

# BAB I PENDAHULUAN

## 1.1 Latar Belakang

Berkembangnya ilmu pengetahuan dan teknologi, menuntut penggunaan suatu material secara tepat. Untuk dapat menggunakan material dengan tepat maka harus dikenali dengan baik sifat-sifat material yang mungkin akan dipilih untuk dipergunakan. Sifat-sifat ini tentunya sangat banyak macamnya, karena sifat ini dapat ditinjau dari berbagai segi/bidang keilmuan. Korosi merupakan masalah yang sangat serius dalam dunia material, karena dapat mengakibatkan kerugian-kerugian yang sangat besar, antara lain: bisa menimbulkan kebocoran, mengakibatkan berkurangnya kekuatan/ketangguhan, robohnya suatu konstruksi, meledaknya suatu pipa/bejana bertekanan dan mungkin juga akan membuat pencemaran pada suatu produk. Berkaitan dengan hal tersebut, maka diperlukan suatu cara bagaimana menentukan nilai laju korosi suatu material. Sehingga dari nilai laju korosi yang diperoleh kita dapat mengetahui apakah suatu material tersebut mempunyai daya tahan yang unggul terhadap korosi (resistan terhadap korosi) [1].

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  $\text{CO}_2$  atau  $\text{H}_2\text{S}$ , 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. Umumnya lingkungan korosif ini lebih terfokus pada kandungan larutan  $\text{NaCl}$  dengan persentase tinggi dan jenuh  $\text{CO}_2$  [2]. Korosi sejatinya merupakan perusakan suatu material (terutama logam) karena bereaksi dengan lingkungannya. Karena bereaksi dengan lingkungannya ini sebagian logam akan bereaksi dengan oksigen dan menjadi oksida, sulfida atau hasil reaksi lain yang dapat larut dalam lingkungannya. Korosi logam melibatkan proses anodik, yaitu oksidasi logam menjadi ion dengan melepaskan elektron ke permukaan logam dan proses katodik yang mengkonsumsi elektron tersebut dengan laju yang sama [2].

Disamping itu, peraturan perundang-undangan yang ketat tentang lingkungan mengharuskan pemilihan inhibitor yang berkinerja tinggi, ramah lingkungan, serta tidak mengganggu proses produksi. Adapun inhibitor yang memenuhi ketentuan tersebut adalah inhibitor senyawa organik seperti senyawa turunan imidazol yang dikembangkan dibidang industri petroleum, untuk mencari

inhibitor yang menghasilkan efisiensi inhibisi paling optimal. Studi efisiensi senyawa turunan imidazol sebagai inhibitor korosi telah dilakukan dan menunjukkan aktivitas inhibisi korosi yang berbeda tergantung struktur molekul dan gugus fungsinya [3]. Studi efisiensi senyawa komputasi turunan imidazol telah dikembangkan terutama digunakan sebagai inhibitor korosi dan menunjukkan aktivitas inhibisi korosi yang berbeda tergantung pada struktur molekul dan gugus fungsinya [4].

Contoh yang ditemukan sebagai inhibitor korosi adalah turunan senyawa turunan bipyrazole, yang dihitung dengan perhitungan komputasi menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT). Penelitian dilakukan oleh *Hengliang Wang et. al* (2006) menghasilkan serangan nukleofilik yang berlokasi di cincin fenil paling reaktif adalah salah satu senyawa dari turunan bipyrazol baru, yaitu senyawa N1,N1-bis[(3,5-dimethyl-1H-pyrazol-1-yl)methyl]-N4,N4-dimethyl-1,4-benzenediamine [5]. Hasil penelitian yang telah dilakukan oleh Annisa Fauzianur Phratamy yaitu Studi Aktivitas senyawa 2-fenil-1H-fenantro[9,10-D]imidazol dan 2-(2-hidroksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol sebagai Inhibitor Korosi Baja Karbon dalam Larutan Elektronik Jenuh Karbon Dioksida [6]. Penelitian tersebut belum menjelaskan secara detail mengenai sifat elektronik dari molekul-molekul tersebut.

Pada penelitian ini akan dilakukan studi komputasi untuk mempelajari optimasi geometri dan sifat elektronik senyawa 2-(2-hidroksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol 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. Metode dan basis set ini diasumsikan pada fasa gas dengan metode/basis set RHF/6-31+G(d,p). Hasil studi komputasi ini diharapkan dapat melengkapi eksperimen Annisa Fauzianur Phratamy [6] yang tidak dilakukan secara eksperimen di laboratorium.

## 1.2 Rumusan Masalah

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

1. Bagaimana struktur teroptimasi dari senyawa 2-(2 hidroksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol?
2. Bagaimana sifat elektronik dari senyawa 2-(2 hidroksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol melalui celah energi ( $\Delta E$ ), momen dipol (Debye), keelektronegatifan ( $\chi$ ), potensial kimia ( $\mu$ ), kekerasan ( $\eta$ ) dan kelunakan (S) ?

### 1.3 Tujuan Penelitian

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

1. Menentukan struktur teroptimasi dari senyawa *2-(2-hidroksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol*.
2. Menentukan sifat elektronik dari senyawa *2-(2-hidroksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol* melalui celah energi ( $\Delta E$ ), momen dipol (Debye), keelektronegatifan ( $\chi$ ), potensial kimia ( $\mu$ ), kekerasan ( $\eta$ ) dan kelunakan (S).

### 1.4 Manfaat Penelitian

Hasil penelitian ini diharapkan dapat bermanfaat dan memberikan informasi untuk pendidikan, masalah lingkungan, dan bidang lainnya yang memiliki kaitan dengan fungsi senyawa turunan imidazol *2-(2 hidroksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol* yang digunakan sebagai inhibitor korosi.

### 1.5 Batasan Masalah

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

1. Senyawa inhibitor korosi yang digunakan yaitu senyawa *2-(2-hidroksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol*.
2. Perhitungan komputasi senyawa inhibitor korosi *2-(2-hidroksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol* menggunakan metode teori fungsi rapatan RHF dan B3LYP dengan basis set 6-31G (d), 6-31G(d,p), 6-31+G (d,p), dan 6-311++G (d,p).