

# Studi Komputasi Daidzein, Galangin, Genistein, Naringenin sebagai Inhibitor Korosi Besi dengan Metode DFT dan Membandingkannya dengan Luteolin

Yeni Stiadi <sup>a,\*</sup>, Muhammad Ilham <sup>a,b</sup>, Emriadi <sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Laboratorium Elektro/Fotokimia, Departemen Kimia FMIPA, Universitas Andalas

<sup>b</sup>Laboratorium Komputasi, Departemen Kimia FMIPA, Universitas Andalas

\*Corresponding author: [yenistiadi@sci.unand.ac.id](mailto:yenistiadi@sci.unand.ac.id)

## Abstract

Corrosion inhibitors of daidzein, galangin, genistein, naringenin and luteolin compounds have been studied using the Density Functional Theory (DFT) method with the basis set B3LYP/6-31G using the Gaussian program. To prevent corrosion, organic inhibitors are needed which are safe for the environment. Therefore, researchers are looking for other organic inhibitors that have the potential to prevent corrosion. The calculated quantum chemical parameters are  $E_{\text{HOMO}}$ ,  $E_{\text{LUMO}}$ , gap energy ( $\Delta E$ ), ionization potential (I), electron affinity (A), electronegativity (X), hardness ( $\eta$ ), softness ( $\sigma$ ), electrophilicity ( $\omega$ ), nucleophilicity ( $\epsilon$ ), mulliken charge density, back-donation energy ( $E_{\text{b-d}}$ ), electron transfer ( $\Delta N$ ), adsorption energy ( $E_{\text{ads}}$ ), and bond energy ( $E_{\text{binding}}$ ). Theoretical calculations show that naringenin is a good inhibitor compared to other compounds so that it can be used as an alternative organic inhibitor to replace luteolin. In this research, naringenin is a compound that has the potential as an inhibitor as seen from the structure and parameter calculations that have been carried out, so that naringenin can be used as an organic inhibitor to replace luteolin. The theoretical order of increasing inhibition is naringenin > genistein > galangin > daidzein. This theoretical study will greatly contribute to the experimental research of organic inhibitors because the theoretical increase in inhibition is already known.

## Keywords

Corrosion inhibition  
Organic inhibitor  
DFT

## 1. Pendahuluan

Korosi merupakan masalah serius bagi industri karena menyebabkan kerusakan mesin sehingga menimbulkan pembengkakan anggaran terhadap biaya produksi. Oleh karena itu banyak peneliti yang mengembangkan metode pencegahan korosi [1-2]. Ada berbagai macam metode untuk mencegah terjadinya korosi yaitu elektroplating, perlindungan katodik atau anodik dan penambahan inhibitor korosi [3-4]. Penambahan inhibitor korosi adalah salah satu metode untuk mencegah terjadinya korosi yang efektif, efisien dan ekonomis [3,5,6].

Inhibitor korosi ialah senyawa yang ditambahkan dalam jumlah kecil untuk mencegah terjadinya reaksi korosi dalam media asam/basa secara efisien [3]. Inhibitor dibagi menjadi dua macam, yaitu inhibitor organik dan inhibitor anorganik [7]. Inhibitor dapat mencegah terjadinya korosi secara ideal apabila memiliki heteroatom (O,N,S,P), pasangan elektron bebas, ikatan  $\pi$ , dan ikatan rangkap yang akan teradsorpsi pada permukaan logam [8].

Kemampuan suatu senyawa sebagai inhibitor dapat diuji dengan cara eksperimental maupun teoritis. Penelitian secara eksperimental memiliki keuntungan yaitu dapat menjelaskan mekanisme inhibisi korosi yang terjadi, sedangkan kerugiannya ialah membutuhkan biaya yang besar dan waktu yang lama untuk memperoleh hasil yang diinginkan. Oleh karena itu, perkembangan teknologi hardware dan software membuka peluang untuk melakukan penelitian kimia teori pada penelitian inhibisi korosi. Perhitungan kimia komputasi digunakan untuk memprediksi kemampuan inhibisi korosi suatu senyawa sebelum dilakukan penelitian secara eksperimental di laboratorium [8]. Beberapa hasil penelitian yang telah dilaporkan yaitu studi komputasi potensi inhibisi korosi senyawa *4-methyl-4H-1,2,4-triazole-3-thiol*, *2-mercaptosuccinic acid* [9], dan studi komputasi inhibisi korosi dari senyawa *(e)-3-(2-p-tolyldiazonyl)-I-nitrosophthalen-2-ol* [10]. Pada penelitian yang telah dilaporkan peneliti mencoba merekayasa senyawa untuk mendapatkan inhibitor korosi yang efisien yang nantinya akan dapat disintesis secara massal. Hal ini memperkuat fakta

bahwa perhitungan kimia kuantum berperan penting dalam penentuan inhibisi korosi [11].

