sidiq



INTISARI

Analisis Komputasi Inhibisi Korosi Besi Oleh Senyawa Derivat Kuinolin

Oleh:

Raesta Sidiq (1610412060)
Imelda, M.Si *, Prof. Dr. Emriadi*
Pembimbing*

Kuinolin merupakan basa lemah yang mengandung gugus aromatik heterosiklik dengan rumus molekul C_9H_7N . Oleh karena itu berdasarkan strukturnya kuinolin bisa digunakan sebagai inhibitor korosi besi. Penelitian ini menggunakan paket program Gaussian 16W dengan metode perhitungan DFT (*Density Functional Theory*) dan basis set B3LYP/6-31G. Molekul inhibitor yang di Analisa adalah derivat kuinolin dengan simbol Inh 1, Inh 2, Inh 3, Inh 4, Inh 5, dan Inh 6 dengan pelarut dan tanpa pelarut. Deskriptor analisis berupa E_{HOMO} , E_{LUMO} , Countour HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) dan LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) serta ESP (Elektrosatik Potensial). band gap (ΔE), elektronegativitas (χ), potensial kimia (μ), hardness (η), softness (σ), elektrofilitas (ω), nukleofilitas (ϵ), Energi ionisasi (I), Afinitas electron (A), Jumlah transfer elektron (ΔN), ΔE back-donasi, Energi ikatan dan Energi Interaksi ($\Delta\psi$). Hasil Analisa menunjukkan kekuatan efisiensi inhibisi adalah Inh 6>Inh 5>Inh 3>Inh 4>Inh 2>Inh 1.

Kata kunci : Kuinolin, DFT, Korosi Besi , Inhibisi



ABSTRACT

Computation Analysis of Inhibition of Iron Corrosion by Quinoline Derivates

by :

Raesta Sidiq (1610412060)
Imelda, M.Si *, Prof. Dr. Emriadi*
Supervisor*

Quinoline is a weak base containing a heterocyclic aromatic group with the molecular formula C_9H_7N , so that quinoline is commonly used as an iron corrosion inhibitor. This study uses the Gaussian 16W program package with the DFT (Density Functional Theory) calculation method and base set B3LYP / 6-31G. The inhibitor molecules analyzed are quinoline derivatives with the symbols R1, R2, R3, R4, R5, and R6 with solvent and without solvent. The descriptor of analysis in the form of EHOMO, ELUMO, Countour HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) and LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) and ESP (Electrostatic Potential). bandgap (ΔE), electronegativity (χ), chemical potential (μ), hardness (η), softness (σ), electrophilicity (ω), nucleophilicity (ϵ), ionization energy (I), electron affinity (A), number transfer electron (ΔN), ΔE back-donation, and interaction energy ($\Delta\psi$). The results of the analysis show that the strength of the inhibition efficiency is $Inh\ 6 > Inh\ 5 > Inh\ 3 > Inh\ 4 > Inh\ 2 > Inh\ 1$.

Keywords : Quinoline, DFT, Iron Corrosion, Inhibition



UCAPAN TERIMAKASIH

Syukur Alhamdulillah penulis ucapkan atas kehadiran Allah SWT atas segala karunia dan rahmat-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan penulisan skripsi dengan judul **“Analisis Komputasi Inhibisi Korosi Besi Oleh Senyawa Derivat Kuinolin”**. Dalam penyusunan skripsi ini penulis banyak mendapat bimbingan, arahan, nasehat, bantuan serta dorongan dari berbagai pihak. Pada kesempatan ini penulis mengucapkan terimakasih dan penghargaan yang sebesar-besarnya kepada :

1. Imelda, MSi sebagai Pembimbing I dan Prof. Dr. Emriadi sebagai Pembimbing II kemurahan hati dan kesabaran dalam memberikan ilmu, saran masukan, arahan serta bimbingan selama penulis melakukan penelitian hingga dapat menyelesaikan penulisan skripsi ini dengan baik.
2. Dr. Matlal Fajri Alif selaku Pembimbing Akademik.
3. Dr. Syukri selaku koordinator pendidikan Jurusan Kimia.
4. Seluruh dosen, staf pengajar dan karyawan Jurusan Kimia.
5. Rekan-rekan BEM KM UNAND KABINET AKSELERASI PADU & TEKAD JUANG yang telah memberikan kenangan dalam masa perkuliahan penulis.
6. Rekan-rekan OKS16EN yang telah memberikan kenangan dalam masa perkuliahan penulis.
7. SOMBING (Iqbal Desriman, Putri Arwanda, Honesti Putri, Fadhilatul Wahyu, Annisa Latulkhaira) yang telah memberikan support dalam proses penelitian serta penulisan skripsi ini.
8. Rekan-rekan yang telah berbagi cerita dalam proses perkuliahan yang penulis jalani (Muhammad Ghufuran, Zilfadli, Ronnie Ichsanul Irsal dan Teman-teman).
9. Rekan-rekan BRZ Squad (M. Abdul Effendi, Arif Yuliansyah, Iqbal Desriman, Firman Al-Jufri, Taufik Hidayat).
10. Sotong (Fauzan Rivaldo dan Hari Prabowo) yang telah memberikan dukungan dikala masa down
11. Saudara Seperbimbingan (Jovanka Rahma Prasetya, Mukhniyal Ikham, Heri Mafiraji Atmoko, Harry Hidayat, Nurul Annisyah, Sylvia Desi Gultom
12. TIM CABAT (Natasha Dwi Putri, Firman Al-Jufri, dan Yuzia Siti Nurhamimah) yang Menemani Masa tahun akhir yang tidak ghosting
13. Semua pihak yang telah membantu dan berkontribusi dalam menyelesaikan skripsi ini, serta memberikan saran dan motivasi kepada penulis.

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, 17 Februari 2021



Sidiq

Penulis

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	ii
INTISARI	iv
ABSTRACT	v
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xii
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG	xiii
BAB I. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan Penelitian	2
1.4 Manfaat Penelitian	2
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA	3
2.1 Logam Fe	3
2.2 Korosi Besi	3
2.3 Inhibitor korosi	3
2.4 Kuinolin	4
2.5 Kimia Komputasi	5
2.6 Metode DFT	5
BAB III. METODE PENELITIAN	7
3.1 Waktu dan Tempat	7
3.2 Alat Dan Bahan	7
3.2.1 Alat	7
3.2.2 Molekul yang dianalisa	7
3.3 Prosedur Penelitian	7
3.3.1 Penggambaran struktur molekul dan struktur elektronik	7
3.3.2 Optimasi Molekul Kuinolin	8
3.3.3 Optimasi Molekul Kuinolin yang Berinteraksi dengan Fe	8
BAB IV. HASIL DAN PEMBAHASAN	10
4.1 Struktur molekul inhibitor	10
4.2 Struktur Geometri optimal, contour HOMO dan LUMO senyawa derivat kuinolin	11

4.3 Electrostatic Potential (ESP)	13
4.4 Parameter kereaktifan inhibitor senyawa derivat kuinolin.....	15
4.4.1 Energi HOMO dan LUMO.....	15
4.4.2 Energi Ionisasi (I)	16
4.4.3 Afinitas elektron (A)	16
4.4.4 Bandgap (ΔE).....	17
4.4.5 Elektronegativitas (X)	17
4.4.6 Hardness (η).....	17
4.4.7 Softness (σ).....	18
4.4.8 Elektrofilitas (ω)	18
4.4.9 Nukleofilitas (ϵ)	18
4.5 Energi Total	19
4.6 Momen Dipol	19
4.7 Parameter kereaktifan inhibitor dengan logam Fe.....	20
4.7.1 Transfer muatan (ΔN).....	20
4.7.2 Energi interaksi ($\Delta\psi$).....	20
4.7.3 Energi back-donasi (ΔE_{b-d})	21
4.8 Analisa kereaktifan inhibitor dalam tanpa pelarut dan fasa pelarut	21
4.9 Mekanisme resonansi elektron π pada senyawa derivat kuinolin	22
4.10 Analisa kekuatan ikatan antara Inhibitor 5 dan Inhibitor 6	23
4.11 Nilai Efisiensi Inhibisi Korosi Senyawa derivat kuinolin.....	24
BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN	26
5.1 Kesimpulan.....	26
5.2 Saran.....	26
DAFTAR PUSTAKA	27



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	Struktur kerangka senyawa kuinolin	4
Gambar 4.1	Struktur molekul dari senyawa derivat kuinolin	10
Gambar 4.2	Struktur geometri, contour HOMO-LUMO derivat senyawa kuinolin dengan pelarut	11
Gambar 4.3	Struktur geometri, contour HOMO-LUMO derivat senyawa kuinolin tanpa pelarut	12
Gambar 4.4	ESP dari inhibitor yang dioptimasi (A) dengan pelarut dan (B) tanpa pelarut	14
Gambar 4.5	Muatan muliken pada inhibitor (A) kuinolin-NO ₂ dan (B) kuinolin-OH	22
Gambar 4.6	Resonansi elektron π dalam inhibitor 6	23
Gambar 4.7	Struktur molekul Inhibitor 5-Fe (A) dan Inhibitor 6-Fe (B)	23



DAFTAR TABEL

Tabel 3.1	Struktur kerangka derivat kuinolin	7
Tabel 4.1	Nilai perhitungan parameter kimia kuantum dalam pelarut	15
Tabel 4.2	Nilai perhitungan parameter kimia kuantum tanpa pelarut	15
Tabel 4.3	Energi total dan momen dipol senyawa derivat kuinolin dalam pelarut dan tanpa pelarut	19
Tabel 4.4	Hasil perhitungan molekul derivat kuinolin yang berinteraksi dengan atom Fe dalam pelarut	20
Tabel 4.5	Hasil perhitungan parameter kereaktifan inhibitor dengan atom Fe tanpa pelarut	20
Tabel 4.6	Energi adsorpsi dan energi ikatan dari inhibitor yang dioptimasi tanpa pelarut	24
Tabel 4.7	Efisiensi inhibisi korosi (EI%) untuk senyawa derivat kuinolin yang dihitung menggunakan metode DFT-B3LYP/6-31G Tanpa pelarut	24
Tabel 4.8	Efisiensi inhibisi korosi (EI%) untuk senyawa derivat kuinolin yang dihitung menggunakan metode DFT-B3LYP/6-31G dalam Pelarut	24



DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1	Skema kerja	30
Lampiran 2	Contoh Perhitungan Mencari Nilai Energi ionisasi (I), Afinitas electron (A), dan Energi Gap (ΔE)	32
Lampiran 3	Contoh Perhitungan Mencari Nilai Hardness (η) dan Softness (σ)	33
Lampiran 4	Contoh Perhitungan Mencari Nilai Elektronegativitas (X), Elektropilisitas (ω), Nukleopilisitas (ϵ), dan Energi Total	34
Lampiran 5	Contoh Perhitungan Mencari Nilai Elektron Transfer Muatan(ΔN) , Energi Interaksi ($\Delta \psi$), dan Energi Back-Donasi (E_{b-d})	35
Lampiran 6	Contoh Perhitungan Mencari Nilai Energi Adsorpsi (E_{Ads}) dan Energi Binding ($E_{binding}$)	36
Lampiran 7	Contoh Perhitungan Mencari efisiensi inhibisi teori (EI %)	37



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																																	
Inh 1	Senyawa derivat kuinolin yang tersubstitusi -AlCl ₂	10																																	
Inh 2	Senyawa derivat kuinolin yang tersubstitusi -Cl	10																																	
Inh 3	Senyawa derivat kuinolin yang tersubstitusi -CN	10																																	
Inh 4	Senyawa derivat kuinolin yang tersubstitusi -COOH	10																																	
Inh 5	Senyawa derivat kuinolin yang tersubstitusi -NO ₂	10																																	
Inh 6	Senyawa derivat kuinolin yang tersubstitusi -OH	10																																	
<table border="0" style="width: 100%;"> <thead> <tr> <th style="text-align: left;">Lambang</th> <th style="text-align: left;">Nama</th> <th style="text-align: right;">Pemakaian pertama kali pada halaman</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>ΔE</td> <td>Bandgap</td> <td style="text-align: right;">8</td> </tr> <tr> <td>χ</td> <td>elektronegativitas</td> <td style="text-align: right;">8</td> </tr> <tr> <td>I</td> <td>potensial ionisasi</td> <td style="text-align: right;">8</td> </tr> <tr> <td>η</td> <td><i>Hardness</i></td> <td style="text-align: right;">8</td> </tr> <tr> <td>σ</td> <td><i>Softness</i></td> <td style="text-align: right;">8</td> </tr> <tr> <td>ω</td> <td>Elektrofilisitas</td> <td style="text-align: right;">8</td> </tr> <tr> <td>ϵ</td> <td>Nukleofilisitas</td> <td style="text-align: right;">8</td> </tr> <tr> <td>ΔN</td> <td>Transfer muatan</td> <td style="text-align: right;">8</td> </tr> <tr> <td>$\Delta \psi$</td> <td>Energi interaksi</td> <td style="text-align: right;">8</td> </tr> <tr> <td>ΔE_{b-d}</td> <td>Energi back-donasi</td> <td style="text-align: right;">8</td> </tr> </tbody> </table>			Lambang	Nama	Pemakaian pertama kali pada halaman	ΔE	Bandgap	8	χ	elektronegativitas	8	I	potensial ionisasi	8	η	<i>Hardness</i>	8	σ	<i>Softness</i>	8	ω	Elektrofilisitas	8	ϵ	Nukleofilisitas	8	ΔN	Transfer muatan	8	$\Delta \psi$	Energi interaksi	8	ΔE_{b-d}	Energi back-donasi	8
Lambang	Nama	Pemakaian pertama kali pada halaman																																	
ΔE	Bandgap	8																																	
χ	elektronegativitas	8																																	
I	potensial ionisasi	8																																	
η	<i>Hardness</i>	8																																	
σ	<i>Softness</i>	8																																	
ω	Elektrofilisitas	8																																	
ϵ	Nukleofilisitas	8																																	
ΔN	Transfer muatan	8																																	
$\Delta \psi$	Energi interaksi	8																																	
ΔE_{b-d}	Energi back-donasi	8																																	



BAB I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Korosi merupakan salah satu masalah serius dalam sektor industri karena menyebabkan kerugian di setiap tahunnya. Oleh karena itu banyak peneliti yang mengembangkan metode pencegahan korosi. Ada berbagai metode yang dapat dilakukan untuk melindungi besi dari korosi seperti *elektroplating*, perlindungan katodik atau anodik dan penambahan inhibitor korosi¹.

