

UJI INHIBISI KOROSI BESI OLEH TURUNAN SENYAWA AZA-18-MAHKOTA-6: BUKU SAKU ELEKTRONIK SEBAGAI SUPLEMEN PEMBELAJARAN PADA MATERI REAKSI REDOKS**Nur Asia*, Eka Junaidi, Saprizal Hadisaputra**Program Studi Pendidikan Kimia, Universitas Mataram. Jalan Majapahit No. 62
Mataram, NTB 83112, Indonesia.* Corresponding Author. E-mail: nur.aciaa15@gmail.com**Received:****Accepted:****Published:****doi:****Abstrak**

Pengaruh penambahan heteroatom nitrogen terhadap efisiensi inhibisi korosi senyawa turunan aza-18-mahkota-6 telah dikaji menggunakan kajian teoritis. Heteroatom nitrogen yang ditambahkan ke dalam cincin eter mahkota berfungsi sebagai pendonor elektron. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan metode kimia komputasi yang valid untuk senyawa aza-18-mahkota-6, menentukan pengaruh penambahan heteroatom nitrogen terhadap efisiensi inhibisi korosi senyawa turunan aza-18-mahkota-6 berdasarkan parameter kuantum (E_{HOMO} , E_{LUMO} , E_{gap} , I , A , χ , dan ΔN). Luaran tambahan pada penelitian ini berupa buku saku elektronik yang dapat dijadikan sebagai suplemen pembelajaran. Validasi metode dilakukan dengan perbandingan parameter geometri senyawa aza-18-mahkota-6 berdasarkan hasil teoritis dan eksperimen. Metode DFT pada tingkat teori B3LYP dengan himpunan basis 6-31G(d) merupakan metode terbaik karena memiliki nilai struktur geometri yang mendekati hasil eksperimen. Efisiensi inhibisi korosi berdasarkan parameter kuantum secara berturut-turut yaitu heksaaza (N6) > pentaaza (N5) > tetraaza (N4) > triaza (N3) > diaza (N2) > monoaza (N1). Senyawa N6 memiliki efisiensi inhibisi paling tinggi yaitu 67,037%, sedangkan efisiensi inhibisi paling rendah pada senyawa N1 yaitu 60,812%. Oleh karena itu, inhibitor organik terbaik yaitu pada senyawa N6. Penelitian ini juga menghasilkan buku saku elektronik yang dapat digunakan sebagai suplemen pembelajaran kimia pada materi reaksi redoks.

Kata Kunci: Korosi, inhibitor organik, aza-18-mahkota-6, DFT, buku saku elektronik

Corrosion Inhibition On Iron By Aza-18-Crown-6 Derivative Compounds: An Electronic Pocket Book As A Supplement Learning Of Redox Reaction Material**Abstract**

The effect of the added of nitrogen heteroatoms on the efficiency of corrosion inhibition of aza-18-crown-6 derivative compounds has been studied using theoretical studies. Nitrogen heteroatoms added to the ether crown ring functions as an electron donor. The aims of study to determine the valid computational chemical methods for compounds aza-18-crown-6, the effect of nitrogen heteroatoms added to the efficiency of corrosion inhibition of aza-18-crown-6 derivative compounds based on quantum parameters (E_{HOMO} , E_{LUMO} , E_{gap} , I , χ , dan ΔN). The additional output of study is in the form an electronic pocket book that can be used as a supplement learning. Method validation is done by comparing the structural parameters of the aza-18-crown-6 compounds based on the results of theoretical and experimental studies. The DFT method at the B3LYP level of theory with the basis set 6-31G (d) is the best method because it has the geometric structure that approaches the results of the experiment. The efficiency of corrosion inhibition based on quantum parameters is heksaaza (N6) > pentaaza (N5) > tetraaza (N4) > triaza (N3) > diaza (N2) > monoaza (N1). Heksaaza (N6) compounds has the highest inhibitory efficiency of 67.037% while the lowest addition of monoaza (N1) compounds is 60.812%. Therefore, the best organic inhibitors are heksaaza (N6) compounds. In this study, an electronic pocket book was also produced that can be used as a supplement learning of redox reaction material.

Keywords: Corrosion, organic inhibitor, aza-18-crown-6, DFT, electronic pocket book

PENDAHULUAN

Korosi adalah proses elektrokimia pada logam yang dapat merusak struktur logam. Kerusakan struktur logam diakibatkan karena logam berinteraksi dengan lingkungan yang bersifat korosif (Hamdiani, dkk., 2016). Menurut Gapsari (2017), korosi dapat menjadikan permukaan besi menjadi kasar, rapuh dan mudah hancur. Proses korosi cukup sulit untuk dikendalikan. Perlu adanya pencegahan untuk mengurangi terjadinya korosi. Ada berbagai metode yang dapat dilakukan untuk melindungi besi dari korosi seperti pemilihan material, pelapisan, perlindungan katodik, dan penambahan inhibitor korosi (Setiawan dkk., 2017).