*Density Functional Theory* (DFT) merupakan salah satu metode kimia komputasi yang sering digunakan pada perhitungan parameter kimia kuantum. Metode ini berperan penting pada perhitungan kimia kuantum karena dapat memberikan parameter dasar yang akurat untuk suatu molekul [12]. Metode ini dapat digunakan untuk mengilustrasikan pentingnya struktur dari suatu senyawa dan efisiensi adsorpsi inhibitor pada permukaan logam [11,13].

Senyawa flavonoid dapat diekstrak menggunakan pelarut etanol [14]. Senyawa daidzen dan genistein merupakan senyawa golongan flavonoid yang dapat diekstrak dari tumbuhan famili polong (*Fabaceae*), galangin dapat diekstrak dari tumbuhan famili jahe (*Zingiberaceae*), sedangkan naringenin dapat diekstrak dari tumbuhan famili jeruk (*Rutaceae*). Senyawa ini memiliki heteroatom (O), pasangan elektron bebas, ikatan  $\pi$ , dan ikatan rangkap dalam struktur molekulnya [8]. Apabila senyawa memiliki semua kriteria di atas dapat diprediksi bahwa senyawa tersebut dapat digunakan sebagai inhibitor organik. Dari penelusuran literatur, senyawa ini belum pernah diteliti sebagai inhibitor korosi secara eksperimen maupun komputasi, oleh karena itu untuk memprediksi kemampuan dari senyawa tersebut dilakukanlah penelitian secara komputasi dengan menggunakan metode DFT basis set B3LYP/6-31G.

Parameter yang diperoleh dari hasil optimasi ialah  $E_{\text{HOMO}}$  (*Highest Occupied Molecular Orbital*),  $E_{\text{LUMO}}$  (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*), energi total ( $E_{\text{total}}$ ). Dari nilai  $E_{\text{HOMO}}$  dan  $E_{\text{LUMO}}$  yang telah diperoleh kemudian dapat dihitung nilai energi celah ( $\Delta E$ ), potensial ionisasi (I), afinitas elektron (A), elektronegativitas (X), *hardness* ( $\eta$ ), *softness* ( $\sigma$ ), elektrofilitas ( $\omega$ ), nukleofilitas ( $\epsilon$ ), transfer elektron ( $\Delta N$ ) [15], kerapatan muatan muliken, energi *back-donation* ( $E_{\text{b-d}}$ ). Kemudian energi total yang telah didapatkan digunakan untuk menghitung nilai energi adsorpsi ( $E_{\text{ads}}$ ) dan energi ikatan ( $\Delta E_{\text{binding}}$ ) [16]. Parameter di atas digunakan untuk menentukan kemampuan inhibisi korosi, karena parameter di atas dapat menentukan kereaktifan suatu senyawa. Parameter lain yang dapat diperoleh ialah momen dipol, namun parameter ini masih menjadi perdebatan dikarenakan tidak dapat memberikan penjelasan yang baik tentang kemampuan suatu senyawa sebagai inhibitor korosi [17].

## 2. Bahan dan Metode

### 2.1. Molekul yang diamati

Struktur molekul yang dianalisis dalam penelitian ini ialah senyawa daidzein, galangin, genistein, naringenin dan luteolin.

### 2.2. Peralatan dan Molekul yang diamati

#### 2.2.1 Peralatan

Pada penelitian ini, menggunakan peralatan komputer pada prosesor intel® Core™ Intel Core i5-7200U, 2,50GHz, memori 8GB, dan perangkat lunak (*software*) yang digunakan Windows™ 2010 dan Gaussian™ 016 untuk mengoptimasi senyawa daidzein, galangin, genistein, naringenin dan luteolin.

### 2.3. Prosedur Penelitian

#### 2.3.1 Penggambaran Struktur Molekul

Menggambar struktur molekul senyawa daidzein, galangin, genistein, naringenin dan luteolin menggunakan *Gaussian basis set* B3LYP/6-31G.

1. Diklik dua kali Gaussian View, akan muncul dua jendela aktif, yaitu jendela Gaussian View dan Gaussian New.
2. Diklik menu ring fragment, sampai muncul kotak dialog ring fragment, lalu pilih senyawa benzena dan diklik sampai muncul kotak dialog element fragment setelah itu diklik unsur C.
3. Pindahkan unsur C ke jendela aktif Gaussian New dengan cara mengklik pada jendela Gaussian New.
4. Diklik modify bond pada jendela aktif sehingga muncul C-C linear dan dibuat gambar sampai terbentuk struktur benzen atau senyawa luteolin.
5. Untuk menghapus substituen diklik delete atom sedangkan untuk menambahkan substituen diklik add valance/element fragment (pilih atom yang ingin ditambahkan).

