

# BAB I PENDAHULUAN

## 1.1 Latar Belakang

Dalam kehidupan sehari-hari sudah lazim terdengar bahasa karat atau korosi yang hampir dianggap sebagai musuh umum masyarakat. Karat adalah sebutan untuk korosi pada besi, padahal korosi merupakan gejala *destruktif* yang rentan terjadi pada hampir semua logam. Besi adalah logam yang berasal dari bijih besi yang banyak digunakan untuk kehidupan manusia sehari-hari, karena kelimpahan besi di kulit bumi cukup besar, pengolahannya relatif mudah dan murah, serta mudah dimodifikasi. Contoh dari penggunaan besi diantaranya pagar besi, badan sepeda, tangga besi, paku, palu, dan sebagainya. Namun, besi mempunyai kelemahan, salah satunya mudah mengalami korosi, karena mudah mengalami oksidasi. Korosi ini dapat terjadi karena pada umumnya logam selalu berhubungan dengan udara terbuka yang kelembaban dan kandungan polutannya dapat mempengaruhi korosif pada logam.

Korosi merupakan reaksi redoks antara suatu logam dengan berbagai zat di lingkungannya dan menghasilkan senyawa-senyawa yang tidak dikehendaki sehingga dapat menurunkan kualitas suatu logam[1]. Fenomena korosi ini sangat membebani peradaban manusia karena mengakibatkan kerugian besar secara materil. Dengan berkembangnya ilmu pengetahuan dan teknologi, manusia berupaya mengurangi kerugian akibat korosi dengan usaha pengendalian kerusakan sehingga dapat memperlambat atau mencegah terjadinya korosi pada logam.

Penanggulangan korosi membutuhkan biaya besar, diantaranya untuk perawatan dan perbaikan jika terjadi kerusakan peralatan sehingga teknologi penanggulangan korosi perlu dipilih secara cermat. Korosi pada permukaan bagian luar logam dapat ditanggulangi dengan pelapisan memakai cat. Sedangkan pada permukaan bagian dalam logam dapat dikendalikan dengan cara menambahkan inhibitor korosi. Inhibitor korosi adalah suatu zat kimia yang ditambahkan kedalam lingkungan yang korosif, walaupun dalam jumlah yang sedikit (orde ppm atau milimolar) dapat menurunkan atau memperlambat laju korosi logam, sehingga relatif mudah dan murah. Salah satu mekanisme kerja inhibitor korosi adalah melalui pembentukan lapisan tipis dari inhibitor yang teradsorpsi pada permukaan logam[2].

Inhibitor yang dapat digunakan untuk pengendalian korosi logam ada dua yaitu anorganik dan organik. Beberapa senyawa anorganik yang digunakan sebagai inhibitor korosi adalah fosfat, kromat, dikromat, silikat, borat, tungstat, molibdat, dan arsenat. Inhibitor organik adalah senyawa

heterosiklik yang mengandung atom nitrogen, sulfur, atau oksigen yang mempunyai elektron bebas serta cincin aromatik dalam strukturnya adalah pusat adsorpsi utama seperti imidazol dan turunannya[3]. Inhibitor korosi logam yang paling efektif adalah senyawa-senyawa organik. Hal ini disebabkan karena senyawa organik memiliki pasangan elektron bebas pada rantai karbonnya atau pada sistem rantai aromatik yang dapat berikatan dengan muatan positif logam, sehingga terjadi adsorpsi antar permukaan logam dengan inhibitor secara ikatan kovalen koordinat (adsorpsi kimia) atau secara elektrostatik (adsorpsi fisika). Molekul organik akan melekat pada permukaan logam secara teratur membentuk *khelat* pembatas yang dapat mencegah permukaan logam mengalami kontak dengan medium yang bersifat korosif[4].

