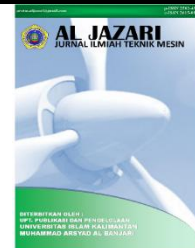




Al Jazari Jurnal Ilmiah Teknik Mesin

Journal homepage:
<https://ojs.uniska-bjm.ac.id/index.php/IJR/index>
p-ISSN 2502-4922, e-ISSN 2615-0867



Inhibitor Dari Senyawa 2,4,6-Trimethylpyridine Sebagai Pelindung Korosi Pada Cu Dalam Larutan H_2SO_4 1M

Syarif Hidayatullah^{*a}, Suteja^b

^{a,b} Jurusan Teknik Mesin, Universitas Mataram

^a syarift008@gmail.com, ^b suteja@unram.ac.id

Info Artikel

Riwayat Artikel:

Diterima: 28 Januari 2026

Diterima dalam bentuk revisi: 7 April 2026

Diterima/publis: 23 April 2026

Abstrak

Material Tembaga (Cu) sangat berperan dalam kemajuan teknologi dalam bidang konstruksi, transportasi, dan dirgantara. Namun peranya yang begitu luas juga tidak luput dari masalah korosi. Penelitian ini berfokus pada senyawa 2,4,6-Trimethylpyridine (TPD) untuk diteliti dalam larutan H_2SO_4 1M pada permukaan logam Cu menggunakan teknik *Weight Loss Measurement* (WLS) dan *Potentiodynamic Polarization* (PDP). Uji WLS dan PDP menunjukkan bahwa efisiensi penghambatan korosi meningkat secara bertahap seiring dengan peningkatan konsentrasi dan mencapai efisiensi penghambatan maksimum 82.80 % (WLS) dan 88.89 % (PDP) pada konsentrasi 300 ppm. TPD bertindak sebagai penghambat korosi tipe campuran, terutama menghambat pelarutan logam anodik. Adsorpsi inhibitor mengikuti model adsorpsi isothermal Langmuir yang lebih lanjut mendukung perilaku adsorpsinya pada permukaan logam dengan nilai ΔG_{ads} adalah -31.91 kJ/mol dengan jenis fisisorpsi dan kemisorpsi. Karakterisasi permukaan dengan analisa *Fourier Transform Infrared Spectroscopy* (FTIR) mengkonfirmasi potensi inhibitor yang baik. Analisis kimia kuantum dari senyawa TPD pada permukaan Cu mengonfirmasi bukti bahwa inhibitor korosi dapat teradsorpsi karena energi dari molekul menyebabkan ikatan tarik menarik dengan orbital d-kosong pada logam sehingga memisahkan molekul H_2SO_4 untuk membatasi reaksi yang dapat menghambat produk korosi.

Kata Kunci

Tembaga, Trimethylpyridine, FTIR, Inhibitor Korosi, H_2SO_4

Abstract

Copper (Cu) plays a significant role in technological advances in the fields of construction, transportation, and aerospace. However, its widespread use is not without corrosion problems. This study focuses on the compound 2,4,6-Trimethylpyridine (TPD) to be examined in a 1M H_2SO_4 solution on the surface of Cu metal using the *Weight Loss Measurement* (WLS) and *Potentiodynamic Polarization* (PDP) techniques. The WLS and PDP tests showed that corrosion inhibition efficiency increased gradually with increasing concentration, reaching a maximum inhibition efficiency of 82.80% (WLS) and 88.89% (PDP) at a concentration of 300 ppm. TPD acts as a mixed-type corrosion inhibitor, primarily inhibiting anodic metal dissolution. The adsorption of the inhibitor follows the Langmuir isothermal adsorption model, which further supports its adsorption behavior on metal surfaces with a ΔG_{ads} value of -31.91 kJ/mol with physisorption and chemisorption types. Surface characterization using *Fourier Transform Infrared Spectroscopy* (FTIR) analysis confirmed the inhibitor's good potential. Quantum chemical analysis of the TPD compound on the Cu surface confirms evidence that the corrosion inhibitor can be adsorbed because the energy of the molecule causes an attractive bond with the empty d-orbital on the metal, thereby separating the H_2SO_4 molecule to inhibit the reaction that can inhibit corrosion products.

<http://dx.doi.org/10.31602/al-jazari.v11i1.22523>



@UNISKA 2026. Diterbitkan oleh UPT Publikasi dan Pengelolaan Jurnal

Jurnal Al Jazari is licensed under a [Creative Commons Attribution-ShareAlike 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/)

PENDAHULUAN

Bahan logam banyak dimanfaatkan diberbagai bidang industri dan kehidupan sehari-hari seperti konstruksi,

transportasi, dan dirgantara karena sangat berperan dalam kemajuan teknologi, salah satu logam itu adalah Cu karena memiliki Sifat konduktivitas termal,

kelenturan, dan konduktivitas listrik yang baik yang berperan sangat krusial [1]. Namun, Cu rentan dihadapi oleh masalah korosi di lingkungan lembap. Dimana Korosi merujuk pada kerusakan dan erosi berkelanjutan pada bahan logam yang disebabkan oleh proses kimia atau elektrokimia yang terjadi ketika bahan tersebut terpapar lingkungan asam [2]. Korosi ini bisa terjadi pada peralatan industri atau barang sehari-hari. Korosi ini dapat menyebabkan kegagalan keamanan peralatan dan bahkan kecelakaan. Korosi juga tidak hanya menyebabkan kerugian ekonomi yang signifikan tetapi juga menimbulkan bahaya keamanan yang serius. Oleh karena itu, banyak peneliti fokus untuk mengembangkan cara mengurangi dampak korosi ini [3].