#### 2.3.2 Optimasi Geometri Molekul

Langkah-langkah yang diperlukan untuk menjalankan perhitungan pada program:

1. Menu *calculate* diklik, lalu pilih *Gaussian Calculation Setup*.
2. Pada *job type* diklik opt+freq, kemudian pada menu method pilih *groundstate*, DFT, *default spin*, B3LYP dan *basis set* 6-31G.
3. Diklik submit, kemudian file disimpan dalam bentuk file.gft
4. Setelah perhitungan selesai akan muncul jendela *Gaussian job has complete*, kemudian diklik yes

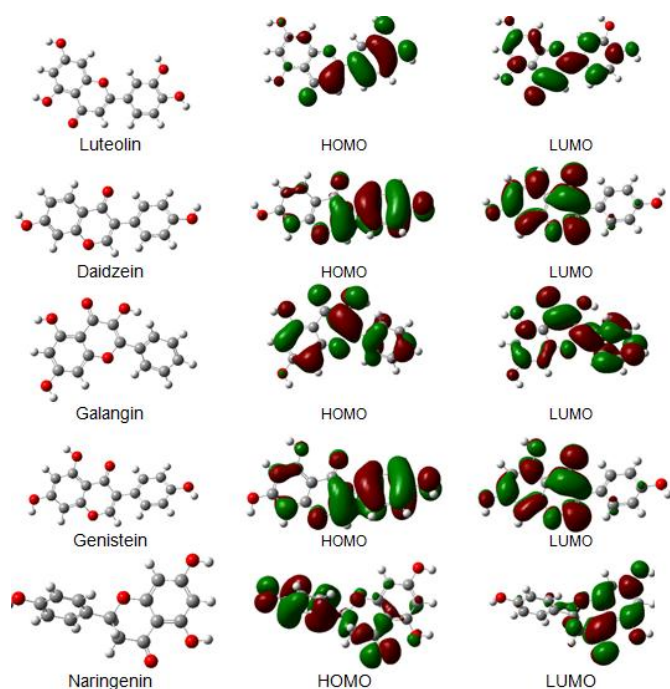
## 2.4 Membaca Luaran Data

Luaran data hasil optimasi adalah nilai  $E_{\text{HOMO}}$ ,  $E_{\text{LUMO}}$ , energi total, momen dipol, kerapatan muatan muliken yang dapat disesuaikan dengan kebutuhan penelitian. Nilai-nilai yang didapatkan digunakan untuk menghitung nilai energi celah ( $\Delta E$ ), momen dipol ( $\mu$ ), potensial ionisasi ( $I$ ), afinitas elektron ( $A$ ), elektronegativitas ( $\chi$ ), *hardness* ( $\eta$ ), *softness* ( $\sigma$ ), elektrofilitas ( $\omega$ ), nukleofilisitas ( $\epsilon$ ), energi *back-donation* ( $\Delta E_{\text{b-d}}$ ), transfer elektron ( $\Delta N$ ), energi adsorpsi ( $E_{\text{ads}}$ ), energi ikatan ( $E_{\text{binding}}$ ).

## 3. Hasil dan Diskusi

### 3.1 Parameter Kimia Kuantum Senyawa Inhibitor

Pada optimasi geometri senyawa daidzein, galangin, genistein, naringenin dan luteolin digunakan program Gaussian 16 dengan metode DFT dan basis set B3LYP/6-31G[16,18] untuk mendapatkan struktur molekul yang stabil sehingga didapatkan distribusi kerapatan elektron orbital HOMO dan LUMO seperti pada Gambar 3.1.



**Gambar 3.1** Distribusi kerapatan orbital senyawa inhibitor (atom berwarna; putih = H; merah = O; abu-abu = C) (untuk distribusi HOMO dan LUMO berwarna; merah = anti-bonding; hijau = bonding)

Distribusi kerapatan elektron orbital HOMO dan LUMO digunakan untuk memprediksi posisi adsorpsi pada molekul inhibitor. Distribusi kerapatan elektron orbital HOMO digunakan untuk memprediksi lokasi

adsorpsi molekul inhibitor yang cenderung menyumbangkan elektron ke atom yang kekurangan elektron (logam) [19-21]. Distribusi kerapatan elektron orbital LUMO digunakan untuk memprediksi adsorpsi molekul inhibitor yang cenderung menerima elektron dari permukaan logam[19-21]. Distribusi kerapatan elektron orbital LUMO digunakan untuk memprediksi adsorpsi molekul inhibitor yang cenderung menerima elektron dari permukaan logam[19-21]. Berdasarkan hasil optimasi orbital HOMO dan LUMO diprediksi bahwa senyawa naringenin memiliki sifat kecenderungan dapat menyumbangkan elektron dan juga dapat menerima elektron pada permukaan logam. Naringenin dapat menyumbangkan elektron dikarenakan memiliki tiga buah hidroksi yang berperan menyumbangkan elektron pada permukaan logam, selain dapat menyumbangkan elektron naringenin juga dapat menerima elektron yang datang dari permukaan logam bertujuan untuk menstabilkan elektron yang hilang sehingga terbentuknya ikatan antara naringenin dan permukaan logam.