Sejauh ini, penambahan inhibitor merupakan salah satu cara yang paling efektif untuk mencegah korosi karena dalam penggunaannya memerlukan biaya relatif murah dan prosesnya sederhana². Inhibitor korosi dapat didefinisikan sebagai suatu zat yang apabila ditambahkan ke dalam lingkungan akan menurunkan serangan korosi lingkungan terhadap logam. Umumnya inhibitor korosi berasal dari senyawa-senyawa organik dan anorganik³.

Inhibitor organik terbagi menjadi dua macam yaitu alami (berasal dari ekstrak tumbuhan) dan buatan (sintetis)⁴. Senyawa organik yang dijadikan inhibitor harus mengandung minimal salah satu dari atom : N, O, P, S yang memiliki pasangan elektron bebas (PEB) atau elektron π . Unsur-unsur yang mengandung PEB berfungsi sebagai ligan yang akan membentuk senyawa kompleks dengan besi. Inhibitor organik yang baik memenuhi syarat yaitu murah, tidak beracun, dan biodegradable. Inhibitor yang demikian kemudian disebut sebagai *green inhibitor*⁵.

Kuinolin adalah senyawa alkaloid yang memiliki cincin heterosiklik nitrogen. Struktur kimia tersebut menjadikan kuinolin sebagai starting material penting dalam proses inhibisi oksidasi. Kuinolin memiliki aktivitas biologi yang dapat dimanfaatkan serta merupakan kerangka senyawa organik yang banyak dipelajari⁶. Sumber senyawa kuinolin di alam berasal dari akar, daun dan batang tumbuhan, salah satunya adalah dari tumbuhan kina (*cinchona sp.*) dan telah banyak dipelajari manfaatnya bagi kehidupan manusia⁷.

Kimia komputasi dapat menghasilkan gambaran struktur dalam berbagai model dan mempunyai aktifitas yang sama dengan penyamaan kuantum dari fisika klasik. Perkembangan kimia komputasi, terutama dalam penerapan perhitungan kimia kuantum yang berlangsung dengan pesat memungkinkan untuk dilakukannya pemodelan molekul dan eksplorasi sifat fisika kimia suatu struktur molekul. Metode kimia kuantum yang sering digunakan dalam perhitungan senyawa organik adalah metode *Density Functional Theory* (DFT) karena metode ini menghasilkan perhitungan yang akurat⁸.

Beberapa penelitian secara komputasi yang pernah dilakukan menggunakan inhibitor organik yaitu senyawa tiofen⁹, aminoazobenzen¹⁰, triazol¹¹ dan sebagainya. Berdasarkan uraian di atas maka penulis tertarik untuk melakukan penelitian secara komputasi menggunakan metode DFT tentang efisiensi senyawa senyawa derivat kuinolin sebagai inhibitor korosi besi (Fe).

1.2 Rumusan masalah

1. Bagaimana pengaruh pelarut terhadap kereaktifan inhibisi korosi besi senyawa derivat kuinolin?
2. Bagaimana nilai efisiensi inhibisi korosi besi senyawa derivat kuinolin?
3. Bagaimana struktur senyawa derivat kuinolin yang efisien sebagai inhibitor korosi besi?

1.3 Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk:

1. Menentukan pengaruh pelarut terhadap kereaktifan inhibisi korosi besi oleh senyawa derivat kuinolin
2. Menentukan nilai efisiensi inhibisi korosi besi oleh senyawa derivat kuinolin.
3. Mengetahui struktur molekul senyawa derivat kuinolin yang efisien sebagai inhibitor korosi besi.

1.4 Manfaat penelitian

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



BAB II. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Logam Fe

Unsur yang memiliki nomor atom 26 ini menjadi logam yang paling ekonomis karena mineralnya tersebar luas dalam jumlah yang banyak. Selain itu dengan sistem pengolahan yang tidak rumit dan mudah dimodifikasi menjadikan besi sebagai logam yang paling diminati. Besi (Fe) secara alami elemen yang melimpah di alam, Fe bersifat resisten korosif, padat dan memiliki titik lebur yang rendah¹².

Besi merupakan logam yang sangat mudah mengalami korosi. Besi tidak seperti logam lainnya seperti contoh aluminium (Al) yang dapat membentuk lapisan pelindung di atas permukaannya dari serangan lingkungan untuk mengubah kembali menjadi mineral alaminya¹³.

2.2 Korosi Besi

Korosi besi merupakan peristiwa alam yang terjadi pada logam besi dan dapat mengakibatkan kerusakan pada logam besi tersebut, penggunaan logam besi pada konstruksi dilingkungan air laut seperti logam paduan besi yang sering terkena air laut dan udara yang mengandung percikan-percikan (kabut) dari air laut akan mempercepat terjadinya korosi besi. Pada peristiwa korosi, besi mengalami oksidasi, sedangkan oksigen (udara) mengalami reduksi, karat umumnya berupa oksida atau karbonat berupa zat padat yang berwarna coklat merah¹⁴.

Pada korosi besi, bagian tertentu dari besi sebagai anoda, di mana besi mengalami oksidasi menurut reaksi berikut:



Elektron yang dibebaskan dalam oksidasi akan mengalir ke bagian lain untuk mereduksi oksigen sesuai dengan persamaan reaksi berikut:



Ion besi (II) yang terbentuk pada anode akan teroksidasi lebih lanjut membentuk besi (III) yang kemudian membentuk senyawa oksida terhidrasi $\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot x \text{H}_2\text{O}$ yang disebut karat¹⁵.

2.3 Inhibitor korosi

Inhibitor korosi adalah suatu zat kimia yang bila ditambahkan ke dalam suatu lingkungan, dapat menurunkan laju korosi yang terjadi pada lingkungan tersebut terhadap suatu logam di dalamnya. Menurut bahan dasar pembuatannya inhibitor korosi dapat dibedakan menjadi dua jenis yaitu inhibitor yang terbuat dari bahan

anorganik dan organik. Inhibitor korosi organik yaitu inhibitor korosi yang bisa berasal secara alami dari makhluk hidup atau disintesis¹⁶. Inhibitor organik selain dapat menghambat laju korosi juga memiliki sifat non-toksik, murah, mudah didapatkan, biaya sintesis relatif murah dan dapat diperbaharui. Inhibitor organik adalah senyawa organik yang mengandung unsur O, N, S, P dan ikatan π dalam cincin aromatis⁵.

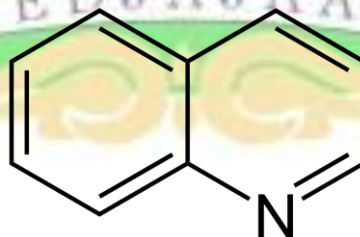
Inhibitor yang ditambahkan kedalam media korosif akan membentuk lapisan pelindung in situ karena reaksi antara larutan dengan permukaan logam. Walaupun banyak bahan inhibitor korosi sintetis yang baik untuk pencegahan korosi akan tetapi, banyak diantaranya yang bersifat toksik baik terhadap manusia maupun lingkungan. Inhibitor jenis ini dapat menyebabkan kerusakan terhadap sistem organ tubuh. Karena efek toksik tersebut, saat ini mulai digunakan bahan organik sebagai inhibitor korosi yang tidak berbahaya dan *biodegradable*¹⁴.

2.4 Kuinolin

Kuinolin merupakan kerangka senyawa organik yang banyak dipelajari. Senyawa dengan kerangka ini umum ditemukan dalam tubuh makhluk hidup yaitu pada tanaman kina dan telah banyak dipelajari manfaatnya bagi kehidupan manusia. 2(1H)-Kuinolon adalah salah satu derivat kuinolin yang mengikat atom oksigen pada C2. Senyawa ini analog dengan 4(1H)-kuinolon yang telah digunakan sebagai kerangka pembangun senyawa antibiotik komersil golongan fluorokuinolon seperti siprofloksasin dan levofloksasin¹⁷.

Derivat 2(1H)-kuinolon yang banyak dilaporkan adalah 4hidroksi-2(1H)-kuinolon. Senyawa-senyawa derivat 4-hidroksi-2(1H)-kuinolon diketahui menunjukkan aktivitas penting seperti anti oksidasi, anti jamur, anti bakteri, anti platelet, dan anti tumor. Selain menunjukkan aktivitas biologis, derivat 4-hidroksi-2(1H)kuinolon pun memiliki potensi untuk diaplikasikan dalam bidang optik dan elektronik, berhubungan dengan sifat optiknya yang khas¹⁷.

Struktur molekul kuinolin dapat dilihat pada Gambar 1.



Gambar 2.1 Struktur kerangka senyawa kuinolin

2.5 Kimia Komputasi

Kimia komputasi kini menjadi salah satu bidang dengan pertumbuhan tercepat dalam bidang kimia, walaupun terdapat ahli dalam bidang ini, namun penerapan teknik-tekniknya oleh kimiawan dalam percobaan semakin meningkat sejalan dengan berkembangnya kemampuan *software*. Metode komputasi molekul tidak selalu menggunakan teori ikatan kimia modern dan mekanika kuantum. Komputasi molekul dapat digunakan untuk molekul yang kompleks dengan menggunakan teori ikatan kimia modern dan mekanika kuantum¹³.

Hasil perhitungan komputasi dengan akurasi tinggi, pada umumnya digunakan pendekatan *ab initio* dan DFT (*Density Functional Theory*) yang merupakan teori struktur elektron, Pada metode komputasi, perhitungan spektrum elektronik dilakukan terhadap nilai-nilai transisi energi antar orbital yang dialami elektron dalam suatu senyawa¹³. 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^{18,19}.

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 DFT¹⁸.

2.6 Metode DFT

DFT didasarkan pada perhitungan kimia kuantum yang berfungsi untuk menghitung kerapatan elektron dalam menentukan posisi dan muatan inti pada suatu senyawa. Metode DFT juga didasarkan pada hubungan antara energi elektronik total dan kerapatan elektron^{20,14}. DFT dikembangkan untuk menentukan aktivitas molekul inhibitor. Aktivitas molekul inhibitor tersebut digunakan sebagai penggambaran inhibitor korosi pada logam. Oleh karena itu, DFT dapat dijadikan sebagai metode yang bagus untuk mempelajari struktur molekul dengan sifat inhibitor korosi. Metode DFT juga menggunakan simulasi dinamika molekul yang menjadikan cara efektif untuk menentukan struktur dan karakteristik ikatan antara inhibitor dan logam^{21,20,14}.

Metode DFT menggunakan perhitungan kimia kuantum dan teknik pemodelan molekuler yang telah dikembangkan untuk mengkorelasikan efisiensi inhibisi pada inhibitor dengan sifat molekul¹⁴. Perhitungan kimia kuantum dengan metode DFT diperlukan suatu fungsional yaitu B3LYP. B3LYP merupakan fungsional yang sering digunakan dalam penelitian yang hasilnya mendekati hasil eksperimen²². Oleh karena itu, DFT menjadi metode teoritis yang bagus dikarenakan hasil perhitungan nilai parameter kimia kuantum yang tepat dan mendasar untuk molekul yang diteliti^{21,23}.



BAB III. METODE PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat

Penelitian ini akan dilaksanakan mulai bulan Maret sampai Desember 2020 di Laboratorium Kimia Komputasi, Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Andalas.

3.2 Alat Dan Bahan

3.2.1 Alat

1. Seperangkat PC Komputer
2. Adapun perangkat lunak (software) yang digunakan untuk mengolah data Gaussian 16 W dan Gauss View 6.0

3.2.2 Molekul yang dianalisa

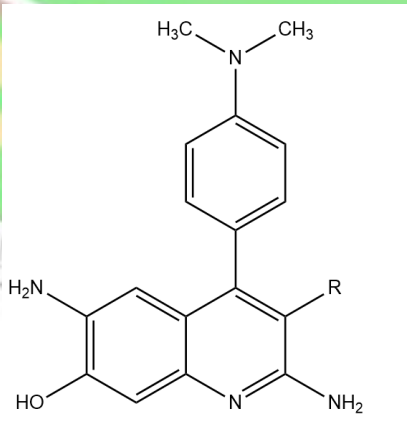
Molekul yang dianalisa untuk penelitian ini adalah senyawa organik derivat kuinolin, H₂O dan atom Fe.

