

BAB I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Salah satu masalah serius di sektor industri adalah korosi logam atau paduan, yang menyebabkan kerugian properti yang sangat besar¹. Kerusakan logam akibat korosi juga menyebabkan kerusakan lingkungan yang menjadi perhatian utama dalam industri logam, terutama di media asam. karena itu, ada permintaan yang tinggi untuk mengembangkan metode pencegahan korosi atau mengurangi laju korosi².

Pendekatan yang paling ramah lingkungan dan hemat biaya untuk mencegah logam terhadap korosi adalah dengan menggunakan inhibitor organik³. Efisiensi penghambatan suatu inhibitor dalam lingkungan tertentu sangat dipengaruhi oleh struktur kimia dan interaksinya dengan permukaan logam. Banyak senyawa organik heterosiklik yang mengandung nitrogen, belerang, oksigen, fosfor dan elektron π dikenal sebagai penghambat korosi baja yang efektif, karena mereka terserap pada permukaan logam dan membentuk film penghalang yang efektif⁴. Secara umum diasumsikan bahwa molekul organik dapat diadsorpsi pada permukaan logam melalui beberapa gugus aktif seperti heteroatom yang mengandung atom O, N, S, P dan memiliki ikatan rangkap dua atau tiga cincin aromatik⁵. Studi sebelumnya menunjukkan bahwa sebagian besar inhibitor organik mengurangi laju korosi melalui adsorpsi pada permukaan logam dan kinerja penghambatan dengan keberadaan atom-atom yang mempunyai pasangan elektron bebas mengikuti urutan $O < N < S < P$ ^{6,7}.

Kimia komputasi merupakan cabang ilmu kimia yang menggunakan hasil kimia teori yang diterjemahkan ke dalam program komputer untuk menghitung sifat-sifat molekul dan perubahannya. Kimia komputasi juga dapat melakukan simulasi terhadap sistem-sistem besar seperti molekul protein dan kristal cair. Sifat molekul yang dapat dihitung yaitu struktur atom, energi, perubahan energi, muatan, momen dipol, kereaktifan, frekuensi getaran, dan besaran spektroskopi. Metode perhitungan dalam kimia komputasi yang paling banyak digunakan adalah metode *Density Functional Theory* (DFT) karena hasil penelitiannya yang akurat mendekati hasil eksperimen⁸.

Beberapa penelitian secara komputasi tentang inhibisi korosi besi telah banyak dilakukan diantaranya yaitu efisiensi inhibisi korosi dan adsorpsi N-dimetil-4 - (((1-metil-2-fenil-2,3-dihidro-1H-pyrazol-4-il) imino) metil) -N-alkylbenzenaminium bromide pada

baja karbon dalam asam klorida⁹, dan studi kimia eksperimental dan komputasi dari dua senyawa imidazol sebagai inhibitor korosi untuk baja ringan dalam larutan HCl².

Salah satu senyawa organik yang berpotensi menjadi inhibitor korosi adalah morin. Morin adalah senyawa organik yang banyak terdapat pada tumbuhan seperti kulit dan daun nangka, daun jambu biji dll. Senyawa morin merupakan senyawa golongan flavonoid dan polifenol yang mengandung elektron π berkonyugasi cincin aromatik dan atom oksigen. Pada farmakologis morin dilaporkan memiliki sifat antioksidan, inhibitor oksidasi dan anti inflamasi¹⁰. Berdasarkan strukturnya, morin memiliki atom O dan elektron π berkonyugasi sehingga potensial digunakan sebagai inhibitor korosi.

Berdasarkan uraian tersebut maka penulis tertarik untuk melakukan penelitian secara komputasi menggunakan metode DFT tentang efisiensi senyawa morin dan turunannya sebagai inhibitor korosi besi (Fe).

1.2 Perumusan Masalah

1. Bagaimana struktur morin dan turunannya yang terbaik sebagai inhibitor korosi besi
2. Bagaimana pengaruh pelarut terhadap efisiensi inhibisi korosi besi
3. Bagaimana interaksi antara inhibitor dengan atom Fe

1.3 Tujuan Penelitian

1. Menentukan struktur morin dan turunannya yang terbaik sebagai inhibitor korosi besi
2. Menentukan pengaruh pelarut terhadap efisiensi inhibisi korosi besi
3. Menentukan interaksi antara inhibitor dengan atom Fe

1.4 Manfaat penelitian

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