**Tabel 3.1** Parameter reaktivitas dari senyawa inhibitor menggunakan metode DFT-B3LYP/6-31G

Molekul	$E_{\text{HOMO}}$ (eV)	$E_{\text{LUMO}}$ (eV)	Energi Celah( $\Delta E$ ) (eV)
Luteolin	-5,824868853	-1,700167271	4,124701582
Daidzein	-5,78786137	-1,680030846	4,107830524
Galangin	-5,86949552	-1,68438467	4,18511085
Genistein	-5,715479089	-1,413631397	4,301847692
Naringenin	-6,073853016	-1,342609685	4,731243331

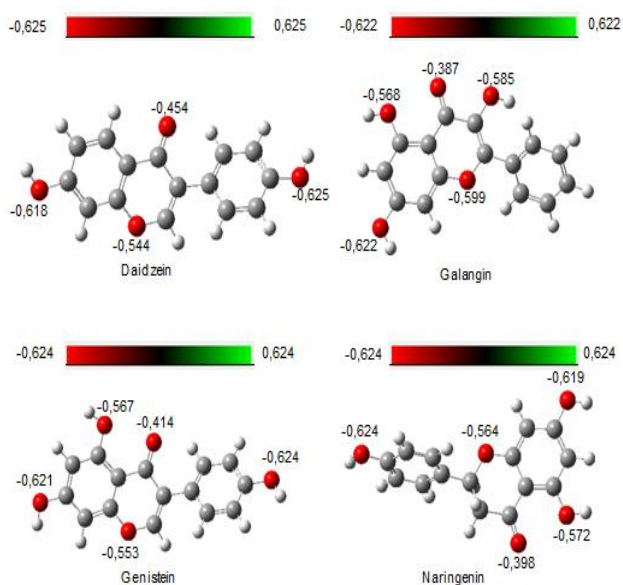
Berdasarkan hasil perhitungan parameter kimia kuantum diketahui bahwa senyawa naringenin merupakan inhibisi korosi yang paling baik dibandingkan senyawa lainnya. Oleh karena itu, senyawa naringenin akan meningkatkan efisiensi inhibisi korosi pada permukaan logam. Hal ini dikarenakan senyawa naringenin memiliki 3 gugus Hidroksi (-OH), memiliki 2 heteroatom (O) yang berikatan pada cincin heterosiklik yang berperan sebagai pendonor elektron pada permukaan logam, juga memiliki 2 substituen hidrogen (H) yang berikatan pada atom C9 berfungsi sebagai pendorong elektron, yang merupakan komponen penting sebagai inhibitor yang baik dibandingkan senyawa lainnya. Dapat disimpulkan bahwa senyawa naringenin merupakan senyawa inhibisi korosi yang paling baik pada penelitian ini dan dapat digunakan sebagai pengganti inhibitor organik senyawa luteolin.

**Tabel 3.2** Nilai parameter kimia kuantum senyawa inhibitor

Parameter	Luteolin	Daidzein	Galangin	Genistein	Naringenin
I (eV)	5,824868853	5,78786137	5,86949552	5,715479089	6,073853016
A (eV)	1,700167271	1,680030846	1,68438467	1,413631397	1,342609685
$\Delta E$ (eV)	4,124701582	4,107830524	4,18511085	4,301847692	4,731243331
X (eV)	3,762518062	3,733946108	3,776940095	3,564565243	3,708231351
$\eta$ (eV)	2,062350791	2,053915262	2,092555425	2,150923846	2,365621666
$\sigma$ (eV <sup>-1</sup> )	0,484883563	0,486875003	0,477884594	0,464916506	0,422721864
$\omega$ (eV)	3,432137304	3,394091712	3,408577931	2,953627137	2,906419896
$\epsilon$ (eV <sup>-1</sup> )	0,291363635	0,294629634	0,293377479	0,33856677	0,344065908
$\Delta N$	1,044253255	1,085919723	1,031620277	1,391711719	1,238662589
$\mu$ (D)	3,116589	2,40588	6,37516	5,320445	2,723644
$\Delta E_{e-d}$ (eV)	-0,515587698	-0,513478816	-0,523138856	-0,537730962	-0,591405416
$E_{tot}$ (kJ/mol)	-2700629,017	-2305840,55	-2503206,54	-2503219,691	-2506399,332

### 3.2 Kerapatan Muatan Mulliken Senyawa Inhibitor

Analisis muatan mulliken menyatakan bahwa heteroatom dengan muatan negatif sebagai daerah pengikat antara inhibitor dengan permukaan logam. Pusat dengan muatan negatif yang lebih tinggi menyumbangkan elektron yang lebih banyak ke orbital-d logam yang kosong [22]. Senyawa daidzein, galangin, genistein dan naringenin memiliki muatan Mulliken/atom yang negatif pada atom O yang sama dengan luteolin. Muatan Mulliken yang dimiliki pada masing-masing senyawa tersebut dapat dilihat pada Gambar 3.2.