Dalam dunia industri, pembersihan dengan larutan asam adalah metode paling sering dimanfaatkan untuk menghilangkan karat pada permukaan logam, terutama penggunaan larutan asam sulfat (H_2SO_4). Meskipun larutan asam sulfat dikenal dapat menghilangkan oksida pada permukaan tembaga, namun H_2SO_4 ini juga menyebabkan korosi pada substrat logam. Oleh karena itu, untuk mengurangi korosi dan melindungi logam sebanyak mungkin, berbagai metode telah diterapkan untuk mencegah korosi, seperti lapisan anti-korosi, perlindungan elektrokimia, pengembangan bahan paduan logam anti-korosi baru, dan penggunaan inhibitor korosi. Di antara metode tersebut, teknologi inhibitor korosi telah menarik perhatian para peneliti dalam beberapa tahun terakhir berkat keunggulannya seperti kebutuhan dosis yang rendah, kemudahan aplikasi, efektivitas yang cepat, dan efisiensi biaya yaitu dengan cara mengubah lingkungan korosi atau mempengaruhi proses kimia [2].

Ada berbagai jenis inhibitor korosi, masing-masing dengan efektivitas perlindungan yang berbeda-beda [4], [5]. Saat ini, inhibitor korosi umumnya dikategorikan menjadi inhibitor korosi anorganik/organik dan inhibitor korosi dari ekstrak hewan/tumbuhan. Namun, beberapa inhibitor korosi telah dilarang oleh pemerintah karena toksisitasnya dan bahaya lingkungan yang ditimbulkannya. Misalnya, inhibitor korosi seperti kromat, garam merkuri, dan molibdat dapat dengan mudah menyebabkan kontaminasi biotoksik pada lingkungan. Organofosfat dan polifosfat rentan menyebabkan eutrofikasi di air karena kandungan fosfornya yang mengakibatkan polusi [6].

Saat ini, inhibitor korosi yang populer di pasaran sebagian besar merupakan senyawa organik sintesis, seperti senyawa imidazol [7], senyawa asam amida [8], cairan ionik imidazolium [9], benzotiazol [10], dan garam amonium kuaterner [11]. Inhibitor korosi organik ini memiliki berbagai kelompok fungsional seperti C–N, C–O, –OH, N =N, C–C, dan cincin aromatik yang dapat secara efektif menempel pada permukaan logam dengan berkoordinasi dengan orbital d kosong logam, sehingga memperlambat proses korosi. Eksperimen juga

telah membuktikan sifat penghambatan korosi yang unggul dari senyawa-senyawa ini. Salah satu senyawa inhibitor organik itu yang akan digunakan dalam penelitian ini adalah 2,4,6-Trimethylpyridine.

Dalam lingkungan asam, reaksi antara asam dan logam reaktif menyebabkan korosi parah pada material logam itu sendiri. Pengendalian yang tidak tepat terhadap kondisi pembersihan asam, seperti konsentrasi dan durasi selama proses pembersihan dapat mengakibatkan tidak hanya penghilangan karat dan kotoran, tetapi juga dapat menimbulkan korosi baru pada permukaan logam. Hal ini berpotensi merusak integritas keseluruhan dan kinerja peralatan mesin. Diperkirakan secara global, 20–40% produksi tahunan peralatan dan bahan logam dibuang karena korosi yang disebabkan oleh metode pembersihan asam [12].

Dalam penelitian ini, kami secara inovatif memperkenalkan senyawa 2,4,6-Trimethylpyridine (TPD) dalam larutan H_2SO_4 pada material Cu. Struktur molekul TPD diduga mampu memodulasi sifat antarmuka pada permukaan logam. Struktur senyawa yang unik ini dirancang untuk memberikan perlindungan logam yang superior melalui adsorpsi kimia yang lebih kuat dan penghalang fisik yang lebih padat. Kinerja penghambatan korosi tembaga dalam larutan H_2SO_4 1 M dievaluasi menggunakan pengukuran WLS dan PDP. Karakterisasi permukaan dilakukan menggunakan uji *Fourier Transform Infrared Spectroscopy* (FTIR). Analisa adsorpsi isothermal digunakan untuk mengevaluasi perilaku senyawa pada permukaan logam. Selain itu, studi kimia kuantum digunakan untuk menjelaskan hubungan antara efisiensi penghambatan dengan struktur senyawa pada tingkat molekuler/atomik.

METODE PENELITIAN

Material dan larutan

2,4,6-Trimethylpyridine (TPD), etanol, dan H_2SO_4 dibeli pada toko online. Logam yang digunakan dalam penelitian ini adalah Tembaga (Cu) pasaran yang mudah didapat diberbagai toko bangunan. Untuk memperoleh hasil yang dapat diandalkan dan dapat diulang, Cu dipotong menjadi bentuk silinder dengan luas 1 cm^2 untuk pengukuran elektrokimia dan dengan dimensi $45 \text{ mm} \times 30 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$ digunakan untuk uji kehilangan berat. Sebelum pengujian, sampel dipoles menggunakan kertas amplas (grade 200–1000), dicuci dengan etanol, air suling, dan dikeringkan dengan udara pada suhu ruangan. Larutan H_2SO_4 1 M disiapkan dengan jenis analitik 90% sebagai media korosif. Inhibitor korosi ditambahkan ke media korosif untuk menyiapkan larutan uji dengan konsentrasi inhibitor dari blank sampai 300 ppm.

Weight Loss Measurement

Spesimen Cu direndam dalam 150 mL larutan H_2SO_4 1M dengan konsentrasi yang bervariasi. Spesimen tersebut ditempatkan dalam bak air termostatik pada suhu

ruangan. Setelah 3 jam perendaman, spesimen diangkat dengan hati-hati dan produk korosi pada permukaannya dibersihkan secara lembut menggunakan sikat lembut. Spesimen kemudian dibilas dengan etanol dan air deionisasi, lalu dikeringkan menggunakan udara dingin. Berat spesimen diukur pada timbangan digital dengan akurasi 0,01 mg. Tingkat penutupan (θ), laju korosi (CR), dan efisiensi penghambatan (η_w) ditentukan dengan menghitung kehilangan berat. Setiap uji kehilangan berat diulang tiga kali dan rata-ratanya dihitung. Rumus perhitungan sebagai berikut [13] :

$$CR = \frac{\Delta w}{S \times t} \quad (1)$$

$$\eta_w (\%) = \frac{CR_0 - CR}{CR_0} \times 100 \quad (2)$$

$$\theta = \frac{CR_0 - CR}{CR_0} \quad (3)$$

S (cm²) adalah luas permukaan sampel, Δw mewakili perubahan massa dalam miligram, dan t adalah waktu perendaman dalam (jam).