3.3 Prosedur Penelitian

3.3.1 Penggambaran struktur molekul dan struktur elektronik

Molekul derivat kuinolin seperti yang terlihat pada Tabel 1 dan molekul kuinolin yang berikatan dengan atom Fe digambarkan menggunakan Gauss view 6.0

Tabel 3.1 Struktur Kerangka Derivat Quinolin dan Gugus R

Struktur Kerangka senyawa derivat kuinolin	Inhibitor	R
	1	AlCl ₂
	2	Cl
	3	CN
	4	COOH
	5	NO ₂
	6	OH

3.3.2 Optimasi Molekul Kuinolin

Senyawa derivat kuinolin dioptimasi menggunakan paket program Gaussian 16W metode perhitungan DFT dan basis set B3LYP/6-31G. Optimasi dilakukan dalam pelarut (air) dan tanpa pelarut. Output data berupa struktur geometri optimal, E_{HOMO} , E_{LUMO} , *Countour* HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*) dan LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*) serta ESP (*Electrostatic Potential*). Kemudian ditentukan nilai band gap (ΔE), elektronegativitas (χ), potensial kimia (μ), hardness (η), softness (σ), elektrofilitas (ω), nukleofilitas (ϵ)³. Nilai-nilai tersebut didapatkan berdasarkan persamaan berikut :

$$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}} \quad \dots\dots\dots (3)$$

$$\chi = \frac{-E_{\text{HOMO}} - E_{\text{LUMO}}}{2} \quad \dots\dots\dots (4)$$

$$\eta = \frac{E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}}{2} \quad \dots\dots\dots (5)$$

$$\sigma = \frac{1}{\eta} \quad \dots\dots\dots (6)$$

$$\omega = \frac{\chi^2}{2\eta} \quad \dots\dots\dots (7)$$

$$\epsilon = \frac{1}{\omega} \quad \dots\dots\dots (8)$$

$$\Delta N = \frac{X_{\text{fe}} - X_{\text{inh}}}{2(\eta_{\text{Fe}} + \eta_{\text{inh}})} \quad \dots\dots\dots (9)$$

$$\Delta E_{\text{Back Donasi}} = -\frac{\eta}{4} \quad \dots\dots\dots (10)$$

$$\text{Energi Interaksi } (\Delta\psi) = -\frac{(X_{\text{fe}} - X_{\text{inh}})^2}{4(\eta_{\text{Fe}} + \eta_{\text{inh}})} \quad \dots\dots\dots (11)$$

Berdasarkan parameter di atas kemudian dianalisa kestabilan inhibitornya.

3.3.3 Optimasi Molekul Kuinolin yang Berinteraksi dengan Fe

Molekul kuinolin yang berikatan dengan atom Fe kemudian dioptimasi menggunakan paket program Gaussian 16 W dengan metode perhitungan DFT dan basis set B3LYP/6-31G. Hasil optimasi berupa struktur geometri optimal, E_{HOMO} , E_{LUMO} , entalpi reaksi, energi total, *countour* HOMO dan LUMO.

Kemudian didapatkan nilai energi ikatan dan energi adsorpsi

Rumus energi adsorpsi dan energi ikatan :

$$\text{Energi adsorpsi} = E_{\text{ads}} = E_{\text{kompleks}} - (E_{\text{Fe}} - E_{\text{inh}}) \quad \dots\dots\dots (12)$$

$$\text{Energi ikatan} = - E_{\text{ads}} \quad \dots\dots\dots (13)$$

Berdasarkan parameter-parameter di atas kemudian dianalisa:

1. Mekanisme interaksi antara senyawa derivat kuinolin dengan atom Fe
2. Efisiensi inhibisi senyawa derivat kuinolin terhadap korosi besi
3. Struktur senyawa derivat kuinolin yang efisien sebagai inhibitor korosi besi

Nilai efisiensi korosi senyawa derivat kuinolin dapat diprediksi menggunakan persamaan berikut²⁴:

$$I_{\text{add}} \% = \frac{I_{\text{inh}} - I_{\text{x-inh}}}{I_{\text{inh}}} \times 100\% \quad (14)$$

$$E_{\text{Iadd}} \% = I_{\text{add}} \% \times E_{\text{Eksperimen}} \% \quad (15)$$

$$E_{\text{Iteori}} \% = E_{\text{Iadd}} \% + E_{\text{Eksperimen}} \% \quad (16)$$

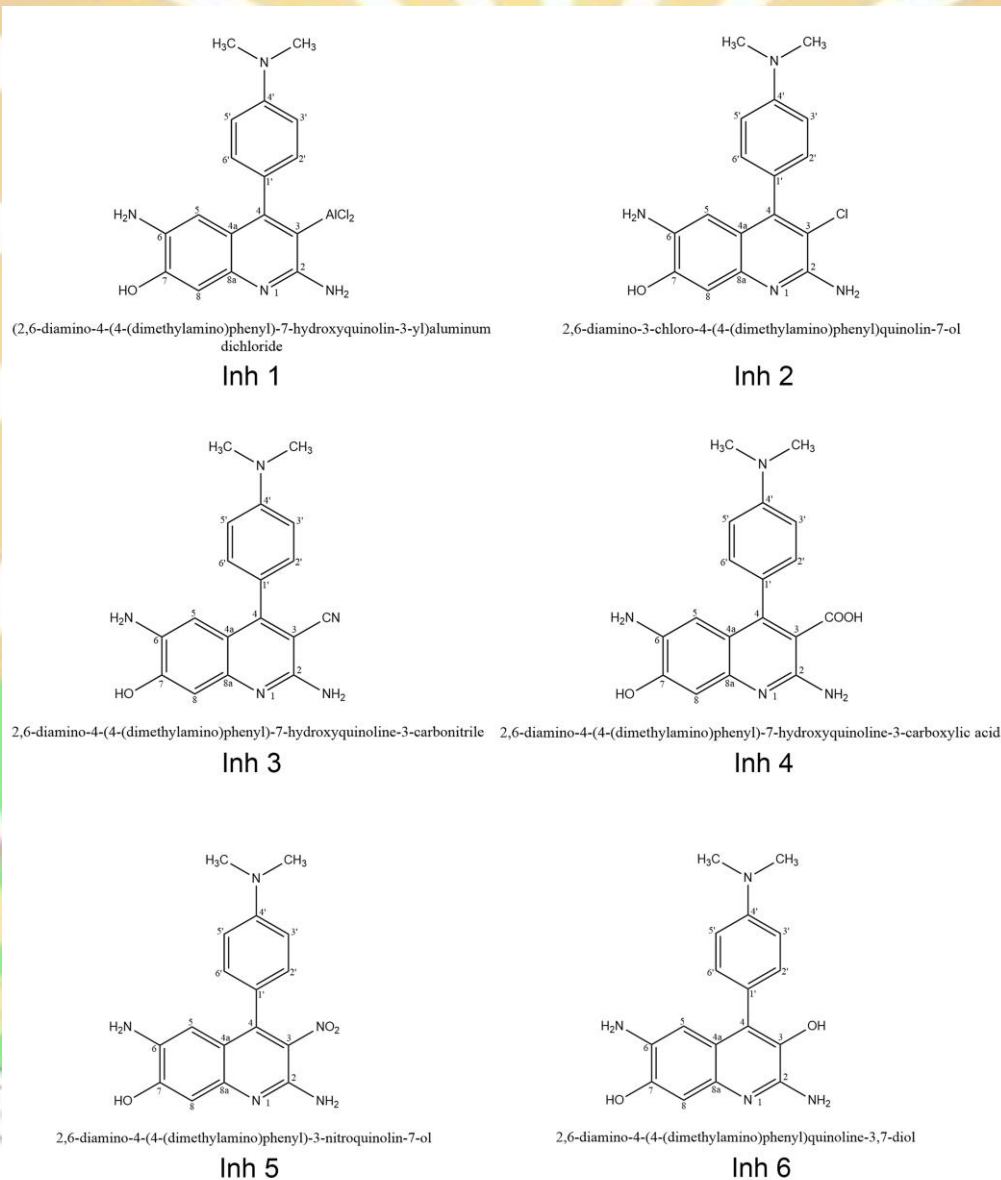
Keterangan:

- $I_{\text{add}} \%$: persentase potensial ionisasi dari senyawa derivat kuinolin
 I_{inh} : potensial ionisasi senyawa induk (kuinolin)
 $I_{\text{x-inh}}$: potensial ionisasi derivat inhibitor
 $E_{\text{Iadd}}\%$: presentase efisiensi inhibisi korosi senyawa inhibitor kuinolin
 $E_{\text{Eksperimen}} \%$: presentase efisiensi inhibisi korosi inhibitor hasil eksperimen
 $E_{\text{Iteori}} \%$: efisiensi inhibisi korosi inhibitor teoritis

BAB IV. HASIL DAN PEMBAHASAN

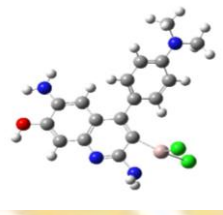
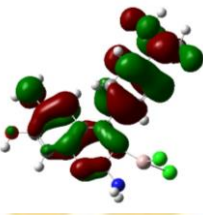
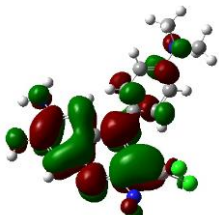
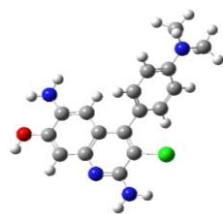
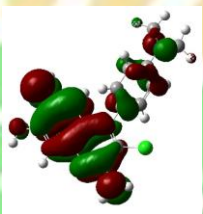
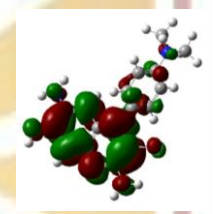
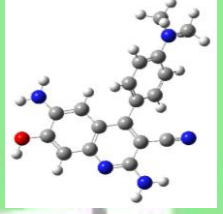
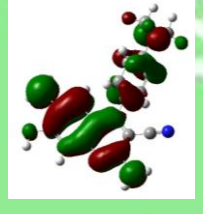

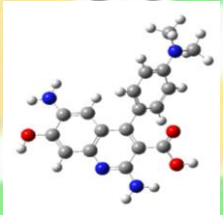
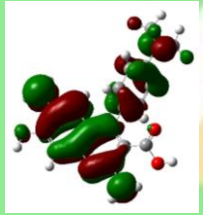
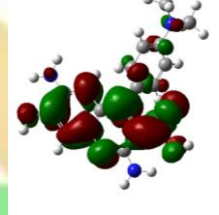
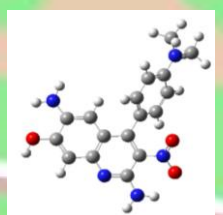
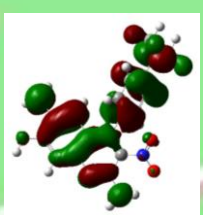
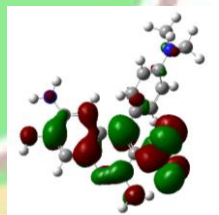
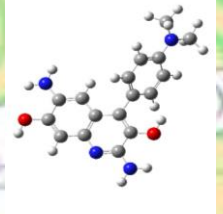
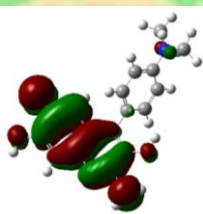
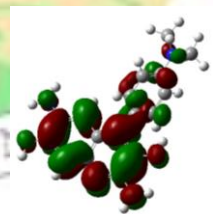
4.1 Struktur Molekul Inhibitor

Inhibitor korosi merupakan suatu senyawa yang dapat menghambat terjadinya korosi pada suatu logam, salah satu senyawa inhibitor korosi adalah kuinolin dan derivatnya. Senyawa derivat kuinolin dapat digunakan sebagai inhibitor karena memiliki pasangan elektron bebas dan elektron π dalam struktur molekulnya. Senyawa derivat kuinolin yang dianalisa dapat dilihat pada Gambar 4.1.