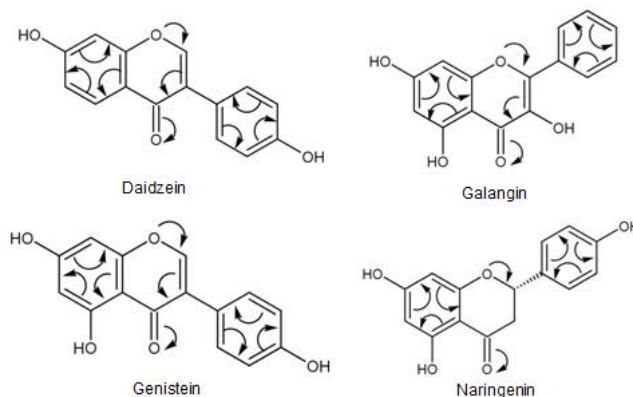


**Gambar 3.2** Kerapatan muatan mulliken senyawa inhibitor.

Dikarenakan senyawa naringenin merupakan senyawa yang memiliki parameter kimia kuantum yang baik sebagai anti korosi, dapat dilihat muatan mulliken

senyawa naringenin pada Gambar 3.2 memiliki pusat aktif pada atom O yang terdiri dari atom O4'(-0,6024), O1(-0,564), O4(-0,619), O6(-0,572), O8(-0,398). Pada atom O4' memiliki muatan atom yang paling negatif. Oleh karena itu, dapat disimpulkan atom O4' memiliki pusat aktif yang paling besar dan memiliki kemampuan untuk berikatan dengan kuat pada permukaan logam[22-23].

### 3.3 Mekanisme Resonansi Elektron Pada Senyawa Inhibitor

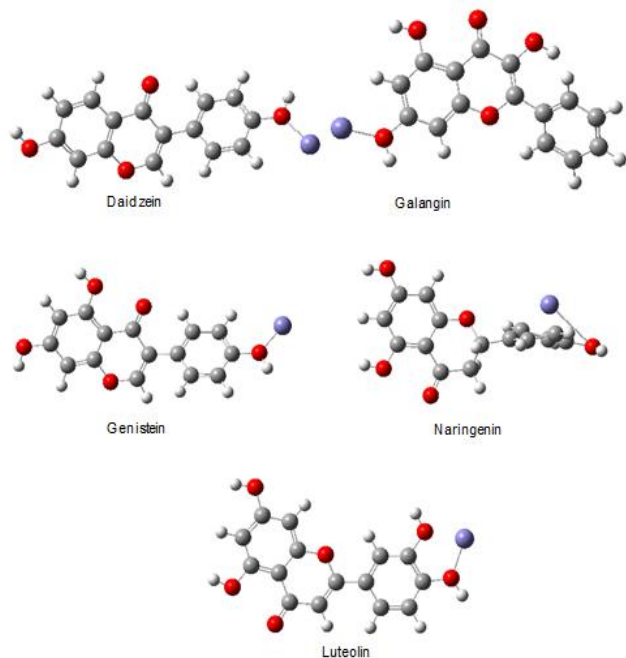


**Gambar 3.3** Mekanisme pergerakan elektron senyawa inhibitor

Pergerakan elektron terjadi akibat pasangan elektron bebas pada heteroatom (O) menarik elektron yang berada di sekitarnya, mengakibatkan elektron berlebih pada atom (O). Sehingga elektron bergerak menuju atom yang kekurangan elektron dan terjadi pergerakan elektron pada cincin benzen yang dinamakan resonansi elektron. Resonansi elektron yang terjadi menyebabkan beberapa titik pada senyawa ada yang memiliki elektron yang berlebih begitu pula ada beberapa titik yang kekurangan elektron sehingga terjadi penumpukan elektron. Penumpukan elektron biasanya terdapat di daerah yang memiliki elektronegatifitas yang tinggi, seperti gugus hidroksi (-OH) dan heteroatom (O). Daerah yang memiliki elektron berlebih akan membentuk ikatan koordinasi dan membentuk lapisan pelindung pada permukaan logam. Permukaan logam yang berikatan menyebabkan logam menjadi stabil dengan cara mempengaruhi kinetika reaksi elektrokimia yang mengatur proses terjadinya korosi, mengakibatkan tidak bereaksi dengan air dan oksigen yang ada di udara sehingga mencegah permukaan logam untuk teroksidasi yang mengakibatkan logam berkarat. Senyawa yang berikatan dengan permukaan logam dan mencegah terjadinya pengkaratan pada permukaan logam disebut inhibitor. Kehadiran ikatan rangkap, heteroatom seperti

oksigen, nitrogen atau sulfur dapat langsung berkorelasi dengan kemampuan efisiensi inhibisi inhibitor dalam menghambat korosi[24].