Pengujian elektrokimia

Uji *Potentiodynamic Polarization* (PDP) dilakukan pada stasiun kerja elektrokimia. Sistem uji elektrokimia menggunakan konfigurasi tiga elektroda konvensional, dengan Cu sebagai elektroda kerja, elektroda logam platinum sebagai elektroda kontras, dan elektroda kalomel jenuh (SCE) sebagai elektroda referensi. Semua uji elektrokimia dilakukan pada suhu kamar. Elektroda terlebih dahulu direndam dalam larutan elektrolit selama 30 menit dan setelah mencapai potensial terbuka sirkuit yang stabil, pengujian dilakukan. Pengukuran PDP dilakukan dengan kecepatan pemindaian 1 mV/s, mencakup rentang potensial 0,65 - 0,15 V. Perangkat lunak Nova 1.11 digunakan untuk pemodelan dan analisis semua data PDP. Efisiensi penghambatan IE (%) dihitung menggunakan persamaan di bawah ini [14], [15], [16]:

$$IE(\%) = \frac{I_{corr}^0 \times I_{corr}'}{I_{corr}^0} \times 100 \quad (4)$$

i_{corr}^0 adalah densitas arus korosi dalam larutan H₂SO₄ blank dan i_{corr} adalah nilai yang sesuai dengan adanya inhibitor.

Pengujian FT-IR

Karakterisasi permukaan FTIR dilakukan setelah pengujian elektrokimia dengan nama alat (FTIR, IRSpirit Shimadzu). Pada tahap ini, bertujuan untuk mengidentifikasi gugus fungsi dari senyawa inhibitor yang mungkin terlibat dalam proses adsorpsi dipermukaan logam dengan mengamati perubahan spektrum vibrasi pengujian sehingga interaksi inhibitor dengan logam dapat dipahami dengan lebih baik.

Kimia kuantum

Geometri molekul inhibitor korosi dalam larutan air dioptimalkan pada tingkat B3LYP/6-31G, yang merupakan *Density Functional Theory* (DFT) yang tersedia dalam modul DMol3 perangkat lunak Materials Studio 2017. Beberapa sifat molekul diperoleh, termasuk potensial elektrostatik, energi orbital molekul terisi tertinggi (E_{HOMO}), energi orbital molekul kosong terendah (E_{LUMO}), celah energi ($\Delta E = E_{LUMO} - E_{HOMO}$), potensial ionisasi ($I = -E_{HOMO}$), afinitas elektron ($A = E_{LUMO}$), indeks elektrofilik (ω), elektronegativitas (χ), kekerasan (η), kelembutan (σ), dan fraksi transfer elektron (ΔN). Rumus perhitungan untuk sifat-sifat ini adalah sebagai berikut [17], [18] :

$$\omega = \frac{\chi^2}{2\eta} \quad (5)$$

$$\chi = \frac{I + A}{2} \quad (6)$$

$$\eta = \frac{I - A}{2} \quad (7)$$

$$\sigma = \frac{1}{\eta} \quad (8)$$

$$\Delta N = \frac{\chi_{Cu} - \chi_{inh}}{2(\eta_{Cu} + \eta_{inh})} \quad (9)$$

Nilai dari χ_{Cu} dan η_{Cu} pada material Cu adalah 4.48 eV dan 0 eV secara berturut-turut [19].

HASIL DAN PEMBAHASAN

Weight loss measurement

Tabel 1 menampilkan data pengujian WLM yang diperoleh setelah merendam sampel logam Cu dalam larutan H₂SO₄ 1M pada kondisi blank dan dengan konsentrasi TDP 300 ppm yang berbeda selama 3 jam pada suhu kamar. Menurut Tabel 1, efisiensi penghambatan korosi meningkat seiring dengan peningkatan konsentrasi penghambat korosi. Efisiensi penghambatan korosi tertinggi sebesar 82.80 % dicapai pada konsentrasi 300 ppm. Hal ini karena permukaan Cu memiliki banyak situs aktif dan seiring dengan peningkatan konsentrasi inhibitor korosi, adsorpsinya di antarmuka logam/larutan meningkat sehingga menutupi situs aktif dan memberikan perlindungan korosi [20].

Tabel 1. Parameter nilai WLM

C (ppm)	Δw (mg)	CR (mg/cm ² .h)	η_w (%)	θ
Blank	141.25	1.57	-	-
100	40.19	0.45	71.34	0.71
200	32.95	0.37	76.43	0.76
300	24.06	0.27	82.80	0.82

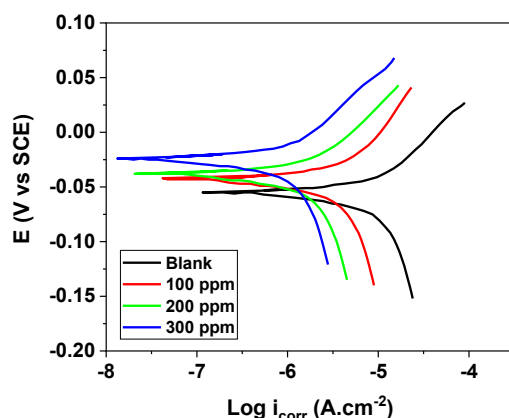
Potentiodynamic Polarization study

Gambar 1 menunjukkan kurva polarisasi potensiodinamik Cu dalam larutan H_2SO_4 1 M pada konsentrasi inhibitor korosi yang berbeda pada suhu kamar 27°C . Arus korosi (i_{corr}), potensial korosi (E_{corr}), kemiringan anodik (β_a), dan kemiringan katodik (β_c) dihitung menggunakan metode ekstrapolasi Tafel dan tercantum dalam Tabel 2.

