

ABSTRAK

STUDI KOMPUTASI SENYAWA INHIBITOR KOROSI 2-(2-HIDROKSIFENIL)-1H-FENANTRO[9,10-D] IMIDAZOL DENGAN TEORI FUNGSI RAPATAN

Korosi adalah degradasi logam akibat bereaksi dengan berbagai zat di lingkungannya yang menghasilkan senyawa-senyawa yang tidak dikehendaki. Korosi merupakan fenomena yang sangat membebani peradaban manusia karena mengakibatkan kerugian besar secara materil. Dalam industri pertambangan (petroleum), minyak mentah yang dihasilkan masih bercampur dengan garam-garam klorida, gas yang bersifat asam seperti CO₂ atau H₂S, dan asam-asam organik yang memiliki berat molekul rendah seperti asam format dan asetat yang jika bercampur dengan air akan menjadi media yang sangat korosif terhadap bagian dalam pipa baja karbon yang digunakan dalam sumur produksi. Studi komputasi senyawa inhibitor korosi *2-(2-hidroksifenil)-1H-fenantro[9,10D] imidazol* menggunakan Teori Fungsi Rapatan (DFT) serta metode Restricted Hartree-Fock (RHF) dengan variasi tingkat basis set melalui hubungan antara struktur molekul dan sifat elektroniknya. Dari hasil Perhitungan, parameter – parameter yang berkorelasi dengan sifat elektronik senyawa organik inhibitor korosi antara lain celah energi (ΔE), momen dipol (Debye), keelektronegatifan (χ), potensial kimia (μ), kekerasan (η) dan kelunakan (S). Hasil perhitungan metode/basis set B3LYP/6-31+G(d,p) merupakan metode/basis set yang baik dan efisien, sehingga diperoleh hasil perhitungan antara lain celah energi sebesar 3,890 (eV), momen dipol sebesar 3,188 (Debye), keelektronegatifan sebesar 3,467 (eV), potensial kimia sebesar -3,4663 (eV), kekerasan sebesar 1,945 (eV), dan kelunakan sebesar 0,2571 (eV).

Kata-kata kunci: *2-(2-hidroksifenil)-1H-fenantro[9,10D]imidazol*, inhibitor, korosi, DFT, RHF.

ABSTRACT

COMPUTATION STUDY OF CORROSION INHIBITOR COMPOUNDS 2-(2-hydroxyphenyl)-1H-fenantro [9,10-D] imidazole WITH DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT)

Corrosion is degradation of metal surface quality due to oxidation-reduction reaction with the surrounding environment, especially corrosive media. Corrosion is a phenomenon that weighed heavily on human civilization because it resulted in huge losses materially. In the mining industry (petroleum), crude oil produced is mixed with salts of chloride, a gas that is acidic as CO₂ or H₂S, and organic acids that have low molecular weights such as formic acid and acetic which when mixed with water will be highly corrosive media against the inside of the carbon steel pipe used in the production wells. Computational study of corrosion inhibitor compound 2-(2-hydroxyphenyl)-1H-fenantro[9,10D] imidazole using density function theory (DFT) and Restricted Hartree-Fock (RHF) with varying levels of the base set through the relationship between molecular structure and electronic properties , From the results of calculations, parameters - parameters that are correlated with the electronic properties of organic compounds crevice corrosion inhibitor include energy (AE), dipole moment (Debye), electronegativity (χ), chemical potential (μ), hardness (η) and softness (S). By using the calculation method / basis set B3LYP / 6-31 + G (d, p) is a method / basis set was good and efficient, in order to obtain the results of calculations include the energy gap of 3.890 (eV), amounted to 3.188 dipole moment (Debye) , electronegativity 3.467 (eV), chemical potential -3.4663 (eV), hardness 1.945 (eV), and softness 0.2571 (eV).

Keywords: 2-(2-hydroxyphenyl)-1H-fenantro [9,10D] imidazole, inhibitor, corrosion, DFT, RHF.