### 3.4 Adsorpsi Senyawa Inhibitor pada Permukaan Logam

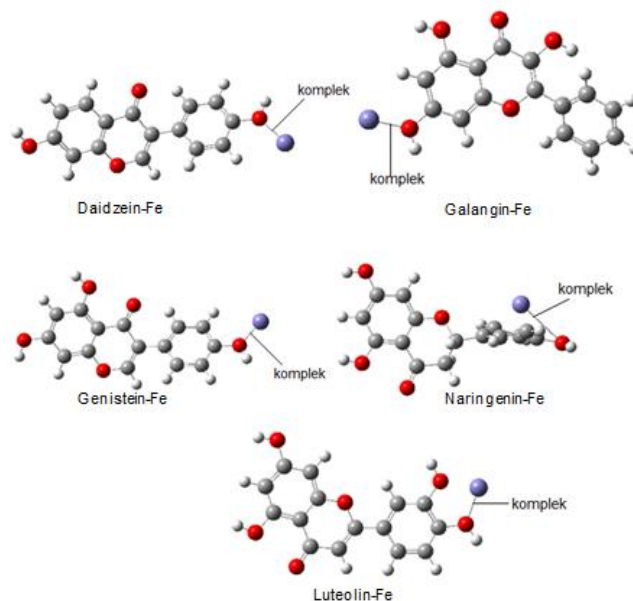


**Gambar 3.4** Penambahan atom Fe pada masing-masing senyawa inhibitor

Efek inhibisi dapat dilihat pada proses adsorpsi inhibitor dengan permukaan logam melalui pembentukan orbital atom antara logam dengan inhibitor. Proses adsorpsi dapat diketahui melalui optimasi geometri senyawa inhibitor dengan atom besi menggunakan metode DFT pada program *Gaussian*. Tujuan optimasi dengan permukaan besi untuk melihat posisi interaksi yang stabil antara besi dengan inhibitor, yang ditandai dengan rendahnya nilai energi interaksi. Pada saat optimasi menggunakan atom besi yang berfungsi untuk menyederhanakan perhitungan [25]. inhibitor terlihat berikatan dengan gugus hidroksi yang memiliki muatan mulliken yang paling negatif. Pada Gambar 3.4 dapat terlihat penambahan Fe yang dilakukan pada masing-masing senyawa, dengan cara atom Fe diikatkan pada atom yang memiliki muatan mulliken terbesar.

Setelah optimasi dilakukan masing-masing senyawa inhibitor yang berikatan dengan atom Fe membentuk kompleks (Daidzein-Fe, Galangin-Fe, Genistein-Fe, Naringenin-Fe, Luteolin-Fe) seperti yang terlihat pada Gambar 3.5. Energi adsorpsi merupakan parameter yang berperan penting dikarenakan dapat menentukan seberapa besar inhibitor dapat teradsorpsi pada

permukaan logam. Semakin negatif energi adsorpsi yang dimiliki oleh senyawa maka semakin besar penyerapan yang terjadi antara inhibitor dengan permukaan logam[26].



**Gambar 3.5** Hasil optimasi masing-masing senyawa inhibitor membentuk kompleks

**Tabel 3.3** Energi adsorpsi dan energi binding dari senyawa inhibitor

Senyawa	$E_{\text{adsorpsi}}$ (kJ/mol)	$E_{\text{binding}}$ (kJ/mol)
Luteolin + Fe	-54013,75621	54013,75621
Daidzein + Fe	-46117,74812	46117,74812
Galangin + Fe	-50065,009	50065,009
Genistein + Fe	-50065,32912	50065,32912
Naringenin + Fe	<b>-5012957,742</b>	<b>5012957,742</b>

Data yang ditampilkan pada Tabel 3.3 digunakan untuk membandingkan energi dari kelima senyawa heterosiklik ini. Nilai  $E_{\text{ads}}$  semuanya bernilai negatif berarti adsorpsi terjadi secara spontan. Semakin rendah nilai  $E_{\text{ads}}$ , maka semakin stabil kompleks yang terbentuk sehingga memiliki efisiensi inhibisi yang lebih baik[27]. Perbandingan energi dari empat senyawa terlihat pada tabel menunjukkan pada senyawa naringenin memiliki nilai  $E_{\text{ads}}$  yang lebih negatif dibandingkan senyawa lainnya. Semakin rendah nilai  $E_{\text{ads}}$  yang dimiliki oleh senyawa maka semakin besar penyerapan yang terjadi antara inhibitor dengan permukaan logam, sehingga terbentuk kompleks lebih stabil yang akan meningkatkan efisiensi inhibisi. Hal ini menunjukan pada senyawa naringenin mampu teradsorpsi ke permukaan logam lebih baik, sehingga akan terbentuk kompleks

lebih stabil yang akan meningkatkan efisiensi inhibisi. Selain energi adsorpsi, energi binding juga mempengaruhi adsorpsi inhibitor dengan permukaan logam. Pada Tabel 3.3 terlihat perbandingan energi binding dari empat senyawa menunjukkan pada senyawa naringenin memiliki nilai yang lebih besar dibandingkan senyawa lainnya. Semakin besar nilai  $E_{\text{binding}}$  yang dimiliki oleh senyawa maka semakin kuat ikatan molekul yang terbentuk sehingga memiliki kompleks yang lebih stabil. Hal ini menunjukkan pada senyawa naringenin memiliki ikatan yang kuat dengan permukaan logam, membentuk kompleks yang lebih stabil sehingga meningkatkan efisiensi inhibisi.