Tabel 2. Parameter hasil pengujian PDP

C (ppm)	β_a (V/dec)	β_c (V/dec)	E_{corr} (mV)	i_{corr} (A/cm^2)	IE (%)
Blank	0.04	4.05	-55	1.26×10^{-5}	-
100	1.15	2.09	-42	0.23×10^{-5}	81.74
200	1.85	1.91	-38	0.17×10^{-5}	86.50
300	2.06	1.74	-24	0.14×10^{-5}	88.89

Berdasarkan Gambar 1 dan Tabel 2, dapat diamati bahwa pada konsentrasi blank dibandingkan dengan penambahan konsentrasi inhibitor, kurva polarisasi dengan kehadiran inhibitor korosi bergeser secara signifikan ke arah densitas arus yang lebih rendah. Selain itu, semakin tinggi konsentrasi inhibitor korosi, semakin signifikan tren penurunan tersebut, menunjukkan bahwa inhibitor korosi memiliki efek penghambatan terhadap reaksi evolusi hidrogen katodik dan pelarutan logam anodik pada elektroda Cu. Selain itu, penambahan inhibitor korosi tidak mengubah bentuk kurva anodik dan katodik dan kurva polarisasi pada berbagai konsentrasi sejajar satu dengan lainnya. Hal ini menunjukkan bahwa penambahan inhibitor korosi tidak mengubah mekanisme reaksi elektrokimia dan molekul inhibitor korosi hanya memblokir situs evolusi hidrogen aktif pada permukaan Cu melalui proses adsorpsi untuk membatasi produk korosi [21].



Gambar 1. Plot tafel yang diuji pada konsentrasi inhibitor blank hingga 300 ppm

Jika pergeseran E_{corr} melebihi 85mV, inhibitor dapat diklasifikasikan sebagai salah satu dari inhibitor katodik atau anodik [22]. Jika pergeseran kurang dari 85mV, inhibitor dapat diklasifikasikan sebagai inhibitor tipe campuran antara keduanya dan inhibitor ini dapat berperilaku secara spontan dalam larutan korosif. Dalam

studi ini, pergeseran maksimum nilai E_{corr} untuk ekstrak adalah 31mV pada konsentrasi 300 ppm, menunjukkan bahwa senyawa TPD adalah inhibitor korosi yang berinteraksi pada daerah anodik dan katodik permukaan logam atau bisa dikatakan inhibitor gabungan antara keduanya.

Adsorpsi Isothermal

Proses adsorpsi senyawa TPD pada permukaan Cu dalam larutan H_2SO_4 1M mengikuti adsorpsi isothermal yang ditunjukkan pada Gambar 2. Dimana adsorpsi isothermal Langmuir digunakan karena telah masuk kriteria yang sesuai, dilihat dari nilai persamaan linier yang dihasilkan. Koefisien penyesuaian linier R^2 untuk setiap kelompok eksperimen pada konsentrasi yang berbeda berada di atas 0,99 dan kemiringan garis juga sangat dekat dengan 1. Hal ini menunjukkan bahwa adsorpsi inhibitor korosi pada permukaan Cu mengikuti model isothermal adsorpsi Langmuir yang termasuk dalam mekanisme adsorpsi monolayer [23]. Hal ini juga menunjukkan bahwa dalam larutan H_2SO_4 1M, molekul inhibitor korosi dapat menempel pada permukaan logam untuk membentuk lapisan tunggal dan menghambat penetrasi media korosif. Penempelan molekul inhibitor korosi pada permukaan logam memiliki kekuatan yang sama dan tidak ada preferensi atau persaingan diantara molekul yang menempel. Parameter adsorpsi Langmuir yang dihitung ditampilkan dalam Tabel 3.

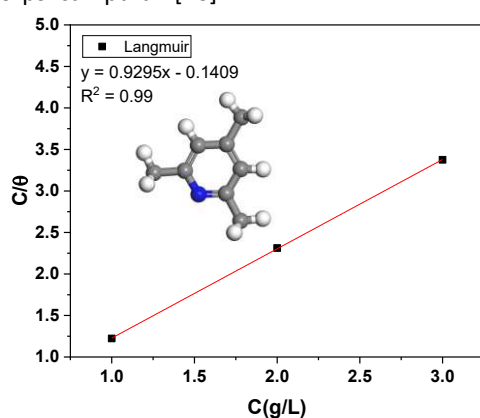
Tabel 3. Parameter persamaan langmuir

Persamaan adsorpsi	Persamaan Linier	K_{ads} ($\text{L}\cdot\text{mol}^{-1}$)	ΔG_{ads} (kJ/mol)
Langmuir	$y = 0.9295x - 0.1409$	7097.23	-31.91

Dari Tabel 3, dapat diamati bahwa konstanta kesetimbangan adsorpsi K_{ads} menunjukkan kapasitas adsorpsi (penghambatan korosi) senyawa TPD pada permukaan Cu, ini mengindikasikan semakin tinggi K_{ads} penghambatan korosi juga semakin meningkat. Hal ini serupa dengan kesimpulan dari studi literatur bahwa, K_{ads} yang tinggi maka molekul penghambat korosi lebih mudah teradsorpsi pada permukaan logam, sehingga menghasilkan penghambatan korosi dan meningkatkan ketebalan lapisan pelindung yang lebih baik sehingga efisiensi penghambatan korosi meningkat [24]. Hal ini membuktikan bahwa efisiensi penghambatan korosi Cu dalam larutan H_2SO_4 yang tinggi diimbangi dengan nilai K_{ads} yang tinggi yaitu sebesar adalah 7097.23 ($\text{L}\cdot\text{mol}^{-1}$). Hal ini dibuktikan dengan pengujian WLM dan PDP yang efisiensinya tinggi dan terus meningkat dari konsentrasi 100 ppm hingga 300 ppm.