Penambahan inhibitor korosi merupakan salah satu cara yang paling efektif, efisien dan ekonomis digunakan untuk mencegah terjadinya korosi, karena dalam penggunaannya memerlukan biaya yang relatif murah dan prosesnya sederhana. Inhibitor dapat membentuk lapisan teradsorpsi pada permukaan logam sehingga dapat memperlambat laju korosi (Arthur, dkk., 2019). Pada umumnya inhibitor berasal dari senyawa anorganik dan organik.

Inhibitor organik merupakan solusi yang tepat untuk mencegah terjadinya korosi, karena mudah didapatkan, aman, biaya murah, dan ramah lingkungan. Senyawa organik yang dijadikan inhibitor harus mengandung minimal salah satu dari heteroatom seperti: N, O, P, S yang memiliki pasangan elektron bebas (PEB) atau elektron π (Yatiman, 2009). Salah satu senyawa organik yang dapat dijadikan sebagai inhibitor korosi adalah senyawa eter mahkota.

Eter mahkota (*crown ether*) merupakan salah satu kelompok senyawa makrosik yang memiliki kemampuan mengikat ion tertentu secara selektif. Eter mahkota telah digunakan secara luas sebagai katalis transfer fasa dalam sintesis polimer, dalam sintesis organik, untuk elektroforesis penyusun membran elektroda selektif ion, dan ekstraksi kation (Hidayati, 2017). Selain itu dalam penelitian Fouda dkk., (2019) melaporkan bahwa eter mahkota juga memiliki potensial yang besar sebagai kandidat inhibitor korosi karena menunjukkan nilai efisiensi yang baik. Eter mahkota memiliki sifat struktural yang dapat dengan mudah dimodifikasi untuk memenuhi kriterianya sebagai inhibitor korosi, karena pada strukturnya mengandung salah satu heteroatom (O, N, P, S). Selain itu, eter mahkota adalah senyawa yang

kurang beracun dan ramah lingkungan sehingga cocok digunakan sebagai inhibitor korosi. Kemampuan eter mahkota sebagai inhibitor korosi dapat ditentukan baik secara eksperimen maupun teoritis.

Berdasarkan kajian literatur, studi eksperimental mengenai peran eter mahkota terutama pada 18-mahkota-6 yang efisiensi sebagai inhibitor korosi sudah pernah dipelajari. Seperti studi eksperimen yang dilakukan oleh M. Abdallah dkk., (2008), Fouda dkk., (2010) dan Paul dkk., (2021). Penelitian eksperimental dilakukan dilaboratorium yang prosesnya memerlukan biaya dan waktu yang lama. Dari berbagai permasalahan tersebut, pemanfaatan teknologi seperti kimia komputasi dapat menjadi solusi.

Menurut Hadisaputra dkk., (2017) metode kimia komputasi bersifat sangat fleksibel dan hampir semua praktek kimia baik level sederhana maupun tingkat kesulitan yang tinggi dapat dimodelkan dengan baik menggunakan kimia komputasi, selain itu kimia komputasi juga memiliki beberapa keunggulan lainnya yaitu memiliki tingkat akurasi yang tinggi, waktu praktikum dapat dipersingkat, tidak berbahaya dan dapat membantu meningkatkan pemahaman peserta didik terhadap materi kimia secara optimal. Studi mengenai penggunaan eter mahkota sebagai inhibitor korosi juga sudah dibahas melalui kajian teoritis dengan menggunakan kimia komputasi. Seperti pada penelitian yang dilakukan oleh Hadisaputra dkk., (2017) yang membahas pengaruh ukuran cincin makrosiklik terhadap efisiensi inhibisi korosi pada dibenzo-crown-ether melalui metode DFT sehingga diperoleh efisiensi tertinggi sebesar 82,02%.

Studi teoritis terkait efisiensi eter mahkota sebagai inhibitor korosi masih terbatas untuk senyawa eter mahkota tertentu saja. Sehingga perlu dilakukan penelitian secara teoritis terhadap eter mahkota terutama 18-mahkota-6 dengan penambahan heteroatom nitrogen (N) yang terikat pada cincin eter mahkota. Hasil penelitian secara teoritis dapat dimanfaatkan untuk membuat bahan ajar dalam bentuk buku saku elektronik. Menurut Syahroni (2016) buku saku elektronik adalah buku elektronik sederhana yang dapat dibawa kemana saja, serta memuat informasi dalam bentuk teks ataupun gambar yang dapat dilihat pada layar digital. sehingga dapat mempermudah siswa dalam mempelajari korosi pada materi reaksi redoks.