#### 4. Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan kesimpulan bahwa senyawa daidzein, galangin, genistein dan naringenin dapat ditentukan dengan metode DFT ditandai dengan nilai yang telah dijelaskan pada pembahasan. Melalui parameter kimia kuantum nilai inhibisi korosi terbesar terletak pada senyawa naringenin dan juga didukung dengan adanya proses resonansi. Senyawa naringenin merupakan inhibitor korosi yang lebih baik dibandingkan dengan senyawa lainnya. Terlihat adanya adsorpsi dan ikatan antara senyawa naringenin dengan permukaan logam dengan nilai energi adsorpsi yang semakin rendah dan nilai energi ikatan yang semakin besar. Oleh karena itu, naringenin dapat digunakan sebagai alternatif inhibitor organik untuk menggantikan luteolin.

#### Ucapan Terima Kasih

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Laboratorium Foto-Elektrokimia Departemen Kimia, Fakultas MIPA Universitas Andalas.

#### Kontribusi Penulis

Konseptualisasi: Y.S.

Investigasi: Y.S., M.I.

Metodologi: Y.S.

Supervisi: Y.S., E.

Penulisan – Draft asli: Y.S., E., M.I.

#### Konflik Kepentingan

Penulis menyatakan tidak ada konflik kepentingan.

#### Daftar Pustaka

1. Belghiti, M. E.: Applied Surface Science

- Computational Simulation and Statistical Analysis on the Relationship between Corrosion Inhibition Efficiency and Molecular Structure of Some Hydrazine Derivatives in Phosphoric Acid on Mild Steel Surface. *Applied Surface Science* 2019, 491, 707-722.
2. Guo, L.; Safi, ZS.; Kaya, S.; Shi, W.; Tüzün, B.; Altunay, N.; Kaya, C.: Anticorrosive Effects of Some Thiophene Derivatives Against the Corrosion of Iron. *A Computational Study* 2018, 6, 155.
3. Bagga, M. K.; Gadi, R.; Yadav, O. S.; Kumar, R.; Chopra, R.; Singh, G.: Investigation of Phytochemical Components and Corrosion Inhibition Property of Ficus Racemosa Stem Extract on Mild Steel in  $H_2SO_4$  Medium. *Journal of Environmental Chemical Engineering* 2016, 4, 699-707.
4. Phuonga, N. V.; Park, M. S.; Yima, C. D.; You, B. S.; Moon, S.: Corrosion Protection Utilizing Ag Layer on Cu Coated AZ31 Mg Alloy. *Corrosion Science* 2018.
5. Huong, D. G.; Duong, T.; Nam, P. C.: Effect of the Structure and Temperature on Corrosion Inhibition of Thiourea Derivatives in 1,0 M HCL Solution. *Corrosion Science* 2019.
6. Nurudeen; Odewunmia; Umorena, S. A.; Gasema, Z. M.; Ganiyub, S. A.; Muhammad, G.: L-Citrulline: An Active Corrosion Inhibitor Component of Watermelon Rind Extract for Mild Steel in HCL Medium. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers* 2015, 1-9.
7. Kamal, C.; Sethuraman, M. G.: Spirulina Platensis - A Novel Green Inhibitor for Acid Corrosion of Mild Steel. *Arabian Journal of Chemistry* 2012, 5, 155-161.
8. Obi-Egbedi, N. O.; Obot, I. B.; Umoren, S.; Ebenso, E.: Computational Simulation and Statistical Analysis on the Relationship between Corrosion Inhibition Efficiency and Molecular Structure of Some Phenanthroline Derivatives On. *International Journal of Electrochemical Science* 2011, 6, 5649-5675.
9. Mehmeti, V. V.; Berisha, A. R.: Corrosion Study of Mild Steel in Aqueous Sulfuric Acid Solution Using and 2-Mercaptionicotinic Acid-An Experimental and Theoretical Study. *Fronetiers in Chemistry* 2017, 5, 1-12.
10. Amoko, J.; Akinyele, O.; Dare, S.; Oyeneyin, O. E.: Synthesis Characterization and Computational Studies on the Corrosion Inhibitive Potentials of (e)-