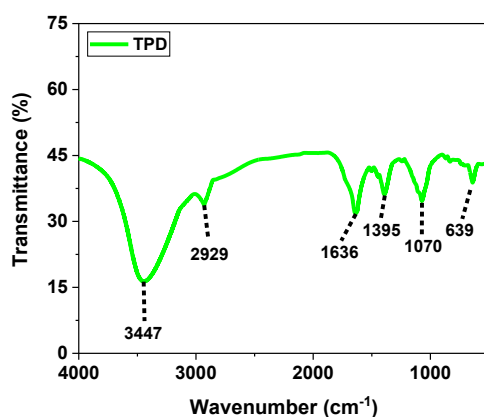
Nilai ΔG_{ads} adalah $-31.91 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$. Dimana nilai negatif ΔG_{ads} menunjukkan bahwa komponen penghambat korosi efektif dalam TPD mengalami adsorpsi spontan pada permukaan Cu dan dapat membentuk lapisan adsorpsi yang stabil. jika $20 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} > |\Delta G_{\text{ads}}| < 40$

$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, hal ini dianggap sebagai kombinasi antara adsorpsi kimia dan fisik [25]. Jika $|\Delta G_{\text{ads}}| < 20 \text{ kJ/mol}$, hal ini dianggap sebagai adsorpsi fisik/fisorpsi, dan jika $|\Delta G_{\text{ads}}| > 40 \text{ kJ/mol}$, hal ini menunjukkan bahwa distribusi atau transfer muatan terjadi di dalam molekul penghambat korosi untuk membentuk ikatan kovalen dengan permukaan logam, ini dikaitkan dengan adsorpsi kimia/kemisorpsi. Selain itu, semakin negatif nilai ΔG_{ads} , semakin mudah adsorpsi terjadi pada permukaan logam, sehingga menghasilkan laju penghambatan korosi yang lebih tinggi. Dalam eksperimen ini, $20 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} < |\Delta G_{\text{ads}}| < 40 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, menunjukkan bahwa adsorpsi inhibitor senyawa TPD pada permukaan Cu dalam larutan H_2SO_4 1 M melibatkan adsorpsi fisik dan kimia, dimana adsorpsi kimia sebagai mekanisme dominan sekaligus membentuk adsorpsi campuran [26].



Gambar 2. Model persamaan langmuir

Analisa FTIR



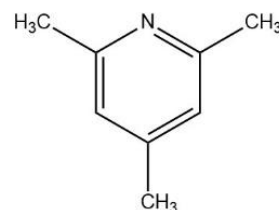
Gambar 3. FTIR dari TPD

Gambar 3 menunjukkan hasil pengujian FTIR dari TPD dan pengamatan gugus fungsional puncak gelombang juga diamati lebih lanjut. Pada 3447 cm^{-1} puncak gelombang tersebut dikaitkan dengan getaran regangan ikatan N-H. Puncak lebar pada 2929 cm^{-1} menunjukkan adanya ikatan C-H [27]. Puncak pada 1605 cm^{-1} dan 1384 cm^{-1} merupakan getaran regangan ikatan C=C dan C-H, sedangkan puncak pada 1050 cm^{-1} dikaitkan dengan ikatan C-N [28]. Puncak gelombang dan gugus fungsional yang didapat mengindikasikan atom-atom pada senyawa

TPD ini berperan aktif dalam proses adsorpsi, baik itu dengan cara adsorpsi fisik ataupun kimia dalam membatasi ion korosif berinteraksi dengan permukaan Cu.

Studi Kimia Kuantum

Molekul penghambat korosi dioptimalkan secara struktural menggunakan *Density Functional Theory* (DFT). Gambar 4 menampilkan struktur senyawa TPD yang berperan dalam proses adsorpsi. Dapat diamati bahwa struktur dari inhibitor korosi memiliki konfigurasi datar. Struktur datar ini memudahkan penutupannya secara merata pada permukaan logam, meningkatkan area penutup, dan membentuk lapisan pelindung yang padat. Akibatnya, lapisan ini memisahkan media korosif dari permukaan Cu sehingga mencapai efek penghambatan korosi yang optimal dan efektif. Perhitungan kimia kuantum dilakukan pada struktur TPD untuk molekul mencapai optimal dalam menentukan distribusi awan elektron pada orbital molekul terisi tertinggi (HOMO), orbital molekul kosong terendah (LUMO), dan elektrostatis potensial (ESP), seperti yang ditunjukkan pada Gambar 5. Parameter kimia kuantum yang diperoleh dari perhitungan DFT diperlihatkan dalam Tabel 4.



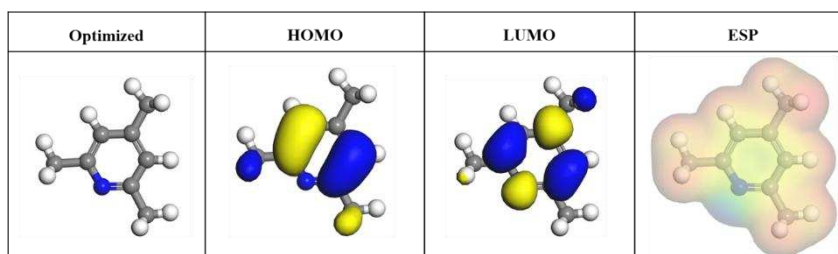
Gambar 4. Struktur senyawa TPD

Dari Gambar 5 hasil pengamatan bahwa distribusi densitas muatan HOMO dan LUMO molekul inhibitor korosi menunjukkan kesamaan. HOMO terdistribusi di sekitar kelompok C-H dan C=C, sedangkan LUMO terdistribusi di hampir senyawa 2,4,6-Trimethylpyridine (TPD).