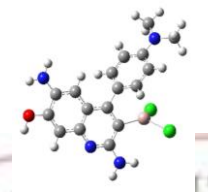
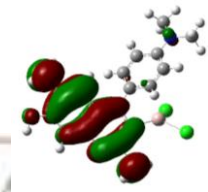
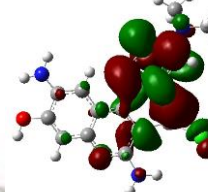
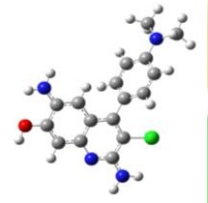
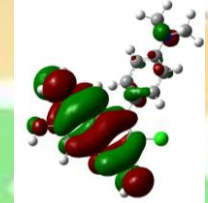
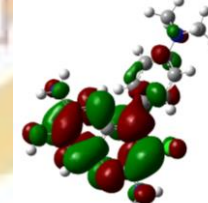
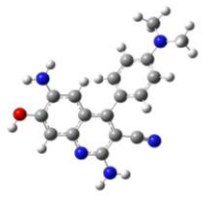
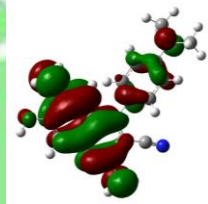
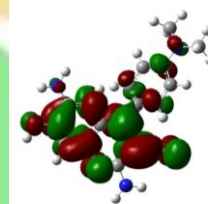
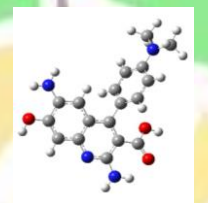
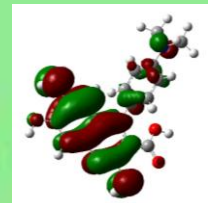
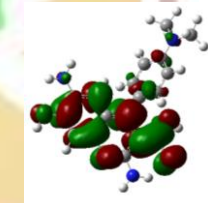
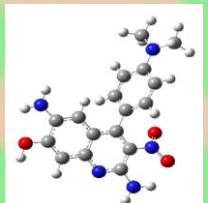
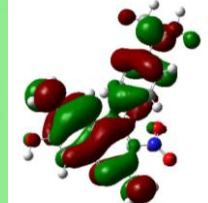
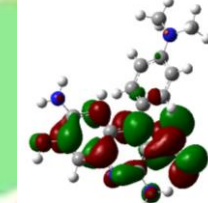
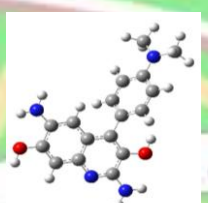
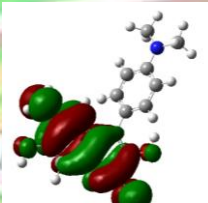
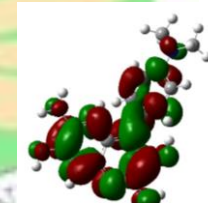


Gambar 4.1 Struktur molekul dari senyawa derivat kuinolin

4.2 Struktur Geometri Optimal, contour HOMO dan LUMO senyawa derivat kuinolin

Inh	Gugus R	Struktur Geometri	Contour HOMO	Contour LUMO
1.	-AlCl ₂			
2.	-Cl			
3.	-CN			
4.	-COOH			
5.	-NO ₂			
6.	-OH			

Gambar 4.2 Struktur geometri (warna atom: merah = oksigen, biru = nitrogen, putih, hidrogen, abu= carbon, hijau= khlor), countour HOMO-LUMO (hijau = orbital bonding, merah= orbital antibonding) senyawa derivat kuinolin dalam pelarut

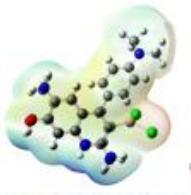
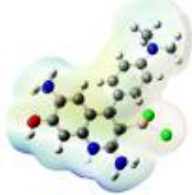
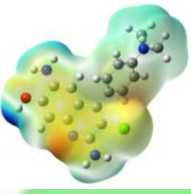
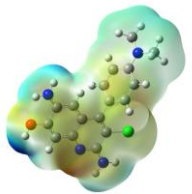

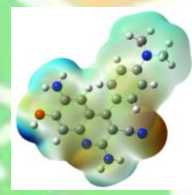

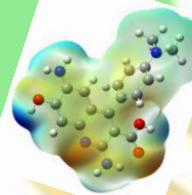
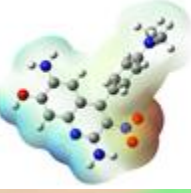
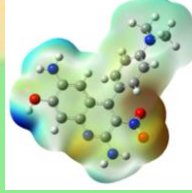
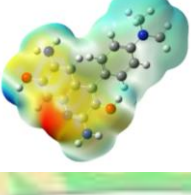

Inh	Gugus R	Struktur Geometri	Contour HOMO	Contour LUMO
1.	-AlCl ₂			
2.	-Cl			
3.	-CN			
4.	-COOH			
5.	-NO ₂			
6.	-OH			

Gambar 4.3 Struktur geometri (warna atom: merah = oksigen, biru = nitrogen, putih, hidrogen, abu= carbon, hijau= khlor), countour HOMO-LUMO(hijau = orbital bonding, merah= orbital antibonding) senyawa derivat kuinolin tanpa pelarut.

Senyawa derivat kuinolin dioptimasi dengan aplikasi Gaussian 16W dengan metode DFT dan basis set B3LYP/6-31G. Senyawa derivat kuinolin yang dioptimasi divariasikan dengan menggunakan pelarut dan tanpa menggunakan pelarut. Senyawa derivat kuinolin dibuat dengan memvariasikan gugus R pada derivat kuinolin. Gambar 4.1 4.2 dan 4.3 memperlihatkan struktur geometri optimal, contour HOMO dan LUMO. Contour HOMO dan LUMO ini dapat memprediksikan pusat penyerapan dan interaksi molekul inhibitor. Contour HOMO menunjukkan daerah yang bersifat donor elektron sedangkan contour LUMO menunjukkan daerah yang bersifat akseptor elektron²⁵. Pada Gambar terlihat daerah donor dan akseptor elektron terpusat pada kuinolin. Ikatan π , atom N dan gugus $-NH_2$ pada kuinolin serta gugus dimetil anilin berperan sebagai donor elektron sedangkan atom C, gugus $-OH$ dan R berperan sebagai akseptor elektron.

4.3 Electrostatic Potential (ESP)

Electrostatic Potential (ESP) yang diperlihatkan pada Gambar 4.4 menunjukkan daerah elektronegatif dan elektropositif. Semakin berwarna merah maka daerah tersebut semakin elektronegatif dan sebaliknya jika semakin berwarna biru maka daerah tersebut semakin elektropositif^{26,27}. Urutan nilai keelektronegatifan berdasarkan warna adalah merah > kuning > hijau > biru. Daerah yang elektronegatif terlihat pada gugus $-OH$, cincin aromatis kuinolin (terutama atom N pada cincin kuinolin) dan gugus penarik elektron (R). Sedangkan gugus dimetil anilin lebih bersifat elektropositif yang menunjukkan bahwa gugus tersebut berperan sebagai induksi positif. Daerah elektronegatif merupakan daerah yang akan berinteraksi dengan logam besi. Daerah elektronegatif dan elektropositif senyawa derivat kuinolin pada tanpa pelarut dan pelarut relatif berada di gugus yang sama.

Inhibitor	Gugus R	ESP fasa pelarut	ESP tanpa pelarut
1	-AlCl ₂		
2	-Cl		
3	-CN		
4	-COOH		
5	-NO ₂		
6	-OH		

Gambar 4.4 ESP senyawa derivat kuinolin dalam pelarut dan tanpa pelarut

4.4 Parameter Kereaktifan Inhibitor Senyawa Derivat Kuinolin

Parameter kereaktifan inhibitor ditentukan oleh nilai E_{HOMO} , E_{LUMO} , bandgap (ΔE), Energi Ionisasi (I), Afinitas elektron (A , elektronegativitas (χ), *hardness* (η), *softness* (σ), elektrofilitas (ω), dan nukleofilitas (ϵ). Nilai-nilai yang didapatkan dicantumkan dalam Tabel 4.1 dan Tabel 4.2 menunjukkan kereaktifan parameter kimia kuantum dari enam senyawa derivat kuinolin.

Tabel 4.1 Nilai perhitungan parameter kereaktifan inhibitor dengan pelarut

Inh	E_{HOMO}	E_{LUMO}	I	A	ΔE	χ	η	σ	ω	ϵ
1.	-5,08717	-1,70833	5,08717	1,70833	3,37884	3,39755	1,68942	0,59192	-0,84939	-1,17731
2.	-4,94784	-1,19975	4,94784	1,19975	3,74809	3,07379	1,87404	0,53361	-0,76845	-1,30132
3.	-4,9924	-1,7227	4,9924	1,7227	3,2697	3,35755	1,63485	0,61167	-0,83938	-1,19135
4.	-4,90676	-1,77064	4,90676	1,77064	3,13612	3,3387	1,56806	0,63773	-0,83467	-1,19808
5.	-5,03601	-2,91407	5,03601	2,91407	2,12194	3,97504	1,06097	0,94253	-0,99379	-1,00628
6.	-4,7932	-0,8663	4,7932	0,8663	3,9131	2,8297	1,9565	0,5111	-0,7074	-1,4136

Tabel 4.2 Nilai perhitungan parameter kereaktifan inhibitor tanpa pelarut

Inh	E_{HOMO}	E_{LUMO}	I	A	ΔE	χ	η	σ	ω	E
1.	-4,79492	-1,69962	4,79492	1,69962	3,08530	3,24727	1,54765	0,64614	0,38691	2,58456
2.	-4,64308	-0,80845	4,64308	0,80845	3,83463	2,72577	1,91731	0,52156	0,47932	2,08625
3.	-4,79302	-1,36928	4,79302	1,36928	3,42374	3,08115	1,71186	0,58415	0,42796	2,33662
4.	-4,62975	-1,48248	4,62975	1,48248	3,14727	3,05611	1,57363	0,63547	0,39340	2,54188
5.	-4,89642	-2,41664	4,89642	2,41664	2,47977	3,65653	1,2398	0,80652	0,30997	3,22609
6.	-4,34729	-0,42450	4,34729	0,42450	3,92280	2,38590	1,96139	0,50984	0,49034	2,03936

4.4.1 Energi HOMO dan LUMO

Energi HOMO menunjukkan kemampuan suatu molekul dalam mendonorkan elektron. Semakin besar energi HOMO maka akan semakin mudah suatu molekul untuk mendonorkan elektronnya. Sedangkan energi LUMO merupakan kemampuan suatu molekul dalam menerima elektron. Semakin kecil energi LUMO maka semakin mudah molekul tersebut dalam menerima elektron. Molekul inhibitor berfungsi menyumbangkan pasangan elektron bebasnya ke logam besi. Sehingga inhibitor yang lebih reaktif adalah yang memiliki energi HOMO lebih besar dan energi LUMO yang besar^{28,29}.

Berdasarkan Tabel 4.1 dapat dilihat bahwa senyawa yang memiliki E_{HOMO} paling besar adalah Inhibitor dengan gugus R -OH, ini menandakan bahwa kemampuan senyawa Inh 6 mampu mendonorkan elektron ke logam dengan lebih baik, sedangkan nilai E_{LUMO} yang paling besar terdapat pada senyawa inhibitor 6 dengan gugus R -OH, menunjukkan kemampuan senyawa inhibitor 6 lebih semakin mudah molekul tersebut dalam menerima elektron dari logam. Begitu pula untuk optimasi derivat kuinolin tanpa pelarut, nilai E_{HOMO} paling besar terdapat pada senyawa inhibitor 6 dan nilai E_{LUMO} paling kecil pada senyawa inhibitor 6. Berdasarkan nilai Energi HOMO maka urutan kereaktifan inhibitor tanpa pelarut adalah Inh 6 > Inh 4 > Inh 2 > Inh 3 > Inh 1 > Inh 5. Sedangkan dalam pelarut adalah Inh 6 > Inh 4 > Inh 2 > Inh 3 > Inh 5 > Inh 1. Dan untuk nilai Energi LUMO maka urutan kereaktifan inhibitor tanpa pelarut adalah Inh 6 > Inh 2 > Inh 3 > Inh 4 > Inh 1 > Inh 5. Sedangkan dalam pelarut adalah Inh 6 > Inh 1 > Inh 3 > Inh 4 > Inh 2 > Inh 5.

4.4.2 Energi Ionisasi (I)

Energi ionisasi menunjukkan energi yang dibutuhkan suatu molekul dalam melepaskan 1 mol elektron. Semakin kecil energi ionisasi semakin mudah elektron untuk dilepaskan Inhibitor berperan untuk melepaskan/memberikan elektron ke logam. Sehingga inhibitor yang lebih reaktif adalah dengan nilai energi ionisasi yang lebih kecil³⁰. Inhibitor yang paling reaktif tanpa pelarut maupun pelarut berdasarkan nilai energi ionisasi adalah inhibitor 6. Berdasarkan nilai Energi Ionisasi maka urutan kereaktifan inhibitor tanpa pelarut adalah Inh 6 > Inh 4 > Inh 2 > Inh 3 > Inh 1 > Inh 5. Sedangkan dalam pelarut adalah Inh 6 > Inh 4 > Inh 2 > Inh 3 > Inh 5 > Inh 1.

4.4.3 Afinitas elektron (A)

Afinitas elektron adalah energi yang dibutuhkan untuk menangkap 1 mol elektron. Semakin kecil afinitas elektron maka semakin mudah elektron ditangkap oleh suatu molekul. Suatu inhibitor logam berperan untuk melepaskan elektronnya ke atom logam, bukan menangkap elektron dari atom logam. Sehingga inhibitor yang reaktif adalah inhibitor yang lebih sulit untuk menangkap elektron dari atom logam^{29,31}. Jadi semakin besar nilai afinitas elektron maka semakin reaktif inhibitor tersebut. Berdasarkan data afinitas elektron maka inhibitor yang paling reaktif adalah inhibitor 5 dalam tanpa pelarut maupun pelarut. Berdasarkan nilai Afinitas elektron maka urutan

kereaktifan inhibitor tanpa pelarut adalah $\text{Inh 5} > \text{Inh 1} > \text{Inh 4} > \text{Inh 3} > \text{Inh 2} > \text{Inh 6}$. Sedangkan dalam pelarut adalah $\text{Inh 5} > \text{Inh 4} > \text{Inh 3} > \text{Inh 1} > \text{Inh 2} > \text{Inh 6}$.