Tujuan dari penelitian ini yaitu untuk meningkatkan kemampuan eter mahkota sebagai inhibitor korosi dan dapat dijadikan landasan baru untuk para peneliti untuk melakukan kajian eksperimen. Selain itu, buku saku elektronik yang dihasilkan diharapkan dapat menjadi suplemen pembelajaran kimia sebagai pendamping buku teks utama yang memberikan informasi tambahan pengetahuan mengenai penggunaan eter mahkota sebagai inhibitor korosi.

METODE

Jenis Penelitian

Jenis penelitian ini merupakan penelitian eksperimen deskriptif. Dimana penelitian ini dilakukan dengan cara permodelan molekul senyawa inhibitor korosi menggunakan kimia komputasi. Selanjutnya hasil data yang diperoleh dari hasil perhitungan kimia komputasi dipaparkan secara logis dan bermakna. Menurut Subana (2005) metode deskriptif adalah prosedur pemecahan masalah yang diselidiki dengan menuturkan dan menafsirkan data yang berkenaan dengan fakta, keadaan, variabel, dan fenomena yang terjadi saat penelitian berlangsung dan menyajikannya apa adanya.

Alat dan Bahan Penelitian

Alat yang digunakan dalam penelitian ini adalah sistem operasi *Windows*, *GaussView 5.0*, *Gaussian 09W*, *ChemDraw Ultra 12.0*, *Material Studio*, *Notepad++*, *Microsoft Word 2010*, dan *Flip PDF Profesional*.

Molekul yang akan dianalisis dalam penelitian ini adalah eter mahkota senyawa turunan aza-18-mahkota-6 diantaranya monoaza-18-mahkota-6 (N1), diaza-18-mahkota-6 (N2), triaza-18-mahkota-6 (N3), tetraaza-18-mahkota-6 (N4), pentaaza-18-mahkota-6 (N5), dan heksaaza-18-mahkota-6 (N6).

Prosedur Penelitian

Optimasi Struktur Senyawa

Langkah awal penelitian adalah dengan membuat input file dari hasil visualisasi struktur senyawa aza-18-mahkota-6 dan turunan dalam bentuk 3D menggunakan *GaussView 5.0*. Selanjutnya dilakukan optimasi senyawa dan perhitungan energi single point menggunakan *Gaussian 09W* metode *Density Functional Theory* (DFT) dengan himpunan basis 6-31G(d) dan 6-311G(d,p). Optimasi geometri senyawa aza-18-mahkota-6 dan turunan dilakukan untuk

dapat menentukan keakuratan hasil kajian teoritis. Perhitungan energi single point dilakukan untuk menentukan nilai parameter kimia kuantum.

Secara teoritis perhitungan potensial ionisasi (I) dan afinitas elektron (A) menggunakan teorema yang dikembangkan Koopman (1934). Teorema Koopman menjelaskan hubungan antara potensial ionisasi (I), afinitas elektron (A) dan energi orbital (E_{HOMO} dan E_{LUMO}) dengan persamaan (1) (2) sebagai berikut:

$$I = -E_{\text{HOMO}} \quad (1)$$

$$A = -E_{\text{LUMO}} \quad (2)$$

Selanjutnya menggunakan teorema Koopman diperoleh persamaan elektronegativitas (χ) yang dihitung menggunakan persamaan (3) berikut (Musa dkk., 2012):

$$\chi = \frac{I+A}{2} \quad (3)$$

Hardness (η) dapat dihitung berdasarkan persamaan (4) sebagai berikut (Musa dkk., 2012):

$$\eta = \frac{I-A}{2} \quad (4)$$

Jumlah transfer elektron (ΔN) dapat dihitung berdasarkan persamaan (5) sebagai berikut (Fergachi dkk., 2018):

$$\Delta N = \frac{\chi_{\text{Fe}} - \chi_{\text{Inh}}}{2(\eta_{\text{Fe}} + \eta_{\text{Inh}})} \quad (5)$$

dengan ΔN adalah Transfer elektron, χ_{Fe} adalah elektronegativitas besi, χ_{Inh} adalah elektronegativitas inhibitor, η_{Fe} adalah hardness besi dan η_{Inh} adalah hardness inhibitor. Berdasarkan nilai teoritis, nilai $\chi_{\text{Fe}} = 7.0$ eV dan $\eta_{\text{Fe}} = 0$ digunakan untuk menghitung jumlah transfer elektron.

