

## ABSTRAK

### STUDI AB INITIO SENYAWA INHIBITOR KOROSI 2-FENIL-1H-FENANTRO[9,10-D]IMIDAZOL DENGAN VARIASI HIMPUNAN BASIS DAN METODE PERHITUNGAN

Karat merupakan reaksi redoks antara suatu logam dengan berbagai zat di lingkungannya dan menghasilkan senyawa-senyawa yang tidak dikehendaki yang dapat menurunkan kualitas logam tersebut. Senyawa organik yang memiliki struktur yang planar, heteroatom (O, S, N, P), dan bentuk aromatik, berpotensi sebagai senyawa inhibitor korosi. Salah satunya adalah senyawa turunan imidazol, yaitu 2-fenil-1H-fenantro[9,10-D]imidazol. Dalam penelitian ini dianalisis optimasi geometri dan sifat elektronik senyawa tersebut. Perhitungan senyawa komputasi terhadap senyawa organik 2-fenil-1H-fenantro[9,10-D]imidazol dihitung menggunakan Firefly8.1.1 dengan menggunakan metoda DFT (*Density Functional Theory*) fungsional B3LYP (*Becke's three Lee-Yang-Parr*) dan metoda RHF (*Restricted Hartree-Fock*). Masing-masing metoda dilakukan dengan variasi himpunan basis yaitu 6-31G(d); 6-31G(d,p); 6-31+G(d,p) dan 6-311++G(d,p) dalam fasa gas. Dilakukan pula perbandingan pada fasa air RHF/6-31+G(d,p) serta senyawa imidazol dengan himpunan basis B3LYP/6-31+G(d,p). Dari hasil perhitungan komputasi, diketahui bahwa senyawa 2-fenil-1H-fenantro[9,10-D]imidazol berpotensi sebagai inhibitor korosi, dimana sudah dilakukan secara eksperimen<sup>[1]</sup>. Pada penelitian ini, himpunan basis B3LYP/6-31+G(d,p) dalam fasa gas merupakan metode dan himpunan basis yang baik untuk menghitung semua parameter sifat elektronik senyawa serta mendekati hasil eksperimen dengan nilai celah energi yaitu 3,9799 eV, momen dipol 2,530 Debye, elektronegativitas 3,6127 eV, afinitas elektron sebesar 1,5720 eV, potensial ionisasi sebesar 5,5519 eV, *global hardness* 1,9899 eV, *global softness* 0,2512 eV, fraksi perpindahan elektron sebesar 0,8638 eV.

Kata-kata kunci: ab initio; inhibitor korosi; DFT; RHF; himpunan basis.