Beberapa penelitian tentang senyawa yang dapat dijadikan sebagai inhibitor korosi telah dilakukan, salah satunya kajian terhadap sifat anti korosi turunan senyawa imidazol yang dilakukan oleh Yulita Anggraeni Setiawati (2012). Yulita Anggraeni Setiawati menunjukkan bahwa salah satu senyawa turunan imidazol yaitu senyawa 2-(4-hidroksi-3-etoksifenil)-1H-fenantro[9,10D]imidazol dan senyawa 2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10D]imidazol berpotensi sebagai senyawa inhibitor korosi. Namun belum diketahui sifat-sifat elektronik yang menunjang pada parameter inhibitor korosi. Sehingga perlu dikaji lebih lanjut menggunakan perhitungan kimia komputasi. Imidazol adalah senyawa organik aromatik *heterosiklik*, memiliki pasangan elektron bebas pada atom nitrogen yang dapat mengadsorpsi pada permukaan logam, bersifat *hidrofobik*, mengandung gugus fungsi elektronegatif, dan senyawa *heterosiklik* yang sangat planar[5].

Kajian kimia komputasi dapat membantu mengkaji sifat anti korosi senyawa organik. Beberapa kajian teoritis kimia kuantum telah dilakukan dan diperoleh hasil yang cepat dan akurat sesuai dengan hasil eksperimen. Hengliang Wang et. al (2006) mengkaji lima senyawa organik turunan bipirazol yaitu 4-{bis[(3,5-dimetil-1H-pirazol-1-yl)metil]-amino}fenol (1), N1, N1-{bis[(3,5-dimetil-1H-pirazol-1-yl)metil]}-N4, N4-dimetil-1,4-benzendiamin (2), N,N-bis[3,5-dimetil-1H-pirazol-1-yl)metil]anilin (3), 4-[bis(3,5-dimetil pirazol-1-yl-metil)-amino]butan-1-ol (4) dan etil-4-[bis(3,5-dimetil-1H-pirazol-1-yl-metil)aminobenzoat] (5) dihitung secara komputasi menggunakan teori fungsional kerapatan (DFT) dengan B3LYP/6-31G(d). Dari hasil perhitungan HOMO, celah energi ( $\Delta E$ ) dan fraksi transfer elektron ( $\Delta N$ ) yang mendekati hasil eksperimen adalah senyawa kedua, yaitu N1, N1-{bis[(3,5-dimetil-1H-pirazol-1-yl)metil]}-N4, N4-dimetil-1,4-benzendiamin. Dan hasil perhitungan fungsi Fukui, serangan nukleofilik dan

elektrofilik pada senyawa kedua berpusat di cincin fenil, pada atom N dan atom O, sehingga cincin fenilnya lebih reaktif daripada senyawa yang lain[3]. Hadi Behzadi (2015) menghitung secara komputasi untuk menyelidiki hubungan sifat elektronik dan efisiensi inhibisi korosi dari tiga turunan pirazin yaitu *2-metilpirazin* (MP), *2-aminopirazin* (AP) dan *2-amino-5-bromopirazin* (ABP) menggunakan metode DFT, fungsional B3LYP dan basis set 6-311++G(d,p). Ketiga senyawa ini dihitung dengan keadaan non-protonasi dan protonasi pada atom N1, N4, dan NH<sub>2</sub>. Hasil perhitungan E<sub>HOMO</sub>, E<sub>LUMO</sub> dan ΔE berkorelasi baik dengan efisiensi inhibisi. Ketiga senyawa ini berinteraksi dengan logam besi (Fe) di permukaan pada tiga jenis interaksi yaitu Fe-π, Fe-N1, Fe-N4 dan Fe-NH<sub>2</sub>. Energi ikat paling tinggi dari hasil semua interaksi adalah senyawa ABP, dan momen dipolnya pun lebih tinggi terkait dengan interaksi elektrostatik yang lebih tinggi (adsorpsi fisik). Geometri molekul yang dihitung menunjukkan deformasi besar dari cincin terjadi ketika Fe berinteraksi dengan semua senyawa pirazin melalui interaksi Fe-π[6]. Nnenna Winifred Odozi dkk. (2015) menghitung dengan metode komputasi menggunakan metode B3LYP/6-31G(d) pada fasa air. Nnena (2015) melaporkan bahwa senyawa inhibitor korosi *2,4-di-tert-butyl-6-(1H-fenantro[9,10-D]imidazole-2-yl)fenol*(PIP) diteliti dengan teknik penurunan berat dan teknik evolusi hidrogen pada suhu 303-333 K. Hasil penelitiannya menunjukkan efisiensi inhibisi maksimum 68,45% dengan adanya 10 x 10<sup>-5</sup> M PIP pada 303 K. Hasil penelitian ini kemudian dihitung dengan metode DFT/6-31G(d) melaporkan bahwa senyawa inhibitor korosi ini dapat direkomendasikan dan ramah lingkungan untuk industri[7].