Efisiensi anti korosi (IE%) secara teoritis dihitung menggunakan persamaan (6) (7) (8) sebagai berikut (Hadisaputra, 2014):

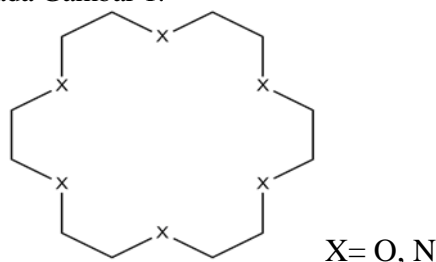
$$I_{\text{add}} \% = \frac{I_{\text{Inh}} - I_x - I_{\text{Inh}}}{I_{\text{Inh}}} \times 100 \quad (6)$$

$$IE_{\text{add}} \% = I_{\text{add}} \% - I_{\text{elnh}} \% \quad (7)$$

$$IE_{\text{teori}} \% = I_{\text{elnh}} \% + IE_{\text{add}} \% \quad (8)$$

dengan $I_{\text{add}} \%$ adalah persentase potensial ionisasi, I_{Inh} adalah potensial ionisasi senyawa induk, I_x adalah potensial ionisasi senyawa turunan, $IE_{\text{add}} \%$ adalah persentase efisiensi inhibitor, $I_{\text{elnh}} \%$ adalah efisiensi inhibitor, $IE_{\text{teori}} \%$ adalah persentase efisiensi inhibitor secara teori. Adapun struktur umum dari

senyawa aza-18-mahkota-6 dan turunan dapat dilihat pada Gambar 1.



Gambar 1 struktur molekul senyawa aza-18-mahkota-6 turunan (O = Oksigen, N = nitrogen)

Pembuatan Buku Saku Elektronik

Pembuatan buku saku elektronik dilakukan setelah penelitian kimia komputasi dilakukan. Hasil penelitian ini kemudian dibuat menjadi bahan ajar dalam bentuk buku saku elektronik. Dalam pembuatan media pembelajaran berupa buku saku elektronik membutuhkan seperangkat komputer yang dilengkapi dengan *software Microsoft Word 2010*, *Flip PDF Profesional*, selain itu dibutuhkan telepon selular dengan Sistem Operasi berbasis Android.

Adapun langkah-langkah pembuatan buku saku elektronik terdiri atas beberapa tahap, yaitu:

1. Tahapan Persiapan

Tahap persiapan adalah tahap awal yang dilakukan sebelum membuat buku saku elektronik. Kegiatan yang dilakukan pada tahap persiapan antara lain yaitu menganalisis kebutuhan, menentukan tujuan pembelajaran, menentukan isi dan urutannya, dan menentukan media yang dipakai.

2. Tahap Perancangan (*design*)

Setelah tahap persiapan, maka langkah selanjutnya adalah tahap perancangan buku saku. Pembuatan rancangan produk dilakukan pada tahap ini dengan menggunakan *Microsoft Word 2010*. Kegiatan yang dilakukan pada tahap ini meliputi penyusunan format dari buku saku

elektronik, serta memulai rancangan dari produk buku saku elektronik yang meliputi isi dan sampul dari buku saku elektronik.

3. Tahap Konversi (*Convert*)

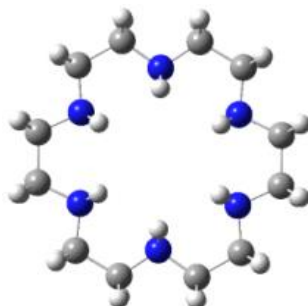
Tahap ini dilakukan setelah perancangan awal produk buku saku selesai dilakukan menggunakan *Microsoft Word*, yang kemudian disimpan dalam bentuk PDF. File dalam bentuk PDF tersebut dikonversi oleh *Flip PDF Profesional* menjadi buku saku bentuk elektronik dengan cara membuka aplikasi *Flip PDF Profesional* lalu pilih *open* dan *convert*, kemudian secara otomatis file tersebut akan berubah menjadi buku saku elektronik. Selanjutnya meng-klik *publish* untuk memperoleh file buku saku elektronik dalam bentuk PDF, sehingga dapat diakses baik secara *offline* maupun *online*.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Parameter Geometri

Parameter geometri berfungsi untuk mengetahui tingkat validitas dari metode yang akan digunakan. Menurut Pranowo dan Hetadi (2011) menyatakan bahwa dalam menentukan metode struktur elektronik sangat dipengaruhi oleh jenis-jenis himpunan yang terbaik untuk dapat menggambarkan interaksi antara dua molekul yang berbeda. Ada beberapa syarat pemilihan himpunan basis yang sesuai seperti melihat nilai BSSE (*Basis Set Superposition Error*) yang terkecil atau kesesuaian dengan data spektroskopi atau teknik eksperimen lainnya (Pergolese dkk., 2006).