- 3-(2-p-Tolyldiazenyl) -1-Nitrosophthalen-2-Ol. *Leonardo Journal of Sciences* 2019, 29-48.
11. Zarrok, H.; Assouag, M.; Zarrouk, A.; Oudda, H.; Hallaoui, A.; Touzani, R.; Allali, M.; Hammouti, B.; El Hezzat, M.; Bouachrine, M.: Quantum Chemical Study on the Corrosion Inhibition of Some Bipyrazoles. *Research Journal of Pharmaceutical, Biological and Chemical Sciences* 2015, 6, 1853–1860.
12. Ramadhani, F; Emriadi; Syukri.: Theoretical Study of Xanthone Derivative Corrosion Inhibitors Using Density Functional Theory (DFT). *Jurnal Kimia Valensi* 2020, 6, 97–105.
13. Obayes, H. R.; Alwan, G. H.; Hameed, A.; Alobaidy, M. J.; Al-Amiery, A. A; Kadhum, A. A. H.: Quantum Chemical Assessment of Benzimidazole Derivatives as Corrosion Inhibitors. *Chemical Central Journal* 2014, 8, 2–9.
14. Anadebe, V. C.; Onukwuli, O. D.; Omotioma, M.; Okafor, N.A.: Experimental, Theoretical Modeling and Optimization of Inhibition Efficiency of Pigeon Pea Leaf Extract as Anti-Corrosion Agent of Mild Steel in Acid Environment. *Materials Chemistry and Physics* 2019, 233, 120–132.
15. Ikpi, M. E.; Abeng, F. E.: Theoretical Study on the Corrosion Inhibitor Potential of Moxifloxacin for API 5L X-52 Steel in Acidic Environment. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science* 2018, 173, 1-7.
16. Guo, L. A; Zaki Safi; Savas Kaya; Wei Shi; Burak Tuzun; Nail Altunay; Cemai Kaya. Anti corrosive of some tiophene derivatives againts the corrosion of iron : A Computational study. *Frontiers in Chemistry* 2017, 6, 155
17. Khaled, K. F.; Amin, M. A.: Computational and Electrochemical Investigation for Corrosion Inhibition of Nickel in Molar Nitric Acid by Piperidines. *Journal Application of Electrochemistry* 2008, 38, 1609-1629.
18. Wulandari, Annisa.; Afrizal.; Emriadi.; Imelda.; E. Mai.: Studi Komputasi Terhadap Struktur, Sifat Antioksidan, Toksisitas dan Skor Obat dari Scopoletin dan Turunannya. *Chempublish Journal*, 2020, 5, 1, 77-92.
19. Obot, I. B.; Macdonald, D. D.; Gasem, Z. M.: Density Functional Theory (DFT) as a powerful tool for designing new organic corrosion inhibitors. Part 1: An overview. *Corrosion Science* 2015,99, 1-30.
20. Udowo, V. M.: Computational Studies of the Corrosion Inhibition Potentials of Quercetin and Coumarin. *Arc Org Inorg Chem* 2018, 2, 2.
21. Khaled, K. F.: Molecular Simulation, Quantum Chemical Calculations and Electrochemical Studies for Inhibition of Mild Steel by Triazoles. *Electrochimica Acta* 2008, 53, 3484–3492.
22. Obot, I.B.; Obi-Egbedi, N.O.: Anti-Corrosive Properties of Xanthone on Mild Steel Corrosion in Sulphuric Acid: Experimental and Theoretical Investigations. *Current Applied Physics*, 2011, 11, 382-392.
23. Xia, Shuwei.; Qiu, Meng.; Yu, Liangmin.; Liu, Fuguo.; Zhao, Haizhou.: Molecular Dynamics and Density Functional Theory Study on Relationship Between Structure of Imidazoline Derivatives and Inhibition Performance. *Corrosion Science*, 2008, 50, 2021–2029.
24. Alibakhshi, E.; Ramezanzadeh, M.; Bahlakeh, G.; Ramezanzadeh, B.; Mahdavian, M.; Motamedi, M.: *Glycyrrhiza glabra* leaves extract as a green corrosion inhibitor for mild steel in 1 M hydrochloric acid solution : Experimental, molecular dynamics, Monte Carlo and Quantum mechanics study. *Journal of Molecular Liquids* 2018, 255, 185-198.
25. Marni, Lidia Gusfi.; Emriadi.; Syukri.; Imelda.: Study on corrosion inhibition of khellin and visnagin compounds in iron using DFT (density functional theory) method. *Jurnal Litbang Industri* 2019, 2, 9, 111 – 118.
26. Hadisaputra, S.; Purwoko, A. A.; Wajdi, F.; Sumarlan, I.; Hamdiani, S.: Theoretical Study of the Substituent Effect on Corrosion Inhibition Performance of Benzimidazole and its Derivatives. *Int. J. Corros* 2019, 8, 673–688.
27. Şahin, M., Gece, G., Karcı, F., and Bilgiç, S. Experimental and theoretical study of the effect of some heterocyclic compounds on the corrosion of low carbon steel in 3.5% NaCl medium. *Journal of Applied Electrochemistry* 2008, 38, 809–815.