Berdasarkan hasil penelitian dari Yulita Anggraeni Setiawati, maka pada penelitian ini dipilih senyawa *2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol* karena secara penelitian memiliki sifat inhibitor korosi yang tinggi dan senyawa ini belum pernah dikaji secara komputasi. Senyawa *2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol* merupakan turunan dari imidazol karena memiliki pasangan elektron bebas pada atom nitrogen yang dapat teradsorpsi pada permukaan logam, yang memiliki sifat fisik kristal berwarna coklat, titik leleh 182,3°C – 183,3°C[5]. Penelitian studi komputasi ini akan dilakukan untuk mempelajari optimasi geometri dan sifat elektronik senyawa inhibitor korosi dengan variasi metode yaitu *Density Functional Theory* (DFT) dan *Restricted Hartree Fock* (RHF) dengan variasi basis set yaitu 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-31+G(d,p), dan 6-311++G(d,p) pada setiap metode yang diasumsikan pada fasa gas kemudian dibandingkan dengan fasa air menggunakan metode

RHF/6-31G(d) dan RHF/6-31+G(d,p). Selain itu, dipelajari pula interaksi antara senyawa inhibitor korosi tersebut dengan atom besi (Fe)[6].

## 1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang penelitian tersebut, maka permasalahan yang perlu dirumuskan adalah sebagai berikut:

1. Bagaimana hasil optimasi geometri dari senyawa 2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol?,
2. Bagaimana sifat elektronik dari senyawa 2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol?, dan
3. Bagaimana interaksi antara senyawa 2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol dengan atom besi?.



### 1.3 Batasan Masalah

Untuk meneliti permasalahan yang telah dirumuskan, penelitian ini akan dibatasi pada beberapa masalah berikut:

1. Perhitungan komputasi ini menggunakan metode RHF dan DFT dengan basis set 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-31+G(d,p), dan 6-311++G(d,p). Perangkat lunak yang digunakannya adalah Avogadro-r88.1-1.1.0, Firefly 8.1, dan Chemcraft.v1.8,
2. Senyawa inhibitor yang digunakan yaitu senyawa 2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol,
3. Penentuan optimasi geometri senyawa 2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol dihitung panjang ikatan antar atom, sudut ikatan, muatan atom, serta kerapatan elektron,
4. Penentuan sifat elektron senyawa 2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol yaitu elektronegativitas, potensial kimia, celah energi (*band gap*), *Global Softness*, *Global Hardness*, fraksi perpindahan elektron serta momen dipol, dan
5. Penentuan interaksi antara senyawa 2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol dengan atom besi.

### 1.4 Tujuan Penelitian

1. Menentukan hasil optimasi geometri dari senyawa 2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol,
2. Menentukan sifat elektronik senyawa dari senyawa 2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol, dan
3. Menentukan interaksi antara senyawa 2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol dengan atom besi.

## 1.5 Manfaat Penelitian

Hasil penelitian ini diharapkan dapat bermanfaat dan memberikan informasi untuk pendidikan, masalah lingkungan, dan bidang lainnya yang memiliki kaitan dengan fungsi salah satu senyawa turunan imidazol2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol yang digunakan sebagai inhibitor korosi.

Penulis juga mengharapkan hasil dari penelitian studi komputasi ini dapat melengkapi data eksperimen di Laboratorium, yang dilakukan oleh Yulita Anggraeni Setiawati[5].

