

## ABSTRAK

### STUDI KOMPUTASI SENYAWA INHIBITOR KOROSI 2-(4-HIDROKSI-3-METOKSIFENIL)-1H-FENANTRO[9,10D]IMIDAZOL DENGAN TEORI FUNGSI RAPATAN

Korosi merupakan fenomena yang dapat merugikan manusia dalam hal material. Untuk memperlambat terjadinya korosi digunakan inhibitor yang aman dan ramah lingkungan yaitu inhibitor organik, salah satunya yaitu senyawa turunan imidazol 2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10D]imidazol. Dalam penelitian ini dianalisis optimasi geometri struktur dan sifat elektronik. Perhitungan komputasi ini menggunakan perangkat lunak firefly 8.1 dengan metode DFT/B3LYP dan RHF serta empat variasi basis set yaitu 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-31+G(d,p), dan 6-311++G(d,p), dengan mengasumsikan molekul dalam fasa gas dan fasa air, yang dibandingkan dengan senyawa imidazol serta interaksi dengan logam Fe menggunakan metode dan basis set yang sesuai. Dari hasil perhitungan secara komputasi, diketahui bahwa metode DFT/B3LYP dengan basis set 6-31+G(d,p) merupakan metode dan basis set yang baik untuk menghitung sifat elektronik senyawa sehingga baik pula untuk menghitung interaksi antara senyawa inhibitor dengan logam Fe. Nilai sifat elektronik dari senyawa inhibitor korosi 2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10D]imidazol diantaranya nilai afinitas elektron adalah 1,384 eV; Nilai potensial ionisasi adalah 5,417 eV; Nilai keelektronegatifan adalah 3,400 eV; Nilai *Global Hardness* adalah 2,016 eV; Nilai *Global Softness* adalah 0,248 eV; dan nilai momen dipol adalah 4,708 Debye. Interaksi antar senyawa 2-(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1H-fenantro[9,10D]imidazol dengan atom besi yang paling stabil terjadi pada atom 15N, sehingga membentuk ikatan Fe-15N dengan panjang ikatan 1,8 Å, dan kerapatan elektron yang tinggi.

Kata-kata kunci: korosi; inhibitor korosi; DFT; basis set; interaksi Fe.



uin

UNIVERSITAS ISLAM NEGERI  
SUNAN GUNUNG DJATI  
BANDUNG