Adapun hasil optimasi struktur 3 dimensi (3D) senyawa turunan aza-18-mahkota-6 diwakili oleh heksaaza-18-mahkota-6 (N₆) dapat dilihat pada gambar 2. Struktur yang teroptimasi dapat memberikan informasi tentang geometri molekul berupa jarak ikatan, sudut ikatan, sifat elektronik muatan atom dan energi HOMO-LUMO.



Gambar 2. Hasil Optimasi Struktur Senyawa Heksaza-18-Mahkota-6 (atom: putih=H; biru=N; abu=C)

Tabel 1. Perbandingan parameter struktur 18-mahkota-6 dan turunan senyawa aza-18-mahkota-6.

Senyawa	Jarak O-O Diagonal					
	Perhitungan DFT		Perhitungan ab initio		Eksperimen	
	Min (Å)	Max (Å)	Min (Å)	Max (Å)	Min (Å)	Max (Å)
18C6 (N0)	5,381	5,385	5,802	5,948	4,267	4,784
N1	5,568	5,848				
N2	5,587	5,808				
N3	5,831	5,836				
N4	5,509	5,978				
N5	5,771	5,972				
N6	5,622	5,627				

(Glendening, 1994)

Berdasarkan Tabel 1 diketahui jarak ikatan antara O-O hasil optimasi struktur dengan perhitungan DFT untuk senyawa 18-mahkota-6 (18C6) diperoleh jarak ikatan terpendek sebesar 5,381 Å dan jarak ikatan terpanjang sebesar 5,385 Å. Hasil tersebut tidak jauh berbeda dari struktur kristal hasil eksperimen yang dilakukan oleh Dunitz (1974) yang melaporkan jarak ikatan anatara O-O terpendek sebesar 4,267 Å dan jarak ikatan terpanjang sebesar 4,784 Å. Adapun selisih jarak ikatan antara data hasil perhitungan secara teoritis dan eksperimen menunjukkan hasil yang baik yaitu rata-rata sekitar ~0,6-1 Å.

Selain perbandingan antara perhitungan DFT menggunakan himpunan basis 6-31G(d) dengan struktur kristal hasil eksperimen, dilakukan pula perbandingan hasil perhitungan menggunakan metode mekanika kuantum ab initio pada tingkat teori RHF/3-21G yang dilakukan oleh Glendening (1994) dengan hasil eksperimen. Pada perhitungan ab initio

didapatkan hasil selisih jarak ikatan yang cukup jauh berbeda jika dibandingkan dengan hasil perhitungan DFT, dimana jarak ikatan terpanjang sebesar 5,948 Å dan jarak ikat terpendek 5,802 Å. Dengan demikian, berdasarkan perbandingan jarak ikatan yang lebih pendek maka penggunaan metode DFT pada tingkat teori B3LYP dengan himpunan basis 6-31G(d) lebih valid digunakan dan dapat diterima untuk optimasi struktur molekul senyawa aza-18-mahkota-6 dan turunannya.

Parameter Kimia Kuantum

Parameter kuantum berfungsi untuk menentukan sifat struktur berdasarkan data kajian teoritis sehingga dapat memprediksi nilai efisiensi inhibisi senyawa aza-18-mahkota-6 dan turunannya. Hasil dari perbandingan sifat kuantum antara senyawa aza-18-mahkota-6 dan turunannya telah berhasil dihitung secara komputasi menggunakan metode DFT pada tingkat teori B3LYP dengan himpunan basis 6-31G(d,p).

Tabel 2. Parameter kimia kuantum untuk seyawa turunan aza-18-mahkota-6 dihitung menggunakan metode DFT pada tingkatan teori B3LYP/6-31G(d,p)

Inhibitor	Parameter							
	E_{HOMO} (eV)	E_{LUMO} (eV)	E_{gap} (eV)	I (eV)	A (eV)	χ (eV)	ΔN (eV)	IE_{theory} (%)
N1	-6,18814	1,15947	7,34761	6,18814	-1,15947	2,51433	0,61049	60,81247
N2	-6,12963	1,06695	7,19658	6,12963	-1,06695	2,53134	0,62094	61,43564
N3	-6,05154	1,08818	7,13972	6,05154	-1,08818	2,48168	0,63284	62,26735
N4	-5,82840	0,95348	6,78188	5,82840	-0,95348	2,43746	0,67275	64,64393
N5	-5,77861	0,95648	6,73509	5,77861	-0,95648	2,41106	0,68134	65,17422
N6	-5,60364	0,28544	5,88908	5,60364	-0,28544	2,65909	0,73710	67,03776