Parameter kimia kuantum memainkan peran penting dalam menjelaskan kinerja penghambatan korosi inhibitor. Molekul inhibitor korosi dengan nilai E_{HOMO} yang lebih tinggi memiliki kemampuan donor elektron yang lebih kuat, sehingga memungkinkan kemampuan menempel/teradsorpsi lebih baik pada permukaan logam. Di sisi lain, keselarasan LUMO dengan keadaan donor permukaan meningkatkan interaksi penerima elektron. Pertukaran elektron dua arah ini memperkuat stabilitas kimia TPD pada permukaan Cu [29]. Nilai celah energi (ΔE) menunjukkan reaktivitas untuk adsorpsi kimia pada molekul inhibitor dengan permukaan logam, ini mengindikasikan kinerja penghambatan korosi yang lebih baik [30]. Kekerasan (η) dan kelunakan (σ) adalah parameter penting yang mengukur reaktivitas dan stabilitas molekul inhibitor korosi yang teradsorpsi pada permukaan logam [31]. Nilai kekerasan pada TPD

menunjukkan bahwa senyawa ini dapat diasumsikan memiliki stabilitas yang baik dan struktur elektronnya tahan terhadap deformasi saat berinteraksi dengan media korosif. Selain itu, nilai kekerasan dapat

berkorelasi dengan molekul untuk dapat menghambat korosi melalui mekanisme yang tidak bergantung pada ikatan kimia yang kuat, misalnya dengan membentuk penghalang fisik yang stabil melalui proses adsorpsi fisik.



Gambar 5. Senyawa TPD (a) optimasi, (b) HOMO, (c) LUMO, dan (d) ESP

Indeks elektrofilik (ω) merupakan parameter penting yang menggambarkan kemampuan molekul penghambat korosi untuk menarik elektron, sedangkan nukleofilik (ϵ) merupakan kebalikan dari indeks elektrofilik [32]. Indeks elektrofilik TPD ditemukan tinggi, menunjukkan bahwa senyawa ini cenderung menerima elektron dari permukaan logam dan membentuk ikatan koordinasi yang kuat, hal ini dihubungkan dengan sifat *chemisorption*. Secara keseluruhan, kekerasan global dan indeks elektrofilik TPD menunjukkan bahwa senyawa ini berfungsi sebagai inhibitor korosi tipe campuran.

Molekul inhibitor korosi dengan nukleofilitas yang lebih tinggi dibandingkan indeks elektrofilik dan nilai elektronegativitas (χ) tinggi dapat berfungsi sebagai inhibitor berkinerja tinggi untuk mencegah korosi logam. $\Delta N > 0$ menunjukkan transfer elektron dari molekul inhibitor ke logam, ini menggambarkan bagaimana efek penghambatan korosi melalui proses transfer yang berkesinambungan antara adsorbat dengan adsorben. Sebaliknya, transfer elektron dari logam ke molekul inhibitor korosi terjadi ketika $\Delta N < 0$ [33].

Tabel 4. Parameter perhitungan DFT

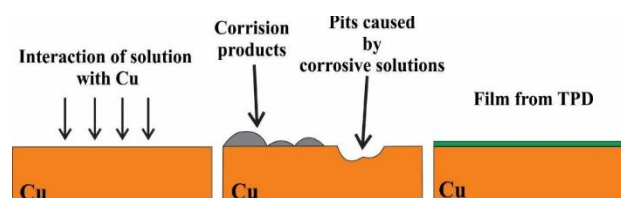
E_{HOMO} (eV)	E_{LUMO} (eV)	ΔE (eV)	I (eV)	A (eV)	χ (eV)	η (eV)	σ (eV ⁻¹)	ϵ (eV)	ω (eV)	ΔN
-6.45	-0.34	6.12	6.45	0.34	3.39	3.06	0.33	0.53	1.88	-0.18

Berdasarkan hasil perhitungan DFT dalam tabel 4, nilai ΔN untuk molekul TPD lebih kecil dari 0, menunjukkan bahwa molekul TPD bertindak sebagai penerima elektron, dimana TPD berinteraksi dengan atom Cu untuk membentuk ikatan dan menerima elektron dari Cu. Hal ini dapat berkontribusi pada *chemisorption*.

Mekanisme inhibitor TPD

Gambar 6 menggambarkan mekanisme penghambatan senyawa TPD pada Cu dalam larutan H_2SO_4 1M. Proses adsorpsi dari senyawa TPD pada permukaan logam terjadi melalui interaksi *chemisorption* dan *physisorption*, seperti yang ditunjukkan oleh energi bebas (ΔG_{ads}). Atom N pada senyawa TPD dapat berperan sebagai situs adsorpsi sehingga memungkinkan molekul/senyawa menghambat korosi dengan cara menempel secara *chemisorpsi* pada permukaan Cu. Hal ini terjadi melalui pembentukan ikatan ligan dan orbital kosong pada situs logam aktif, menghasilkan ikatan kompleks yang stabil. Selain itu, dalam kondisi asam, atom N yang terikat pada kelompok amida dalam molekul TPD memiliki elektron pasangan bebas yang memungkinkan molekul tersebut memperoleh proton dari lingkungan yang dimana dapat membuat atom nitrogen menjadi bermuatan positif.

Selanjutnya, molekul-molekul bermuatan positif ini tertarik ke permukaan pelat tembaga melalui tarikan elektrostatis atau gaya *Van der Waals* yang secara bertahap menempel pada permukaan logam sehingga menghasilkan adsorpsi awal molekul pelindung korosi [34]. Pada tahap ini, lapisan pelindung terbentuk yang berperan sebagai lapisan yang kuat untuk memisahkan permukaan Cu dari lingkungan korosif dalam larutan H_2SO_4 dan secara signifikan menghambat pelarutan logam anodik dan evolusi hydrogen katodik.



Gambar 6. Sketsa Mekanisme Inhibitor

KESIMPULAN

Dalam penelitian ini, 2,4,6-Trimethylpyridine (TPD) sebagai inhibitor korosi diteliti. Kombinasi teknik eksperimental, karakterisasi, dan kimia kuantum

digunakan untuk mengevaluasi secara komprehensif sifat penghambatan korosi Cu dalam larutan H₂SO₄ 1M. Data saat ini menyoroti sifat anti-korosi inhibitor ini dan menunjukkan bahwa mereka merupakan kandidat terbaik untuk mengendalikan korosi logam.