4.4.4 Bandgap (ΔE)

Bandgap merupakan jarak dari pita HOMO ke LUMO. Semakin kecil bandgap maka semakin mudah elektron tereksitasi dan semakin mudah suatu molekul untuk bereaksi. Inhibitor yang paling reaktif adalah inhibitor dengan bandgap paling kecil^{29,30}. Berdasarkan nilai bandgap yang diperoleh dari persamaan 3, maka inhibitor yang paling reaktif adalah inhibitor 5 dalam tanpa pelarut maupun pelarut. Berdasarkan nilai bandgap maka urutan kereaktifan inhibitor tanpa pelarut adalah $\text{Inh 5} > \text{Inh 1} > \text{Inh 4} > \text{Inh 3} > \text{Inh 2} > \text{Inh 6}$. Sedangkan dalam pelarut adalah $\text{Inh 5} > \text{Inh 4} > \text{Inh 3} > \text{Inh 1} > \text{Inh 2} > \text{Inh 6}$.

4.4.5 Elektronegativitas (X)

Elektronegativitas menunjukkan kemampuan suatu atom, ion atau molekul dalam menarik elektron. Semakin besar elektronegativitas maka semakin mudah atom, ion atau molekul tersebut dalam menarik elektron. Inhibitor berperan menyumbangkan elektronnya pada logam bukan menarik elektron dari atom logam³¹. Sehingga inhibitor yang paling reaktif adalah inhibitor dengan nilai elektronegativitas yang lebih kecil. Berdasarkan nilai elektronegativitas yang diperoleh dari persamaan 4, maka inhibitor yang paling reaktif adalah inhibitor 6 dalam pelarut maupun tanpa pelarut. Berdasarkan nilai elektronegativitas maka urutan kereaktifan inhibitor tanpa pelarut adalah $\text{Inh 6} > \text{Inh 2} > \text{Inh 4} > \text{Inh 3} > \text{Inh 1} > \text{Inh 5}$. Sedangkan dalam pelarut adalah $\text{Inh 6} > \text{Inh 2} > \text{Inh 4} > \text{Inh 3} > \text{Inh 1} > \text{Inh 5}$.

4.4.6 Hardness (η)

Hardness merupakan parameter yang menunjukkan kekerasan suatu molekul untuk ditempa. Semakin besar hardness maka semakin sulit molekul tersebut ditempa/bereaksi. Inhibitor yang lebih reaktif adalah dengan nilai hardness yang lebih kecil³². Berdasarkan nilai hardness maka inhibitor yang paling reaktif adalah inhibitor 5 dalam tanpa pelarut maupun pelarut. Berdasarkan nilai hardness yang diperoleh dari persamaan 5, maka urutan kereaktifan inhibitor dalam tanpa pelarut adalah $\text{Inh 5} > \text{Inh 1} > \text{Inh 4} > \text{Inh 3} > \text{Inh 2} > \text{Inh 6}$. Sedangkan pada fasa pelarut adalah $\text{Inh 5} > \text{Inh 4} > \text{Inh 3} > \text{Inh 1} > \text{Inh 6} > \text{Inh 2}$.

4.4.7 Softness (σ)

Softness menunjukkan kemudahan suatu molekul untuk ditempa. Semakin besar nilai softness maka semakin mudah molekul tersebut bereaksi. Inhibitor yang reaktif adalah inhibitor dengan nilai softness yang lebih besar²⁸. Berdasarkan data yang diperoleh dari persamaan 6, maka inhibitor yang paling reaktif adalah inhibitor 5 baik dalam fasa pelarut maupun tanpa pelarut. Berdasarkan nilai softness maka urutan kereaktifan inhibitor tanpa pelarut adalah Inh 5 > Inh 1 > Inh 4 > Inh 3 > Inh 2 > Inh 6. Sedangkan dalam pelarut adalah Inh 5 > Inh 4 > Inh 3 > Inh 1 > Inh 2 > Inh 6.

4.4.8 Elektrofilisitas (ω)

Elektrofilisitas menunjukkan sifat suatu molekul yang suka bereaksi dengan molekul yang elektronegatif. Semakin besar nilai elektrofilisitas maka semakin mudah molekul tersebut berikatan dengan molekul yang elektronegatif, begitu juga sebaliknya. Inhibitor akan berikatan dengan logam besi yang bersifat elektropositif. Sehingga molekul inhibitor yang reaktif adalah inhibitor dengan nilai elektrofilisitas yang lebih kecil³². Berdasarkan data yang diperoleh dari persamaan 7, maka inhibitor yang paling reaktif adalah inhibitor 6 dan 5 dalam pelarut maupun tanpa pelarut. Berdasarkan nilai elektrofilisitas maka urutan kereaktifan inhibitor tanpa pelarut adalah Inh 6 > Inh 2 > Inh 3 > Inh 4 > Inh 1 > Inh 5. Sedangkan dalam pelarut adalah Inh 5 > Inh 1 > Inh 3 > Inh 4 > Inh 2 > Inh 6.

4.4.9 Nukleofilisitas (ϵ)

Nukleofilisitas menunjukkan sifat suatu atom, ion atau molekul yang suka bereaksi dengan atom, ion atau molekul yang elektropositif. Semakin besar nilai nukleofilisitas maka semakin mudah molekul tersebut berikatan dengan molekul yang elektropositif dan sebaliknya. Inhibitor akan berikatan dengan logam besi yang elektropositif, sehingga inhibitor yang lebih reaktif adalah inhibitor dengan nilai nukleofilisitas yang lebih besar^{32,21}. Berdasarkan data yang diperoleh dari persamaan 8, maka inhibitor yang paling reaktif adalah inhibitor 5 dalam tanpa pelarut maupun dalam fasa pelarut. Berdasarkan nilai nukleofilisitas maka urutan kereaktifan inhibitor tanpa pelarut adalah Inh 5 > Inh 1 > Inh 4 > Inh 3 > Inh 2 > Inh 6. Sedangkan dalam pelarut adalah Inh 5 > Inh 1 > Inh 3 > Inh 4 > Inh 2 > Inh 6.

Tabel 4.3 Energi total dan momen dipol senyawa derivat kuinolin dalam pelarut dan tanpa pelarut

inhibitor	Energi Total (kJ/mol)		Momen Dipol (Debye)	
	fasa pelarut	tanpa pelarut	fasa pelarut	tanpa pelarut
1	-5.552.922,39	-5.552.801,73	10,79753	7,70305
2	-3.707.777,39	-3.707.730,09	4,65660	3,30889
3	-2.743.295,93	-2.743.240,29	6,53714	4,86825
4	-2.996.093,56	-2.996.039,62	3,77893	4,58261
5	-3.037.875,17	-3.037.816,57	8,33727	5,77025
6	-2.698.603,59	-2.698.551,34	7,06062	5,26586

4.5 Energi Total

Energi total merupakan parameter yang menunjukkan kestabilan suatu molekul. Semakin positif energi total maka semakin stabil molekul tersebut. Molekul inhibitor yang reaktif adalah yang memiliki energi total lebih kecil (negatif)²⁸. Berdasarkan data Tabel 4.3 maka molekul inhibitor yang lebih reaktif adalah inhibitor 1 dalam pelarut maupun tanpa pelarut. Energi total adalah jumlah semua energi yang ada dalam molekul. Inhibitor 1 memiliki energi total yang lebih besar karena adanya dua buah ikatan antara atom Al dan Cl membentuk ikatan elektrostatik yang kuat. Akibatnya energi elektrostatiknya juga lebih besar dan energi total menjadi lebih besar dibandingkan inhibitor yang lain. Berdasarkan nilai energi total maka urutan kereaktifan inhibitor tanpa pelarut adalah Inh 1 >Inh 2>Inh 5>Inh 4> Inh 3> Inh 6. Sedangkan dalam pelarut adalah Inh 1 >Inh 2>Inh 5>Inh 4> Inh 3 Inh 6.

4.6 Momen Dipol

Momen dipol adalah pengkutuban senyawa inhibitor membentuk sudut polarisasinya. Semakin besar momen dipol suatu senyawa maka semakin terkutub senyawa tersebut²⁹. Semakin mudah pengkutuban molekul inhibitor maka akan semakin mudah interaksi antara molekul inhibitor dengan logam Fe. Senyawa inhibitor 1 merupakan senyawa yang memiliki momen dipol terbesar dalam pelarut maupun tanpa pelarut. Namun berdasarkan literatur energi total bukanlah parameter yang terlalu mempengaruhi kereaktifan inhibitor²⁸. Senyawa inh 1 memiliki nilai momen dipol yang lebih besar karena terdapat atom aluminium yang sangat elektropositif dan 2 atom Cl yang sangat elektronegatif, sehingga menghasilkan perbedaan keelektronegatifan yang sangat besar. Akibatnya momen dipol Inh 1 menjadi lebih besar. Berdasarkan nilai momen dipol maka urutan kereaktifan inhibitor tanpa pelarut adalah Inh 1 >Inh 5>Inh

6>Inh 3> Inh 4> Inh 2. Sedangkan dalam pelarut Inh 1 >Inh 5>Inh 6>Inh 3> Inh 2> Inh 4.

4.7 Parameter kereaktifan inhibitor dengan logam Fe

Parameter kereaktifan inhibitor dengan atom Fe ditentukan oleh nilai transfer muatan (ΔN), energi interaksi ($\Delta\psi$), Energi back donasi (ΔE_{b-d}), momen dipol (DM) seperti terlihat pada Tabel 4.4 dan 4.5.

Tabel 4.4 Hasil perhitungan parameter kereaktifan inhibitor dengan atom Fe dalam pelarut

Inhibitor	Gugus R	ΔN (eV)	$\Delta\psi$ (eV)	ΔE_{b-d} (eV)
1	-AlCl ₂	-0,93015	-1,51740	-0,42235
2	-Cl	-0,93756	-1,67982	-0,46851
3	-CN	-0,95432	-1,52438	-0,40871
4	-COOH	-0,98812	-1,56906	-0,39201
5	-NO ₂	-1,73292	-3,30312	-0,26524
6	-OH	-0,66823	-0,89103	-0,48912

Tabel 4.5 Hasil perhitungan parameter kereaktifan inhibitor dengan atom Fe tanpa pelarut

Inhibitor	Gugus R	ΔN	$\Delta\psi$	ΔE_{b-d}
1	-AlCl ₂	-0,929392	-1,461261	-0,096728
2	-Cl	-0,636635	-0,834423	-0,119832
3	-CN	-0,802409	-1,194943	-0,106992
4	-COOH	-0,859680	-1,269484	-0,098352
5	-NO ₂	-1,283921	-2,281418	-0,077493
6	-OH	-0,542194	-0,618957	-0,122587

4.7.1 Transfer muatan (ΔN)

Transfer muatan menunjukkan banyaknya elektron yang ditransfer dari inhibitor ke besi. Semakin besar nilai transfer muatan menandakan semakin banyak elektron yang ditransfer ke besi^{28,33}. Pada Tabel 4.4 dan 4.5 terlihat bahwa dalam pelarut inhibitor 2 memiliki nilai transfer muatan yang paling besar dan inhibitor 3 tanpa menggunakan pelarut. Berdasarkan nilai transfer muatan yang diperoleh dari persamaan 9, maka urutan kekuatan interaksi inhibitor dengan logam Fe tanpa pelarut adalah Inh 6 >Inh 2>Inh 3>Inh 4> Inh 1> Inh 4. Sedangkan dalam pelarut adalah Inh 6>Inh 1>Inh 2>Inh 3> Inh 4> Inh 5.

4.7.2 Energi interaksi ($\Delta\psi$)

Energi interaksi menunjukkan kuatnya ikatan antara senyawa inhibitor dengan logam.Fe. Semakin besar energi interaksi maka semakin kuat pula suatu senyawa

inhibitor berikatan dengan besi²¹. Berdasarkan Tabel 4.4 dan 4.5 di atas terlihat bahwa bahwa dalam fasa pelarut inhibitor 6 memiliki nilai energi interaksi yang paling besar tanpa pelarut dan dalam pelarut. Berdasarkan nilai energi interaksi yang diperoleh dari persamaan 11, maka urutan kekuatan interaksi inhibitor dengan logam Fe tanpa pelarut adalah $\text{Inh 6} > \text{Inh 2} > \text{Inh 3} > \text{Inh 4} > \text{Inh 1} > \text{Inh 5}$. Sedangkan dalam pelarut adalah $\text{Inh 6} > \text{Inh 1} > \text{Inh 3} > \text{Inh 4} > \text{Inh 2} > \text{Inh 5}$.

4.7.3 Energi back-donasi (ΔE_{b-d})

Energi back-donasi merupakan energi yang menunjukkan transfer elektron kembali dari besi ke senyawa inhibitor. Semakin kecil nilai energi back-donasi maka semakin sedikit elektron yang ditransfer dari besi ke inhibitor. Semakin kecil transfer elektron dari Fe ke inhibitor maka semakin stabil ikatan antara inhibitor dengan logam besi^{32,9}. Senyawa yang memiliki nilai energi back-donasi terendah baik untuk optimasi menggunakan pelarut ataupun tanpa menggunakan pelarut adalah Inhibitor 1. Berdasarkan nilai energi back-donasi yang diperoleh dari persamaan 10, maka urutan kekuatan interaksi inhibitor dengan logam Fe tanpa pelarut adalah $\text{Inh 6} > \text{Inh 2} > \text{Inh 3} > \text{Inh 4} > \text{Inh 1} > \text{Inh 5}$. Sedangkan dalam pelarut adalah $\text{Inh 6} > \text{Inh 2} > \text{Inh 1} > \text{Inh 3} > \text{Inh 4} > \text{Inh 5}$.

