

BAB I PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Korosi adalah gejala penurunan kualitas permukaan suatu material logam terhadap lingkungannya yang apabila tidak segera ditangani akan mengakibatkan kerugian besar baik secara material ataupun terhadap peradaban manusia. Biaya tahunan korosi di seluruh dunia mencapai \$2,2 triliun pada tahun 2010 [1]. Oleh sebab itu, diperlukan inhibitor korosi yang mudah digunakan, ekonomis dan memiliki efisiensi tinggi untuk menekan laju korosi. Salah satu bahan inhibitor korosi yang memenuhi ketentuan tersebut adalah inhibitor yang berbasis molekul organik. Kelebihan dari molekul organik sebagai inhibitor korosi yakni bersifat ramah lingkungan, dan tidak beracun.

Berbagai jenis senyawa organik telah digunakan sebagai inhibitor korosi. Efisiensi senyawa organik sebagai inhibitor korosi ditentukan oleh gugus fungsional (O, N, S dan P) yang melekat pada senyawa tersebut. Adanya gugus fungsional yang sesuai akan membantu pembentukan kompleks antara senyawa organik dengan permukaan logam [2]. Molekul organik yang melekat pada permukaan logam membentuk lapisan seragam yang dapat mencegah permukaan logam mengalami kontak dengan medium yang bersifat korosif [3].

Inhibitor korosi adalah suatu zat kimia yang ditambahkan ke dalam lingkungan korosif, walaupun dalam jumlah yang sedikit tetapi dapat menurunkan laju korosif logam [4]. Pemilihan inhibitor tidak sembarangan tapi harus memiliki kinerja yang tinggi, ramah lingkungan, serta tidak mengganggu proses produksi. Senyawa imidazol dan beberapa turunannya telah dikenal sebagai senyawa yang dapat menjadi inhibitor korosi [5].

Salah satu senyawa turunan imidazol yang dikaji oleh Anejar A, dkk adalah 7-metil-2-Fenilimidazol[1,2- α]piridin (MPP) yang menunjukkan bahwa senyawa tersebut baik digunakan sebagai inhibitor korosi dan bertindak sebagai inhibitor katodik. Efisiensi dari inhibitor dipengaruhi oleh konsentrasi inhibitor dan suhu dari media korosi. Dari penelitian tersebut kurang menjelaskan secara detail mengenai sifat elektronik dan tidak dijelaskan mengenai panjang ikatan dari senyawa tersebut [6].

Dalam penelitian ini akan dikaji sifat elektronik, panjang ikatan dan muatan atom dari senyawa 2-Fenilimidazol[1,2- α]piridin, 6-metil-2-fenilimidazol [1,2 α]piridin, 6-metil-2-(4-metoksifenilimidazol)[1,2 α]piridin, dan 6-metil-2-(4-klorofenilimidazol)[1,2 α]piridin melalui

komputasi dengan metode *ab initio*. Metode komputasi telah berkembang sebagai alat penting dalam desain inhibitor korosi hingga saat ini yang memberikan sejumlah besar informasi dari senyawa.

Studi *ab initio* dapat digunakan untuk memprediksi struktur dan sifat suatu molekul kimia dengan baik. Keunggulan dari metode ini dapat memprediksikan sifat molekul yang kompleks dengan hasil perhitungan yang berkorelasi secara signifikan dengan hasil eksperimen, selain itu studi *ab initio* dapat menghemat biaya sebab hasil eksperimen dapat diramalkan sebelum eksperimen dilakukan sehingga dapat meminimalisir kegagalan saat eksperimen dilakukan.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas maka permasalahan yang perlu dirumuskan adalah sebagai berikut:

1. Bagaimana struktur teroptimasi senyawa 2-Fenilimidazol[1,2- α]piridin, 6-metil-2-fenilimidazol[1,2 α]piridin, 6-metil-2-(4-metoksifenilimidazol)[1,2 α]piridin, dan 6-metil-2-(4-klorofenilimidazol)[1,2 α]piridin serta panjang ikatan dan muatan atom?
2. Bagaimana sifat elektronik dari senyawa inhibitor korosi 2-Fenilimidazol[1,2- α]piridin, 6-metil 2-fenilimidazol[1,2 α]piridin, 6-metil-2-(4-metoksifenilimidazol)[1,2 α]piridin, dan 6-metil-2-(4-klorofenilimidazol) [1,2 α]piridin?.

1.3 Batasan Masalah

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

1. Metode yang digunakan adalah metode *ab initio*/RHF dengan basis set 6-31G(d,p) untuk senyawa 2-Fenilimidazol[1,2- α]piridin, 6-metil-2-fenilimidazol [1,2 α]piridin, 6-metil-2-(4-metoksifenilimidazol)[1,2 α]piridin, dan 6-metil-2-(4-klorofenilimidazol)[1,2 α]piridin,
2. Perhitungan menggunakan perangkat lunak *Firefly* 8.01, dan memprediksikan panjang ikatan, muatan atom dan sifat-sifat elektronik antara lain momen dipol, struktur teroptimasi, celah energi, *global hardness*, *global softness*, elektronegativitas, potensial ionisasi, dan kerapatan orbital HOMO/LUMO dari senyawa tersebut.

1.4 Tujuan Penelitian

Berdasarkan latar belakang dan rumusan masalah yang diajukan, tujuan dilakukannya penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Untuk menentukan struktur teroptimasi senyawa 2-Fenilimidazol[1,2- α]piridin, 6-metil-2-fenilimidazol[1,2 α]piridin, 6-metil-2-(4-metoksifenilimidazol) [1,2 α]piridin, dan 6-metil-2-(4-klorofenilimidazol)[1,2 α]piridin serta panjang ikatan dan muatan atom
2. Untuk menentukan sifat elektronik dari senyawa inhibitor korosi 2-Fenilimidazol[1,2- α]piridin, 6-metil-2-fenilimidazol [1,2 α]piridin, 6-metil-2-(4-metoksifenilimidazol)[1,2 α]piridin, dan 6-metil-2-(4-klorofenilimidazol)[1,2 α]piridin.

1.5 Manfaat Penelitian

Hasil penelitian ini diharapkan dapat bermanfaat dan memberikan informasi untuk pendidikan baik kimia atau sains yang membahas senyawa 2-Fenilimidazol[1,2- α]piridin, 6-metil-2-fenilimidazol[1,2 α]piridin, 6-metil-2-(4-metoksifenilimidazol)[1,2 α]piridin, dan 6-metil-2-(4-klorofenilimidazol)[1,2 α]piridin sebagai inhibitor korosi. Penulis juga mengharapkan hasil dari penelitian ini dapat bermanfaat sebagai informasi atau prediksi untuk penelitian laboratorium selanjutnya.