1. Penelitian penurunan berat dan PDP menunjukkan bahwa TPDP merupakan inhibitor korosi yang sangat efektif untuk Cu dalam larutan H₂SO₄ 1M. Efisiensi penghambatan korosi mencapai lebih dari 85% pada konsentrasi 200 ppm dan 300 ppm.
2. Analisis adsorpsi isothermal menunjukkan bahwa inhibitor bertindak menghambat korosi dengan 2 proses adsorpsi yaitu adsorpsi fisik dan adsorpsi kimia
3. Pengujian FTIR mengkonfirmasi bahwa gugus fungsi seperti N–H, C–N, C–H, C=C berpotensi untuk dapat berinteraksi dengan permukaan logam sehingga membentuk lapisan pelindung yang dapat mengurangi reaksi korosi melalui ikatan kimia, misalnya ikatan antara Cu–N
4. Studi kimia kuantum mengungkap struktur molekul, reaktivitas, dan perilaku adsorpsi inhibitor. Hasil perhitungan tidak hanya mengonfirmasi kinerja penghambatan molekul yang tinggi tetapi juga memberikan validasi yang baik terhadap pengamatan eksperimental.

REFERENSI

- [1] Y. Zhang, B. Tan, X. Zhang, L. Guo, and S. Zhang, "Synthesized carbon dots with high N and S content as excellent corrosion inhibitors for copper in sulfuric acid solution," *J. Mol. Liq.*, vol. 338, p. 116702, 2021, doi: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.116702>.
- [2] W. Zeng, W. Li, B. Tan, J. Liu, and J. Chen, "A research combined theory with experiment of 2-Amino-6-(Methylsulfonyl)Benzothiazole as an excellent corrosion inhibitor for copper in H₂SO₄ medium," *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.*, vol. 128, pp. 417–429, 2021, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2021.08.032>.
- [3] X. Zhou *et al.*, "Symphyotrichum subulatum (Michx.) G. L. Nesom extract as a green and high effective corrosion inhibitor for Cu in 0.5 M H₂SO₄ solution," *Mater. Today Commun.*, vol. 42, Jan. 2025, doi: [10.1016/j.mtcomm.2024.111254](https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2024.111254).
- [4] M. Rbaa *et al.*, "New Epoxy sugar based glucose derivatives as eco friendly corrosion inhibitors for the carbon steel in 1.0 M HCl: Experimental and theoretical investigations," *J. Alloys Compd.*, vol. 833, p. 154949, 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.154949>.
- [5] A. Jmiai *et al.*, "The effect of the two biopolymers 'sodium alginate and chitosan' on the inhibition of copper corrosion in 1 M hydrochloric acid," *Mater. Today Proc.*, vol. 22, pp. 12–15, 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2019.08.057>.
- [6] W. Xu, J. Wei, Z. Yang, P. Xu, and Q. Yu, "Feasibility and corrosion inhibition efficacy of zeolite-supported lauric acid imidazoline as corrosion inhibitor in cementitious mortar," *Constr. Build. Mater.*, vol. 250, p. 118861, 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2020.118861>.
- [7] A. Kokalj, C. Xie, I. Milošev, and D. Crespo, "How relevant are molecular electronic parameters for predicting corrosion inhibition efficiency: imidazoles as corrosion inhibitors of Cu/Zr materials in NaCl solution," *Corros. Sci.*, vol. 193, p. 109900, 2021, doi: <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2021.109900>.
- [8] N. Timoudan *et al.*, "Influence of N2, N6-bis((3,5-dimethyl-1h-pyrazol-1-yl)methyl) pyridine-2,6-diamine on C35E steel corrosion in 1 M HCl medium: Experimental and theoretical studies," *J. Dispers. Sci. Technol.*, vol. 46, no. 12, pp. 1827–1844, Oct. 2025, doi: [10.1080/01932691.2024.2376691](https://doi.org/10.1080/01932691.2024.2376691).
- [9] A. Marzaq *et al.*, "Evaluation of imidazolium ionic liquids as green corrosion inhibitors for carbon steel in HCl solution," *Surfaces and Interfaces*, vol. 65, p. 106513, 2025, doi: <https://doi.org/10.1016/j.surf.2025.106513>.
- [10] A. K. Singh, "Understanding of corrosion inhibition behavior of expired isoniazid modified benzothiazole 2-carboxaldehyde at mild steel/0.5 M H₂SO₄ interface," *Mater. Chem. Phys.*, vol. 319, p. 129323, 2024, doi: <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2024.129323>.
- [11] G. Gao *et al.*, "Two novel triazine-based quaternary ammonium salt Gemini surfactants as potential corrosion inhibitors for carbon steel in a sulfate-reducing bacteria solution: Experimental and theoretical studies," *Heliyon*, vol. 10, no. 23, p. e40385, 2024, doi: <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e40385>.
- [12] X. Li, D. Zhang, Z. Liu, Z. Li, C. Du, and C. Dong, "Materials science: Share corrosion data," *Nature*, vol. 527, no. 7579, pp. 441–442, 2015, doi: [10.1038/527441a](https://doi.org/10.1038/527441a).
- [13] M. B. Pial and M. A. Islam, "The effectiveness of natural corrosion inhibitors in corrosive media," *Results in Surfaces and Interfaces*, vol. 19, p. 100516, 2025, doi: <https://doi.org/10.1016/j.rsufi.2025.100516>.
- [14] S. Hidayatullah, A. M. Sulaiman, and E. N. Iftitah, "Durio Zibethinus Extract Performance as Corrosion Inhibitor in Simulated Seawater," *Mechanics Exploration and Material Innovation*,