Tabel 2 menunjukkan hasil perhitungan parameter kuantum senyawa aza-18-mahkota-6

dan turunannya dengan penambahan heteroatom nitrogen (N). Adanya penambahan heteroatom

nitrogen (N) yang berbeda pada cincin eter mahkota tentu akan mempengaruhi struktur dan kerapatan elektron dari masing-masing senyawa turunan aza-18-mahkota-6, sehingga mempengaruhi efisiensi inhibisi korosinya. Efisiensi inhibisi dari inhibitor organik senyawa turunan aza-18-mahkota-6 meningkat dengan meningkatnya kerapatan elektron pada atom nitrogen (N) yang merupakan pusat reaksi untuk senyawa turunan aza-18-mahkota-6 (Yatiman, 2019). Adapun data parameter kimia kuantum menjelaskan tentang E_{HOMO} , E_{LUMO} , E_{gap} , I , A , χ , dan ΔN .

Secara umum, pada tabel 2 dapat dilihat bahwa peningkatan nilai E_{HOMO} senyawa aza-18-mahkota-6 dan turunannya memiliki urutan $N1 < N2 < N3 < N4 < N5 < N6$. Nilai E_{HOMO} yang tinggi menunjukkan kemampuan inhibitor untuk menyumbangkan elektron ke permukaan logam. Nilai E_{HOMO} senyawa aza-18-mahkota-6 (N1) adalah -6,18814 eV lebih rendah daripada senyawa lain, sedangkan nilai E_{HOMO} untuk senyawa heksaaza-18-mahkota-6 (N6) adalah -5,60364 eV lebih tinggi. Berdasarkan data ini dapat diprediksi bahwa senyawa N6 akan memiliki efisiensi anti korosi lebih tinggi dibandingkan senyawa lainnya.

Potensial ionisasi (I) dapat digunakan untuk mengukur reaktivitas atom atau molekul. Nilai potensial ionisasi tinggi menunjukkan molekul memiliki reaktivitas yang tinggi sedangkan nilai potensial ionisasi rendah menunjukkan molekul memiliki reaktivitas yang rendah (Hamdiani dkk., 2016). Tabel 2 juga menunjukkan nilai pola kenaikan potensial ionisasi yang mengikuti pola kenaikan E_{HOMO} . Nilai potensial ionisasi senyawa N6 adalah 5,6036 eV lebih rendah dibandingkan nilai potensial ionisasi untuk senyawa N1 yaitu 6,1881 eV. Berdasarkan data ini kembali dapat diprediksi bahwa senyawa N6 akan memiliki efisiensi anti korosi (IE%) lebih tinggi dibandingkan senyawa lainnya.

Transfer elektron menjelaskan kemudahan molekul untuk mendonasikan elektron, dan bukan untuk mengukur jumlah elektron yang ditransferkan. Kemampuan inhibisi korosi molekul meningkat seiring dengan mudahnya molekul tersebut mendonasikan elektron ke permukaan logam sehingga proses korosi dapat diperhambat (Azuxetullatif dkk., 2020). Berdasarkan studi literatur, apabila nilai $\Delta N < 3,5$ maka efisiensi

inhibisi dapat meningkatkan kemampuan donor elektron pada permukaan logam (Lukovits dkk., 2001). Tabel 2 menunjukkan nilai transfer elektron senyawa heksaaza-18-mahkota-6 (N6) adalah 0,73710 eV lebih besar dibandingkan nilai transfer elektron senyawa monoaza-18-mahkota-6 (N1) yaitu 0,61049 eV. Berdasarkan data transfer elektron ini kembali dapat diprediksi bahwa senyawa N6 akan memiliki efisiensi anti korosi (IE%) yang lebih tinggi dibandingkan senyawa lainnya.

Hasil perhitungan menunjukkan bahwa penambahan heteroatom nitrogen (N) menyebabkan peningkatan efisiensi anti korosi. Sesuai prediksi pola E_{HOMO} , potensial ionisasi, dan transfer elektron maka senyawa N6 memiliki efisiensi anti korosi yang lebih tinggi dibandingkan dengan senyawa lain sebesar 67,037%.

Buku Saku Elektronik

Buku saku elektronik merupakan luaran yang dihasilkan pada penelitian. Buku saku dapat menjadi alternatif bahan ajar yang dimanfaatkan untuk mendukung kelancaran proses belajar mengajar di kelas maupun di luar kelas. Adapun karakteristik buku saku yang dihasilkan dari penelitian ini yaitu *Adaptif* dan *user friendly*.