4.8 Analisa kereaktifan inhibitor dalam tanpa pelarut dan fasa pelarut

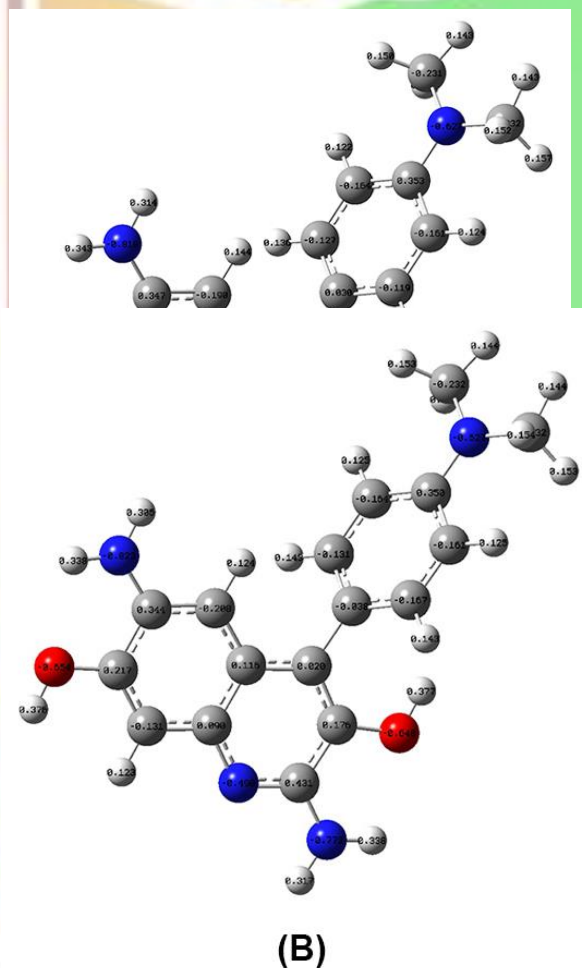
Berdasarkan nilai parameter kereaktifan dan interaksi inhibitor diketahui bahwa inhibitor cenderung lebih reaktif dalam fasa pelarut dibandingkan dalam tanpa pelarut. Hal ini karena dalam fasa pelarut, adanya pelarut yang menyebabkan terjadinya proses pemisahan muatan positif dan negatif sehingga momen dipol menjadi lebih besar. Berdasarkan data urutan kereaktifan inhibitor adalah $\text{Inh 6} > \text{Inh 5} > \text{Inh 3} > \text{Inh 4} > \text{Inh 2} > \text{Inh 1}$ tanpa pelarut maupun dalam fasa pelarut.

Berdasarkan kekuatan gugus R sebagai penarik elektron maka gugus Cl dan NO_2 yang sangat elektronegatif harusnya memiliki sifat tarikan elektron yang lebih kuat dibandingkan gugus OH. Tetapi adanya gugus -Cl dan NO_2 menghasilkan kereaktifan inhibitor yang lebih kecil dibandingkan adanya gugus OH karena gugus -Cl dan $-\text{NO}_2$ memiliki ikatan hidrogen yang lebih kuat dengan atom hidrogen tetangganya sehingga menyebabkan kereaktifan Inh 5 dan Inh 2 menjadi berkurang. Gugus AlCl_2 memiliki 2 atom Cl yang sangat elektronegatif, tetapi atom C terikat pada atom Al yang lebih elektropositif sehingga kekuatan tarikan gugus AlCl_2 menjadi lemah dibandingkan Cl, NO_2 maupun OH. Gugus -CN merupakan gugus penarik elektron yang lebih lemah dibandingkan gugus yang lainnya. Sedangkan gugus -COOH, meskipun memiliki

gugus C=O dan OH yang bersifat penarik elektron yang kuat, tetapi atom C pada cincin kuinolin terikat pada atom C pada gugus COOH sehingga tarikan elektronnya juga lebih lemah dibanding -OH, Cl dan NO₂. Selain itu gugus COOH memiliki luas permukaan dan volume yang lebih besar sehingga interaksi atom oksigen dengan atom hidrogen dan interaksi atom hidrogen pada COOH dengan atom nitrogen tetangga akan lebih kuat sehingga membentuk ikatan hidrogen yang lebih kuat juga.

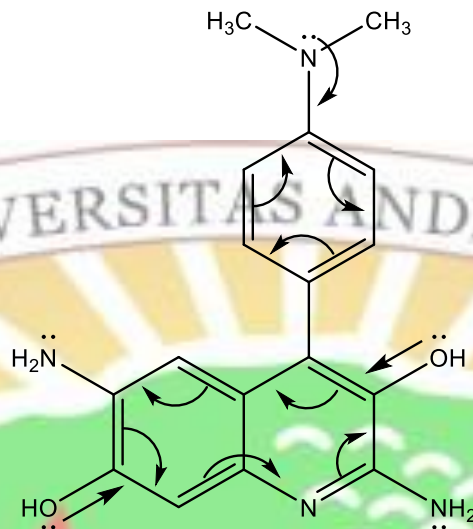
4.9 Mekanisme resonansi elektron π pada senyawa derivat kuinolin

Data muatan atom pada senyawa Inh 5 dan 6 diperlihatkan pada Gambar 4.5



Gambar 4.5 muatan muliken pada (A) inhibitor 5 dan (B) Inhibitor 6

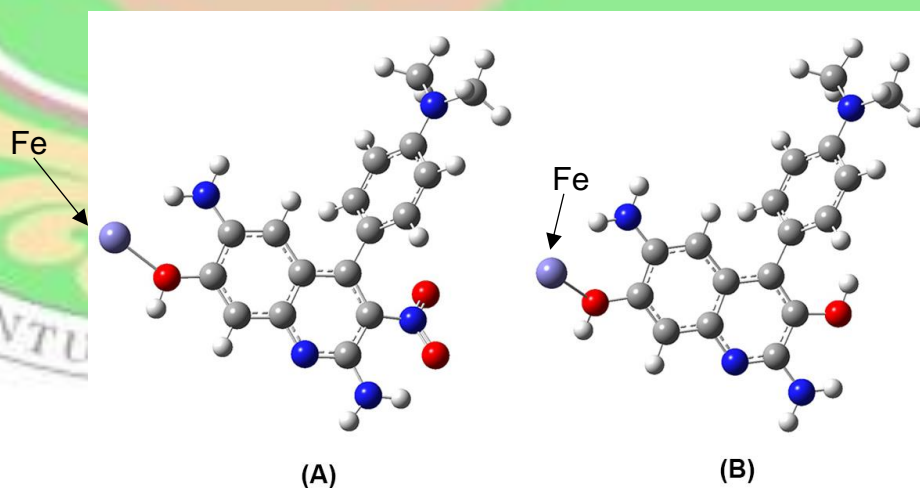
Berdasarkan data muatan dan ESP maka dapat diperkirakan resonansi elektron dalam molekul kuinolin, seperti pada Gambar 4.6



Gambar 4.6 Resonansi elektron π dalam inhibitor 6

4.10 Analisa kekuatan ikatan antara Inhibitor 5 dan Inhibitor 6

Berdasarkan nilai parameter kekuatan ikatan antara inhibitor, diketahui bahwa energi ikatan yang memiliki nilai positif menunjukkan bahwa reaksi terjadi secara endotermis. Ikatan antara inhibitor dan logam akan semakin kuat seiring dengan besarnya nilai energi adsorpsi dan energi ikatan, sehingga menghasilkan nilai efisiensi inhibisi yang juga semakin besar. Pada Tabel 4.6 dapat dilihat nilai energi adsorpsi dan energi ikatan yang sama pada ikatan inhibitor 6 + Fe dengan Inh 5 + Fe. Struktur molekul interaksi antara inhibitor dengan logam Fe diperlihatkan pada Gambar 4.7



Gambar 4.7 Struktur molekul Inhibitor 5-Fe (A) dan Inhibitor 6-Fe (B)

Tabel 4.6 Energi adsorpsi dan energi ikatan dari inhibitor yang dioptimasi tanpa pelarut

inhibitor	Gugus R	Energi Adsorpsi (kJ/mol) $\times 10^4$	Energi Ikatan (kJ/mol) $\times 10^6$	Panjang ikatan (r) C-Fe (Å)
5	-NO ₂	-1,90419	1,90419	2,023
6	-OH	-1,90629	1,90629	2,003

Berdasarkan Gambar 4.7 dan Tabel 4.6 maka kekuatan ikatan antara inhibitor 5 dengan Fe dan inhibitor 6 dengan Fe cenderung sama. Tapi berdasarkan panjang ikatan ikatan antara atom oksigen dan Fe pada inhibitor 6 lebih pendek dibandingkan antara atom oksigen dan Fe pada inhibitor 5 yang menunjukkan bahwa Inh 6 + Fe memiliki interaksi yang lebih kuat dibanding Inh 5 + Fe.

4.11 Nilai Efisiensi Inhibisi Korosi Senyawa derivat Kuinolin

Tabel 4.7 Efisiensi inhibisi korosi (EI%) untuk senyawa derivat kuinolin yang dihitung menggunakan metode DFT-B3LYP/6-31G tanpa pelarut

Inhibitor	$I_{add}\%$	$EI_{add}\%$	$EI_{teori}\%$
1	4,24185	0,04129	97,39129
2	6,86121	0,06679	97,41679
3	3,85366	0,03751	97,38751
4	7,12881	0,06939	97,41939
5	1,78551	0,01738	97,36738
6	12,79467	0,12455	97,47455

Tabel 4.8 Efisiensi inhibisi korosi (EI%) untuk senyawa derivat kuinolin yang dihitung menggunakan metode DFT-B3LYP/6-31G dalam pelarut

Inhibitor	$I_{add}\%$	$EI_{add}\%$	$EI_{teori}\%$
1	-2,04709	-0,01992	97,3308
2	0,74782	0,00728	97,3572
3	-0,28324	-0,00275	97,3472
4	1,57187	-0,01530	97,3653
5	-1,02083	-0,00993	97,3400
6	3,84985	0,03747	97,3874

Efisiensi inhibisi korosi ($EI_{teori}\%$) senyawa derivat kuinolin dihitung menggunakan metode DFT-B3LYP/6-31G yang dapat dilihat pada Tabel 4.7 dan 4.8 Hasil perhitungan menunjukkan bahwa penambahan substituen penarik elektron (OH) pada

senyawa derivat kuinolin. Sesuai prediksi pola E_{HOMO} , elektronegativitas, *global hardness*, *global softness*, elektrofilitas, transfer elektron yang telah dibahas dan dijelaskan sebelumnya, maka senyawa Inh 6 memiliki $E_{\text{teori}}\%$ paling tinggi dibandingkan senyawa lain sebesar 97,47455% pada tanpa pelarut dan 97,3874% dalam pelarut . Nilai ini ditentukan berdasarkan data EI eksperimen senyawa derivat kuinolin sebesar 97,35%³⁴.



BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan parameter E_{HOMO} , E_{LUMO} , Energi Ionisasi (I), Afinitas elektron (A), band gap (ΔE), elektronegativity (χ), potensial kimia (μ), hardness (η), softness (σ), elektrofilitas (ω), nukleofilitas (ϵ), transfer muatan (ΔN), energi interaksi ($\Delta\psi$), Energi back donasi ($\Delta E_{\text{b-d}}$), momen dipol (DM) dan energi total maka dapat diambil kesimpulan dengan menggunakan pelarut menyebabkan kereaktifan inhibisi korosi besi senyawa derivat kuinolin menjadi meningkat. Adanya substitusi gugus OH pada kuinolin menunjukkan Inh 6 lebih bagus sebagai inhibitor korosi dibandingkan dengan molekul Inhibitor lain baik pada tanpa pelarut maupun pada fasa pelarut. Ditandai dengan nilai efisiensi inhibisi korosi yang tertinggi juga terletak pada derivat kuinolin-OH yaitu sebesar 97,47455% pada tanpa pelarut dan 97,3874% pada fasa pelarut. Maka didapatkan senyawa derivat kuinolin yang paling baik sebagai inhibitor korosi besi adalah Inh 6 dengan nama 2,6-diamino-4-(4-(dimethylamino)phenyl)quinoline-3,7-diol.

5.2 Saran

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan disarankan :

1. Penelitian selanjutnya dapat dilakukan pada senyawa derivat kuinolin dengan fasa dan variasi substituen yang berbeda.
2. Melakukan optimasi Fe dengan material studio sehingga bisa membandingkan hasil yang telah didapatkan.