- vol. 1, no. 1, pp. 27–34, Jan. 2024, doi: 10.21776/ub.memi.2024.001.01.4.
- [15] F. Gapsari, S. Hidayatullah, P. Hadi Setyarini, K. A. Madurani, and H. Hermawan, "Effectiveness of a fish scales-derived chitosan coating for corrosion protection of carbon steel," *Egyptian Journal of Petroleum*, vol. 31, no. 1, pp. 25–31, Mar. 2022, doi: 10.1016/j.ejpe.2022.02.001.
- [16] Sheetal *et al.*, "A Review of Electrochemical Techniques for Corrosion Monitoring – Fundamentals and Research Updates," *Crit. Rev. Anal. Chem.*, vol. 55, no. 1, pp. 161–186, Jan. 2025, doi: 10.1080/10408347.2023.2267671.
- [17] A. Dehghani, A. H. Mostafatabar, G. Bahlakeh, and B. Ramezanzadeh, "A detailed study on the synergistic corrosion inhibition impact of the Quercetin molecules and trivalent europium salt on mild steel; electrochemical/surface studies, DFT modeling, and MC/MD computer simulation," *J. Mol. Liq.*, vol. 316, p. 113914, 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.113914>.
- [18] N. S. Abdelshafi, M. A. Ibrahim, A.-S. Badran, and S. A. Halim, "Experimental and theoretical evaluation of a newly synthesized quinoline derivative as corrosion inhibitor for iron in 1.0 M hydrochloric acid solution," *J. Mol. Struct.*, vol. 1250, p. 131750, 2022, doi: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.131750>.
- [19] N. A. Wazzan, "DFT calculations of thiosemicarbazide, arylisothiocyanates, and 1-aryl-2,5-dithiohydrazodicarbonamides as corrosion inhibitors of copper in an aqueous chloride solution," *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, vol. 26, pp. 291–308, Jun. 2015, doi: 10.1016/j.jiec.2014.11.043.
- [20] M. P. Asfia, M. Rezaei, and G. Bahlakeh, "Corrosion prevention of AISI 304 stainless steel in hydrochloric acid medium using garlic extract as a green corrosion inhibitor: Electrochemical and theoretical studies," *J. Mol. Liq.*, vol. 315, p. 113679, 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.113679>.
- [21] A. Berisha *et al.*, "Going green: Stachys scardica H. leaves extract derived from supercritical CO₂ extraction as an effective corrosion inhibitor for mild steel in 1 M HCl media," *Chem. Pap.*, vol. 77, p. 6567, 2023.
- [22] H. Ouici *et al.*, "Adsorption and corrosion inhibition properties of 5-amino 1,3,4-thiadiazole-2-thiol on the mild steel in hydrochloric acid medium: Thermodynamic, surface and electrochemical studies," *Journal of Electroanalytical Chemistry*, vol. 803, pp. 125–134, 2017, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2017.09.018>.
- [23] F. Gapsari *et al.*, "Analysis of corrosion inhibition of Kleinhovia hospita plant extract aided by quantification of hydrogen evolution using a GLCM/SVM method," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 48, no. 41, pp. 15392–15405, May 2023, doi: 10.1016/j.ijhydene.2023.01.067.
- [24] S. Z. Salleh *et al.*, "Plant extracts as green corrosion inhibitor for ferrous metal alloys: A review," *J. Clean. Prod.*, vol. 304, p. 127030, 2021, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.127030>.
- [25] G. Khan *et al.*, "Electrochemical investigation on the corrosion inhibition of mild steel by Quinazoline Schiff base compounds in hydrochloric acid solution," *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 502, pp. 134–145, 2017, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2017.04.061>.
- [26] F. Gapsari *et al.*, "Efficacy of Andrographis paniculata leaf extract as a green corrosion inhibitor for mild steel in concentrated sulfuric acid: Experimental and computational insights," *Results in Surfaces and Interfaces*, vol. 18, Jan. 2025, doi: 10.1016/j.rsufi.2024.100361.
- [27] J. Wang *et al.*, "Corrosion inhibition effect of sycamore leaf extract on copper in H₂SO₄ solution," *Journal of Materials Research and Technology*, vol. 26, pp. 6689–6702, 2023, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.09.067>.
- [28] Y. Wang, Y. Qiang, H. Zhi, B. Ran, and D. Zhang, "Evaluating the synergistic effect of maple leaves extract and iodide ions on corrosion inhibition of Q235 steel in H₂SO₄ solution," *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, vol. 117, pp. 422–433, 2023, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2022.10.030>.
- [29] M. Goyal, H. Vashist, S. Kumar, I. Bahadur, F. Benhiba, and A. Zarrouk, "Acid corrosion inhibition of ferrous and non-ferrous metal by nature friendly Ethoxycarbonylmethyltriphenylphosphonium Bromide (ECMPB): Experimental and MD simulation evaluation," *J. Mol. Liq.*, vol. 315, p. 113705, 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.113705>.
- [30] H. Haddouchy *et al.*, "Computational study and experimental validation of corrosion inhibitors based on a vanillin-modified eugenol structure on E24 carbon steel in an acidic environment," *J. Mol. Liq.*, vol. 433, p. 127886, 2025, doi: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2025.127886>.
- [31] H. Lgaz, R. Salghi, K. Subrahmanya Bhat, A. Chaouiki, Shubhalaxmi, and S. Jodeh, "Correlated experimental and theoretical study on inhibition behavior of novel quinoline derivatives for the corrosion of mild steel in hydrochloric acid

- solution," *J. Mol. Liq.*, vol. 244, pp. 154–168, 2017, doi: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2017.08.121>.
- [32] Z. Shariatnia and A. Ahmadi-Ashtiani, "Corrosion inhibition efficiency of some phosphoramidate derivatives: DFT computations and MD simulations," *J. Mol. Liq.*, vol. 292, p. 111409, 2019, doi: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.111409>.
- [33] N. Yilmaz, A. Fitoz, Ü. Ergun, and K. C. Emregül, "A combined electrochemical and theoretical study into the effect of 2-((thiazole-2-ylimino)methyl)phenol as a corrosion inhibitor for mild steel in a highly acidic environment," *Corros. Sci.*, vol. 111, pp. 110–120, Oct. 2016, doi: [10.1016/j.corsci.2016.05.002](https://doi.org/10.1016/j.corsci.2016.05.002).
- [34] M. Shao, Z. Fang, M. Cheng, L. Fu, K. Liao, and A. Chang, "Research on the corrosion inhibition performance and mechanism of pyrimidine quaternary ammonium salt," *Anti-Corrosion Methods and Materials*, vol. 71, no. 6, pp. 663–675, Jul. 2024, doi: [10.1108/ACMM-04-2024-3006](https://doi.org/10.1108/ACMM-04-2024-3006).