Adaptif (penyesuaian) yaitu buku saku yang dikembangkan sebaiknya *up to date* mengikuti perkembangan zaman dan fleksibel untuk digunakan oleh siswa. *User friendly* (mudah digunakan) yaitu buku saku elektronik hendaknya mudah digunakan oleh penggunanya. Setiap materi yang disajikan bersifat informatif dan mudah dipahami. Maka dari itu, buku saku elektronik ini harus disusun dengan bahasa sederhana dan komunikatif sehingga mudah untuk dipahami siswa.

Buku saku memiliki karakteristik yang dapat merangsang antusias belajar siswa dan mempermudah siswa dalam memahami korosi pada materi reaksi redoks. Adapun bagian-bagian dari buku saku elektronik yang telah dirancang yaitu:

1. Halaman pembuka adalah halaman awal yang berisi sampul dengan judul, nama penyusun, dan terdapat logo universitas mataram. Pemilihan warna serta gambar pada sampul disesuaikan dengan materi pada buku saku elektronik.



Gambar 3. Tampilan cover

2. Halaman pendahuluan yang berisi daftar isi, kata pengantar, kompetensi dasar dan peta konsep.
3. Halaman isi merupakan pokok dari media pembelajaran yang berisi tentang materi-materi pokok yang dibahas pada buku saku elektronik. Halaman isi pada buku saku elektronik ini menjelaskan secara umum terkait proses terjadinya korosi, jenis korosi, faktor-faktor serta dampaknya. Serta menjelaskan secara spesifik terkait peran dari eter mahkota sebagai inhibisi korosi besi, seperti variasi atom yang digunakan dalam eter mahkota, jenis-jenis eter mahkota yang berpotensi sebagai inhibisi, dan interaksi antara eter mahkota dengan logam besi.
4. Halaman evaluasi merupakan halaman yang berisi latihan soal. Pada bagian ini siswa dapat mengerjakan soal untuk mengevaluasi pemahaman terhadap isi buku saku elektronik. Buku saku elektronik ini juga dilengkapi dengan kunci jawaban sehingga dapat mempermudah siswa dalam belajar mandiri.

SIMPULAN

Berdasarkan hasil penelitian dan pembahasan dapat disimpulkan bahwa:

1. Metode DFT pada tingkat teori B3LYP dengan himpunan basis 6-31G(d) merupakan metode terbaik yang terpilih berdasarkan validasi metode perbandingan struktur geometri panjang ikatan hasil kajian eksperimen dengan hasil teoritis.
2. Adanya penambahan heteroatom nitrogen (N) pada cincin eter mahkota dapat mempengaruhi efisiensi inhibisi korosi senyawa turunan aza-18-mahkota-6. Hal ini dikarenakan heteroatom nitrogen menyebabkan distribusi elektron lebih banyak pada cincin eter mahkota sehingga elektron yang didonorkan ke logam besi lebih banyak. Berdasarkan parameter kimia kuantum menunjukkan bahwa efisiensi

inhibisi mengalami peningkatan pada senyawa inhibitor heksaaza-18-mahkota-6 (N6) yaitu sebesar 67,037%.

3. Buku saku elektronik yang dihasilkan dapat dijadikan sebagai suplemen pembelajaran kimia yang mempermudah siswa dalam memahami korosi pada materi reaksi redoks.