DAFTAR PUSTAKA

- 1 Belghiti, M. E.; Echihi, S.; Dafali, A.; Karzazi, Y.; Bakasse, M.; Elalaoui-Elabdallaoui, .; Olasunkanmi, L. O.; Ebenso, E. E.; Tabyaoui, M. 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 Gusti, D. R.; Emriadi; Alif, A.; Efdi, M. Corrosion Inhibition of Ethanol Extract of Cassava (Manihot Esculenta) Leaves on Mild Steel in Sulfuric Acid. *International Journal of ChemTech Research* 2017, *10* (2), 163–171.
- 3 Marni, L. G.; Emriadi; Syukri; Imelda. Study on Corrosion Inhibition of Khellin and Visnagin Compounds in Iron Using DFT (Density Functional Theory) Method. *Jurnal Litbang Industri* 2019, *9* (2), 111–118.
- 4 Mourya, P.; Banerjee, S.; Singh, M. M. Corrosion Inhibition of Mild Steel in Acidic Solution by Tagetes Erecta (Marigold Flower) Extract as a Green Inhibitor. *Corrosion Science* 2014, *85*, 352–363.
- 5 Raja, P. B.; Sethuraman, M. G. Natural Products as Corrosion Inhibitor for Metals in Corrosive Media - A Review. *Material Letter* 2008, *62* (1), 113–116.
- 6 Marella, A.; Tanwar, O. P.; Saha, R.; Ali, M. R.; Srivastava, S.; Akhter, M.; Shaquiquzaman, M.; Alam, M. M. Quinoline: A Versatile Heterocyclic. *Saudi Pharmaceutical Journal* 2013, *21* (1), 1–12.
- 7 Pratama, M. R. F. Studi Docking Molekular Senyawa Turunan Kuinolin Terhadap Reseptor Estrogen- α . *Jurnal Surya Medika* 2016, *2* (1), 1–7.
- 8 Azizah, R. N.; Alam, G.; Rifai, Y.; Lethe, C. Aplikasi Komputasi Kimia Dalam Analisis Hubungan Kuantitatif Hubungan Struktur-Aktivitas(HKSA) Dari Senyawa Aktif Antibakteri Analog N-Alkil IMIDAZOL Pada Bakteri (Staphilococcus Aureus) Dengan Parameter Elektronik Metode AUSTIN MODEL (AM 1. *Journal of Chemical Information and Modeling*. 2013, *5* (1), 1–11.
- 9 Usman, B.; Maarof, H.; Abdallah, H. H.; Jamaludin, R.; Al-Fakih, A. M.; Aziz, M. Corrosion Inhibition Efficiency of Thiophene Derivatives on Mild Steel: A QSAR Model. *International Journal of Electrochemica Science* 2014, *9* (4), 1678–1689.
- 10 Al-Doori, H. H.; Shihab, M. S. Study of Some [N-Substituted] p-Aminoazobenzene as Corrosion Inhibitors for Mild-Steel in 1M H₂SO₄. *Journal of Al-Nahrain University Science* 2014, *17* (3), 59–68.
- 11 Wang, H. L.; Fan, H. B.; Zheng, J. S. Corrosion Inhibition of Mild Steel in Hydrochloric Acid Solution by a Mercapto-Triazole Compound. *Material Chemical Physical*. 2003, *77* (3), 655–661.
- 12 Szyczewski, P.; Frankowski, M.; Ziola-Frankowska, A.; Siepak, J.; Szyczewski, T.; Piotrowski, P. Preparation of Samples for Determining Heavy Metals Fe and Mn in Vegetable Oils: A Comparison of Different Extraction Methods. *Polish Journal of Environmental Study*. 2015, *24* (6), 2647–2654.

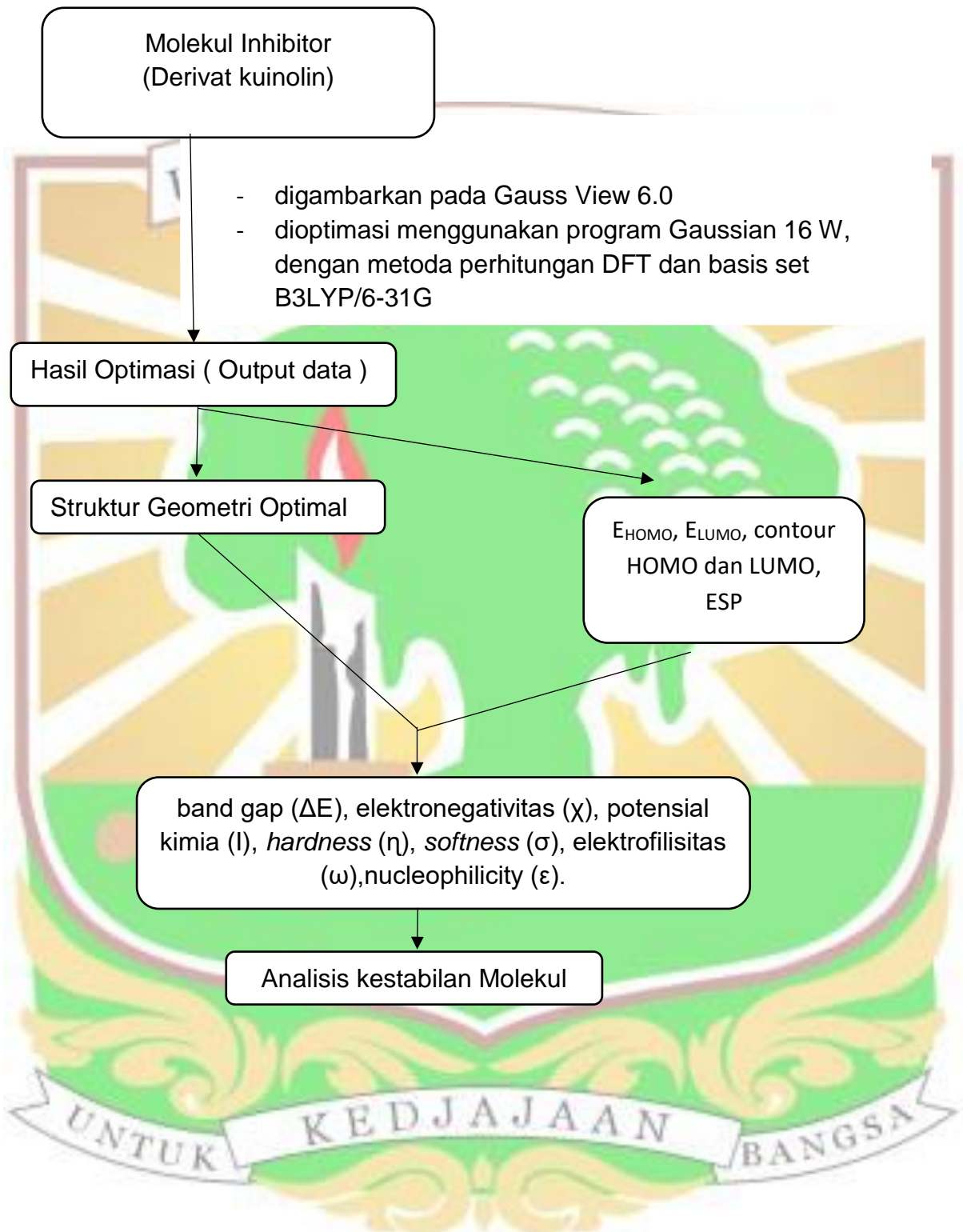
- 13 Tahir, I.; Mada, U. G.; Pranowo, H. D.; Mada, U. G.; Wijaya, K.; Mada, U. G. Analisis Sifat Fotosensitivitas Senyawa Antibakteri Turunan Fluorokuinolon Berdasarkan Data Transisi Elektronik Dan Selisih Energi Orbital Homo-Lumo. *Conference on Pharmaceutical and Biomedical Analysis School of Pharmacy*. 2005, No. September 2005, 15–16.
- 14 Gece, G. The Use of Quantum Chemical Methods in Corrosion Inhibitor Studies. *Corrosion Science*. 2008, 50 (11), 2981–2992.
- 15 Hsissou, R.; About, S.; Seghiri, R.; Rehioui, M.; Berisha, A.; Erramli, H.; Assouag, M.; Elharfi, A. Evaluation of Corrosion Inhibition Performance of Phosphorus Polymer for Carbon Steel in [1 M] HCl: Computational Studies (DFT, MC and MD Simulations). *Journal of Materials Research and Technology*. 2020, 9 (3), 2691–2703.
- 16 Gusti, D. R.; Emriadi; Alif, A.; Efdi, M. Surface Characteristics on Mild Steel Using Aqueous Extract of Cassava (*Manihot Esculenta*) Leaves as a Corrosion Inhibitor. *Der Pharma Chemica* 2016, 8 (17), 113–118.
- 17 Wang, X.; Xie, X.; Cai, Y.; Yang, X.; Li, J.; Li, Y.; Chen, W.; He, M. Design, Synthesis and Antibacterial Evaluation of Some New 2-Phenyl-Quinoline-4-Carboxylic Acid Derivatives. *Molecules* 2016, 21 (3).
- 18 Pranowo, H. D. *Pengantar Kimia Komputasi*; CV. Lubuk Agung: Bandung, 2011.
- 19 Han, E. S.; goleman, daniel; boyatzis, Richard; Mckee, A. Computational Chemistry and Molecular Modeling. *Journal of Chemical Information and Modeling* 2019, 53 (9), 1689–1699.
- 20 Liu, S. Bin. Conceptual Density Functional Theory and Some Recent Developments. *Wuli Huaxue Xuebao/ Acta Physico - Chimica Sinica* 2009, 25 (3), 590–600.
- 21 Mi, H.; Xiao, G.; Chen, X. Theoretical Evaluation of Corrosion Inhibition Performance of Three Antipyrine Compounds. *Computational and Theoretical Chemistry* 2015, 7–14.
- 22 Hadisaputra, S.; Purwoko, A. A.; Wajdi, F.; Sumarlan, I.; Hamdiani, S. Theoretical Study of the Substituent Effect on Corrosion Inhibition Performance of Benzimidazole and Its Derivatives. *International Journal of Corrosion Scale Inhibitor* 2019, 8 (3), 673–688.
- 23 Zarrouk, A.; Hammouti, B.; Dafali, A.; Bouachrine, M.; Zarrok, H.; Boukhris, S.; Al-Deyab, S. S. A Theoretical Study on the Inhibition Efficiencies of Some Quinoxalines as Corrosion Inhibitors of Copper in Nitric Acid. *Journal of Saudi Chemical Soc.* 2014, 18 (5), 450–455.
- 24 Obayes, H. R.; Alwan, G. H.; Hameed, A.; Alobaidy, M. J.; Al-amiery, A. A.; Kadhum, A. A. H. Quantum Chemical Assessment of Benzimidazole Derivatives as Corrosion Inhibitors. 2014, 8 (21), 2–9.
- 25 Fu, J. J.; Li, S. N.; Wang, Y.; Cao, L. H.; Lu, L. De. Computational and Electrochemical Studies of Some Amino Acid Compounds as Corrosion Inhibitors for Mild Steel in Hydrochloric Acid Solution. *Journal of Material Science* 2010, 45 (22), 6255–6265.

- 26 Erramli, H.; Assouag, M.; Elharfi, A. Evaluation of Corrosion Inhibition Performance of Phosphorus Polymer for Carbon Steel in [1 M] HCl: Computational Studies (DFT , MC and MD Simulations). *Integrative Medicine Research* 2020, 9 (3), 2691–2703.
- 27 Ozoemena, C. Computational Modeling And Statistical Analysis On The Corrosion Inhibition Of Aluminium In Nitric Acid Solution By Ethanolic Extract Of Citrus Sinesis Seed. 2019, 7 (1), 25–46.
- 28 Wazzan, N. A.; Mahgoub, F. M. DFT Calculations for Corrosion Inhibition of Ferrous Alloys by Pyrazolopyrimidine Derivatives. *Open Journal Physical Chemistry*. 2014, 04 (01), 6–14.
- 29 Radhi, A. H.; Du, E. A. B.; Khazaal, F. A.; Abbas, Z. M.; Aljelawi, O. H.; Hamadan, S. D.; Almashhadani, H. A.; Kadhim, M. M. HOMO-LUMO Energies and Geometrical Structures Effecton Corrosion Inhibition for Organic Compounds Predict by DFT and PM3 Methods. *NeuroQuantology* 2020, 18 (1), 37–45.
- 30 Ebenso, E. E.; Isabirye, D. A.; Eddy, N. O. Adsorption and Quantum Chemical Studies on the Inhibition Potentials of Some Thiosemicarbazides for the Corrosion of Mild Steel in Acidic Medium. *International Journal of Molecular Science* 2010, 11 (6), 2473–2498.
- 31 Obi-Egbedi; Ojo, N. D. Computational Studies of the Corrosion Inhibition Potentials of Some Derivatives of 1H-Imidazo [4, 5-F] [1, 10] Phenanthroline. *Journal of Science Research* 2015, 14 (February 2017), 50–56.
- 32 Guo, L.; Safi, Z. S.; Kaya, S.; Shi, W.; Tüzün, B.; Altunay, N.; Kaya, C. Anticorrosive Effects of Some Thiophene Derivatives against the Corrosion of Iron: A Computational Study. *Frontiers in Chemistry* 2018, 6 (155), 1–12.
- 33 Geerlings, P.; De Proft, F. Chemical Reactivity as Described by Quantum Chemical Methods. *International Journal of Molecular Sciences*. 2002, 3 (4), 276–309.
- 34 Erdoğan, Ş.; Safi, Z. S.; Kaya, S.; Işın, D. Ö.; Guo, L.; Kaya, C. A Computational Study on Corrosion Inhibition Performances of Novel Quinoline Derivatives against the Corrosion of Iron. *Journal of Molecular Structure*. 2017, 751–761.



