

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

**SKRIPSI SARJANA KIMIA**

**OLEH:**

**RAESTA SIDIQ**

**BP: 1610412060**



**Pembimbing :**

**Imelda, M.Si**

**Prof. Dr. Emriadi**

**JURUSAN S1 KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS ANDALAS  
PADANG  
2021**

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

**OLEH:**

**RAESTA SIDIQ**

**BP: 1610412060**



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

**JURUSAN S1 KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS ANDALAS  
PADANG  
2021**

## 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 ( $\Delta E$ ), elektronegativitas ( $\chi$ ), potensial kimia ( $\mu$ ), hardness ( $\eta$ ), softness ( $\sigma$ ), elektrofilitas ( $\omega$ ), nukleofilitas ( $\epsilon$ ), Energi ionisasi (I), Afinitas electron (A), Jumlah transfer elektron ( $\Delta N$ ),  $\Delta E$  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 ( $\Delta E$ ), electronegativity ( $\chi$ ), chemical potential ( $\mu$ ), hardness ( $\eta$ ), softness ( $\sigma$ ), electrophilicity ( $\omega$ ), nucleophilicity ( $\epsilon$ ), ionization energy (I), electron affinity (A), number transfer electron ( $\Delta N$ ),  $\Delta E$  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