DAFTAR PUSTAKA

- Arthur, D.E., Uzairu, A., Mustapha, A., Adeniji, E.S., (2019). A Computational Adsorption And DFT Studies on Corrosion Inhibition Potential of Some Derivatives of Phenyl-Urea. *Kenkyu J. Nanotechnol. Nanosci.* 5, 19–32.
- Azuxetullatif., Emriadi., Syukri., & Putri U. (2020). Mempelajari Senyawa Mirisitrin dengan Penambahan Substituen NH₂, NO₂, dan CH₃ sebagai Inhibitor Korosi Menggunakan Metode Density Functional Theory (DFT). *Chempublish Journal*, 5(2), 166-178.
- Dunitz, J. D., Dobler, M., Seiler, P., & Phizackerley, R. P. (1974). Crystal Structure Analyses of 1,4,7,10,13,16-Hexaoxacyclooctadecane and its Complexes with Alkali Thiocyanates. *Acta Cryst*, B30, 2733-2737.
- Fergachi, O., Benhiba, F., Rbaa, M., Touir, R., Ouakki, M., Galai, M., Lakhri, B., Oudda, H. dan Touhami, M. E. (2018). Experimental and Theoretical Study of Corrosion Inhibition of Mild Steel in 1.0 M HCl Medium by 2-(4-(chlorophenyl)-1H-benzimidazol-1-yl) phenyl methanone. *Materials Research*, 21(6).
- Fouda, A.S., Abdallah, M., Al-Ashrey, S.M., & Abdel-Fattah, A.A., (2010). Some Crown Ethers As Inhibitors for Corrosion of Stainless Steel Type 430 In Aqueous Solutions. *Desalination*, 250(2), 538–543.
- Gapsari, F., (2017). Pengantar Korosi. Universitas Brawijaya Press, Malang.
- Glendenig, E. F.D., & Thompson, A. M., (1994). An Ab Initio Investigation of The Structure and Alkali Metal Cation Selectivity of 18-Crown-6. *J. Am. Chem. Soc.* 116, 10657-10669.
- Hadisaputra, S., Canaval, L. R., Pranowo, H. D., & Armunanto, R. (2014). Theoretical Study on the Extraction of Alkaline Earth Salts by 18-Crown-6: Roles of Counterions, Solvent Types

- and Extraction Temperatures. *Indonesian Journal of Chemistry*, 14(2), 199-208.
- Hadisaputra, S., Hamdiani, S., Kurniawan, M. A., & Nuryono, N. (2017). Influence Of Macrocyclic Ring Size On The Corrosion Inhibition Efficiency of Dibenzo Crown Ether: A Density Functional Study. *Indonesian Journal of Chemistry*, 17(3), 431-438.
- Hamdiani, S., J., Purwoko, A. A., Savalas, L.R.T., & Hadisaputra, S. (2018). Theoretical Study On The Binding Selectivity Of 18-Membered Azacrown Ethers With Alkaline Earth Metal Species. *Acta. Chim. Asiana*, 1(1), 17-23.
- Hidayati, N., Pranowo, H. D., & Purnomo, B. (2017). Pemodelan Interaksi Eter Mahkota Bz15c5 Terhadap Kation Zn^{2+} Berdasarkan Metode Density Functional Theory. *Seminar Nasional Pendidikan Sains*. 330-337.
- Koopmans, T. (1934). Über die Zuordnung von Wellenfunktionen und Eigenwerten zu den einzelnen Elektronen eines Atoms. *Physica*, 1(1-6), 104-113.
- M. Abdallah., A. S. Fouda., & S. M. El-ashrey. (2008). Corrosion Inhibiting Properties Of Some Crown Ethers On Corrosion Of Stainless Steel (Types 304 And 316) In Hydrochloric Acid. *Sci. Paper*, 49, 9-22.
- Musa, A. Y., Mohamad, A. B., Kadhum, A. A. H., Takriff, M. S., & Ahmoda, W. (2012). Quantum Chemical Studies on Corrosion Inhibition for Series of Thio Compounds on Mild Steel in Hydrochloric Acid. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 18(1), 551-555.
- Paul, P. K., Mahendra, Y., & I. B. Obot. (2021). Potential Of Dibenzo-18-Crown-6-Ether Derivatives As A Corrosion Inhibitor On Mild Steel In Hcl Medium: Electrochemical And Computational Approaches. *New J. Chem*, 45, 6826-6842.
- Pergolese, B., Marchesan, D., Muniz-Miranda, M., & Bigotto, A. (2006). The Influence of The Basis Set Size on DFT Calculations of Surface Complexes for The Assignment of SERS Spectra. *Internet Electronic Journal of Molecular Design*, 5(5), 287-295.
- Pranowo, H. D., & Hetadi, A. K. B. (2011). *Pengantar Kimia Komputasi*. Lubuk Agung, Bandung.
- Setiawan, A., Novitrie, N. A., & Ashari, L. (2017). Analisis Logam Tembaga dan Aluminium pada Biodiesel yang Diseintesis dari Minyak Goreng Bekas. Seminar MASTER. Surabaya: Politeknik Perkapalan Surabaya.
- Subana, M., & Sudrajat. (2005). *Dasar-Dasar Penelitian Ilmiah*. Pustaka setia: Bandung.
- Syahroni, M., Nurrochmah, S., & Amiq, F. (2016). Pengembangan buku saku elektronik berbasis android tentang signal-signal wasit futsal untuk wasit futsal di kabupaten pasuruan. *Jurnal Pendidikan Jasmani*, 26(2), 304-317.
- Yatiman, P., (2009). Penggunaan Inhibitor Organik untuk Pengendalian Korosi Logam dan Paduan, Prosiding Seminar Nasional Universitas Negeri Yogyakarta.