Lampiran 1. Skema Kerja

1. Optimasi Molekul Inhibitor



2. Optimasi Interaksi Inhibitor dengan Atom Fe



Lampiran 2. Contoh Perhitungan Mencari Nilai Energi ionisasi (I), Afinitas electron (A), dan Energi Gap (ΔE).

Diketahui

Gugus R : AlCl_2

E_{HOMO} : -4,79492

E_{LUMO} : -1,69962

a. Energi Ionisasi (I)

$$\begin{aligned} I &= -E_{\text{HOMO}} = -(-4,79492) \\ &= 4,79492 \end{aligned}$$

b. Afinitas Elektron (A)

$$\begin{aligned} I &= -E_{\text{LUMO}} = -(-1,69962) \\ &= 1,69962 \end{aligned}$$

c. Energi Bandgap (ΔE)

$$\begin{aligned} I &= E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}} = -1,69962 - (-4,79492) \\ &= 3,09529 \end{aligned}$$



Lampiran 3. Contoh Perhitungan Mencari Nilai Hardness (η) dan Softness (σ)

Diketahui

Gugus R : AlCl_2

E_{HOMO} : -4,79492

E_{LUMO} : -1,69962

a. Hardness (η)

$$\eta = \frac{E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}}{2} = \frac{-1,69962 - (-4,79492)}{2} = 1,54765$$

b. Softness (σ)

$$\sigma = \frac{1}{\eta} = \frac{1}{1,54765} = 0,64614$$



Lampiran 4. Contoh Perhitungan Mencari Nilai Elektronegativitas (X), Elektropilisitas (ω), Nukleopilisitas (ϵ), dan Energi Total.

Diketahui

Gugus R : AlCl_2

E_{HOMO} : -4,79492

E_{LUMO} : -1,69962

Hardness (η) : 1,54765

Energi total(HF) : -2114,972445 Hartree

a. Elektronegativitas (X)

$$X = \frac{-E_{\text{HOMO}} - E_{\text{LUMO}}}{2} = \frac{-(-1,69962) - (-4,79492)}{2} = 3,24727$$

b. Elektropilisitas (ω)

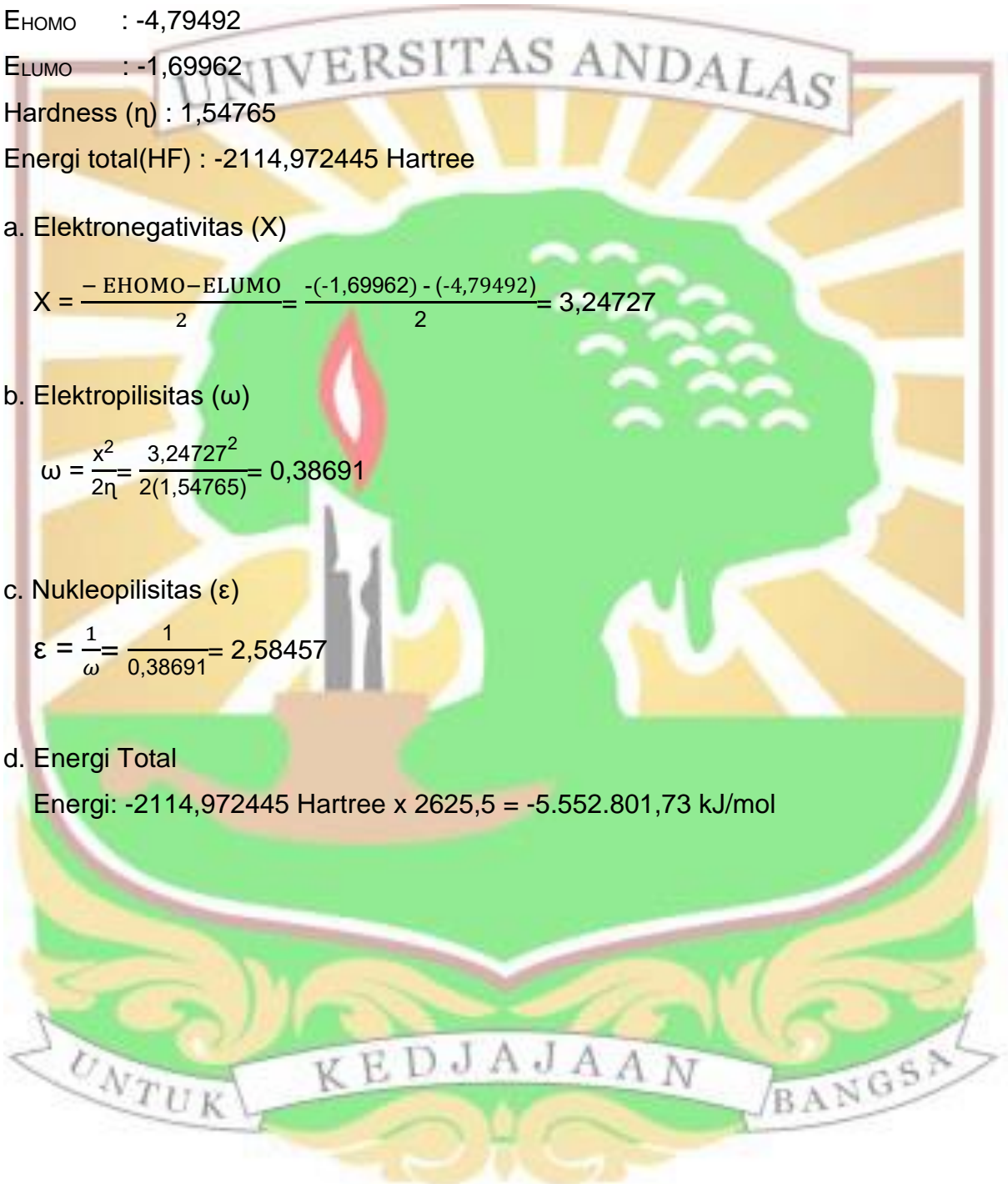
$$\omega = \frac{x^2}{2\eta} = \frac{3,24727^2}{2(1,54765)} = 0,38691$$

c. Nukleopilisitas (ϵ)

$$\epsilon = \frac{1}{\omega} = \frac{1}{0,38691} = 2,58457$$

d. Energi Total

Energi: -2114,972445 Hartree x 2625,5 = -5.552.801,73 kJ/mol



Lampiran 5. Contoh Perhitungan Mencari Nilai Elektron Transfer Muatan(ΔN) , Energi Interaksi ($\Delta\psi$), dan Energi Back-Donasi (E_{b-d}).

Diketahui

Nilai optimasi atom Fe

$$E_{HOMO} = -0,20181$$

$$E_{LUMO} = -0,12389$$

$$X_{Fe} = 0,16285$$

$$\eta_{Fe} = 0,03896$$

Gugus R : $AlCl_2$

Hardness (η) : 1,54765

Energi total(HF) : -2114,972445 Hartree

a. Transfer Muatan (ΔN)

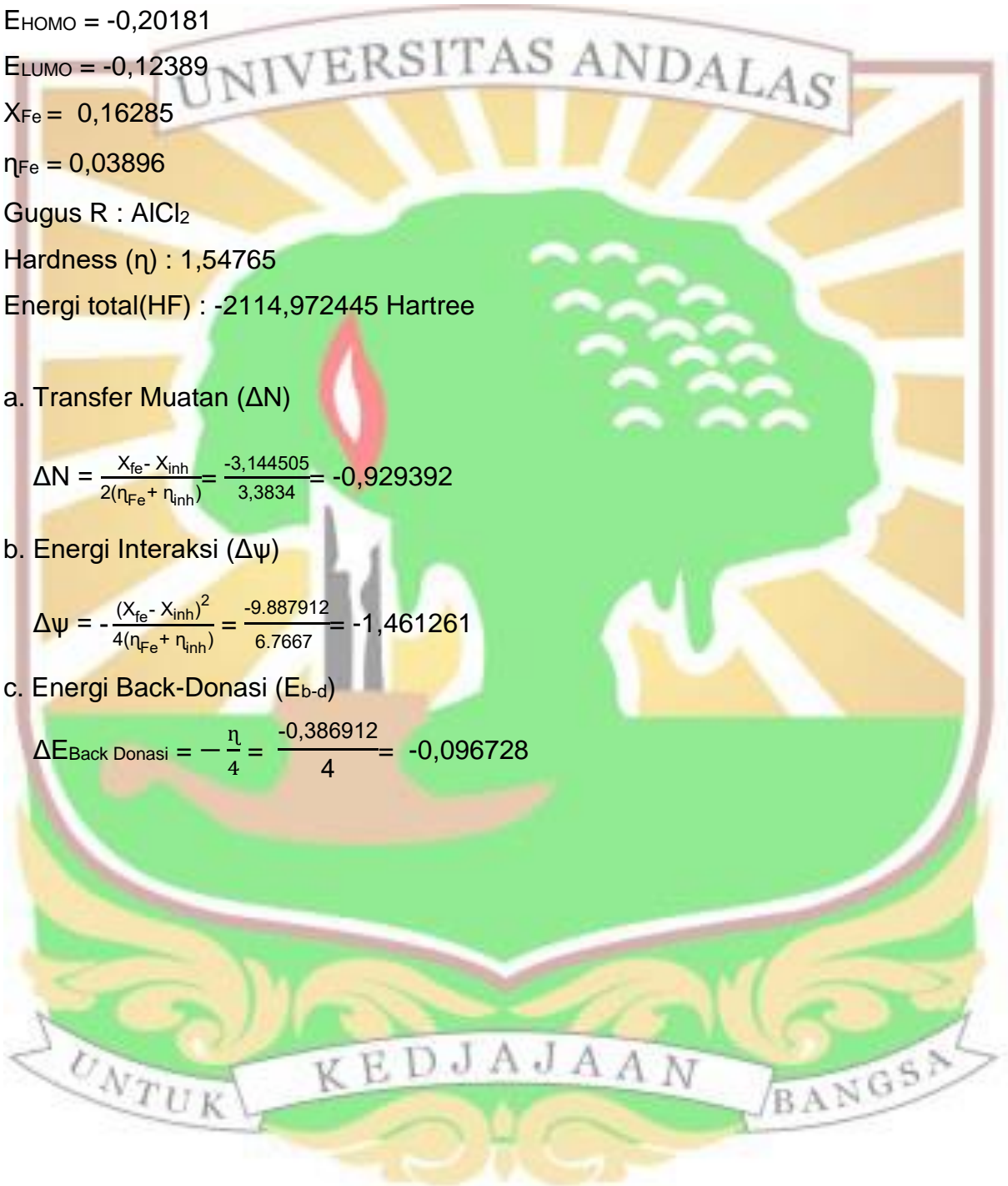
$$\Delta N = \frac{X_{Fe} - X_{inh}}{2(\eta_{Fe} + \eta_{inh})} = \frac{-3,144505}{3,3834} = -0,929392$$

b. Energi Interaksi ($\Delta\psi$)

$$\Delta\psi = -\frac{(X_{Fe} - X_{inh})^2}{4(\eta_{Fe} + \eta_{inh})} = \frac{-9,887912}{6,7667} = -1,461261$$

c. Energi Back-Donasi (E_{b-d})

$$\Delta E_{Back\ Donasi} = -\frac{\eta}{4} = \frac{-0,386912}{4} = -0,096728$$



Lampiran 6. Contoh Perhitungan Mencari Nilai Energi Adsorpsi (E_{Ads}) dan Energi Binding ($E_{binding}$).

a. Energi Adsorpsi

- Inh 5

$$E_{ads} = E_{complex} - (E_{Fe} + E_{inh}) : -2420,44493 \text{ HF} - [-1157,055241 + (-1256,136998)] \text{ HF} \\ = -7,252691 \text{ HF} \times 2625,5 = -19.041,940221 \text{ kJ/mol}$$

- Inh 6

$$E_{ads} = E_{complex} - (E_{Fe} + E_{inh}) : -2291,2323 \text{ HF} - [-1027,834596 + (-1256,136998)] \text{ HF} \\ = -7,260706 \text{ HF} \times 2625,5 = -19.062,983603 \text{ kJ/mol}$$

b. Energi Binding

$$E_{binding} = -E_{ads}$$

- Inh 5

$$E_{binding} = 19.041,940221 \text{ kJ/mol}$$

- Inh 6

$$E_{binding} = 19.062,983603 \text{ kJ/mol}$$



Lampiran 7. Contoh Perhitungan Mencari Efisiensi Inhibisi Teori (EI %)

Diketahui

Gugus R : AlCl_2

I_{inh} : 4,98512

$I_{x\text{-inh}}$: 4,79492

$E_{\text{eksperimen}} \%$: 97,35 %

$$I_{\text{add}} \% = \frac{I_{\text{inh}} - I_{x\text{-inh}}}{I_{\text{inh}}} \times 100\% = \frac{4,98512 - 4,79492}{4,98512} \times 100\% = 4,24185\%$$

$$E_{\text{add}} \% = I_{\text{add}} \% \times E_{\text{eksperimen}} \% = 4,24185\% \times 97,35\% = 0,04129\%$$

$$I_{\text{teori}} \% = E_{\text{add}} \% + E_{\text{eksperimen}} \% = 0,04129\% + 97,35\% = 97,39129\%$$

