

Studi Eksperimen Dan Komputasi Senyawa Organik Sebagai Inhibitor Korosi : A Review

Maidawati^{1*}

¹Fakultas Teknik, Universitas Putra Indonesia “YPTK” Padang,
Jl. Raya Lubuk begalung Padang, SumateraBarat-Indonesia
email: maidawati77@upiypk.ac.id

ABSTRACT

Modeling organic compounds with computational software is an option for researchers before conducting experiments in the laboratory. This helps to understand the mechanism of corrosion inhibition of metals on an atomic and molecular scale. Some of the common computational techniques used are DFT theory, MD and Monte carlo simulations. According to the literature, choosing organic compounds through modeling helps researchers determine the efficiency of the right inhibitor, saving time and money. Another advantage of this computational model is that it can easily determine the active sites/adsorption sites and the orientation of organic compounds. This review discusses indicators of corrosion inhibition contained in several computational models. The mechanism of corrosion inhibition by natural compounds and the types of inhibition of compounds are also discussed through polarization potentiodynamics.

Keywords : Corrosion inhibitors, DFT, MC, Plant Extracts, Computing

ABSTRAK

Pemodelan senyawa organik dengan perangkat lunak komputasi menjadi pilihan bagi para peneliti sebelum melakukan eksperimen di laboratorium. Hal ini membantu memahami mekanisme penghambatan korosi pada logam dalam skala atom dan molekul. Beberapa Teknik umum komputasi yang digunakan adalah teori DFT, simulasi MD dan Monte carlo. Menurut literatur, memilih senyawa organik melalui pemodelan membantu peneliti mengetahui efisiensi inhibitor yang tepat, menghemat waktu dan biaya. Keuntungan lain model komputasi ini adalah dapat dengan mudah menentukan situs aktif/situs adsorpsi dan orientasi senyawa organik. Ulasan ini membahas indikator penghambatan korosi yang terdapat dalam beberapa model komputasi. Mekanisme penghambatan korosi oleh senyawa alam dan tipe penghambatan senyawa juga dibahas melalui potensiodinamik polarisasi.

Kata kunci : Inhibitor korosi, DFT, MC, Ekstrak Tanaman, Komputasi

This work is licensed under Creative Commons Attribution License 4.0 CC-BY International license

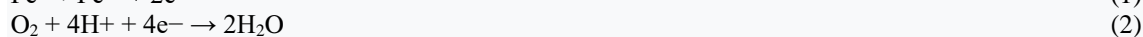
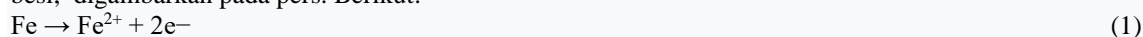


PENDAHULUAN

Degradasi kualitas bahan logam akibat korosi merupakan salah satu masalah kritis yang dialami sebahagian besar industri seperti pabrik kimia, petrokimia, agregat tenaga hidrolik, pembakaran kendaraan, turbin, reactor nuklir dan banyak proyek lainnya[1]. Diperkirakan sekitar 2,5 triliun (sekitar EUR 2,3 triliun) atau sekitar 3 – 4 persen dari produk dunia bruto (GWP) dihabiskan setiap tahunnya untuk mengatasi masalah korosi. China mengalami kerugian secara ekonomi akibat korosi sebesar 2,3 triliun atau 3,3 % dari produk nasional bruto [2].

Baja karbon menjadi pilihan yang menarik untuk digunakan dalam berbagai proses industri karena murah dan sifat mekanik yang menarik. Saat digunakan, baja karbon cenderung mudah mengalami korosi karena kelembaban, udara, asam dan, khususnya garam[3]

Selama proses korosi berlangsung, logam mengalami serangkaian reaksi elektrokimia (reduksi dan oksidasi) yang menyebabkan logam mengalami penurunan kualitas. Proses korosi yang terjadi pada permukaan logam seperti besi, digambarkan pada pers. Berikut:



Ketika logam besi direndam dalam larutan korosif (pers. 1) terjadi perbedaan interaksi elektrostatis pada permukaan logam sehingga logam mengalami oksidasi pada zona anodic. Pada pers. 2, proses oksidasi terjadi dalam suasana asam atau konsentrasi ion H^+ tinggi [4].

Beberapa decade terakhir berbagai usaha telah dilakukan oleh peneliti untuk mengatasi permasalahan korosi diantaranya pemanfaatan inhibitor, perubahan lingkungan korosif, pemilihan material yang tepat, perencanaan desain yang baik dan penerapan metode proteksi anodic dan katodik [5]–[7].

Inhibitor korosi adalah zat kimia yang ditambahkan kedalam media korosif untuk mengurangi laju korosi. Keberadaan senyawa heteroatom yang teradsorpsi pada permukaan logam menjadi konstituen penentu penghambatan laju korosi secara fisika (fisisorpsi) atau secara kimia (kemisorpsi). Saat ini berbagai jenis senyawa organik telah ditemukan berpotensi menjadi inhibitor korosi termasuk ekstrak tanaman, molekul obat, cairan

ionic, surfaktan, polimer, kombinasi dan modifikasi struktur dari dua atau lebih senyawa dan garam anorganik atau polimer nanopartikel. Inhibitor korosi yang ramah lingkungan (green corrosion inhibitors) mengalami perkembangan yang signifikan karena kebergunaan dan kelestariannya serta hemat biaya [8]. Pada umumnya setiap tumbuhan mengandung senyawa fitokimia yang bisa menjadi pusat aktif (adsorpsi) yang akan berperan dalam penghambatan korosi seperti gugus fungsi polar – OH, –HN₂, –COOH, –COOC₂H₅, –CONH₂, –NO₂, –NHMe, –NMe₂, >C = C<, >C = N–, –N = N–, –N = O dst. Pusat hidrofilik yang kaya akan electron teradsorpsi pada permukaan logam sedangkan bagian hidrofobik dari senyawa inhibitor mengapung dalam larutan elektrolit dan menghambat kontakannya dengan permukaan logam [9].

Beberapa metoda eksperimen dan teori analisis telah digunakan para peneliti untuk mempelajari efisiensi inhibisi, mekanisme inhibisi dan struktur molekul inhibitor korosi yang paling efektif dalam menghambat laju korosi. Sebagai contoh metoda kehilangan berat (weight loss), Potensiodinamik polarisasi (PDP), Electrochemical Impedansi Spectroscopy (EIS) dan lain-lain. Metoda teoritis seperti DFT, Quantum mechanical (MQ), MD simulasi dan Monte Carlo simulasi [10].

[11] telah mempelajari efek inhibisi korosi oleh senyawa-senyawa organik kecil dalam medium 1 M HCl menggunakan metoda investigasi elektrokimia, termasuk potensiodinamik polarisasi dan metoda quantum Density Fungsional Theory (DFT). Hasil eksperimen menunjukkan bahwa kehadiran atom-atom yang elektronegatif seperti O, N dan S serta peran cincin aromatic memberi perlindungan pada permukaan logam terhadap ion agresif. Perhitungan menggunakan metoda quantum DFT menunjukkan bahwa energi adsorpsi bernilai negative yang mengindikasikan inhibitor terikat secara kemisorpsi dengan membentuk lapisan pelindung hidrofobik pada permukaan logam, dimana hal ini sesuai dengan data elektrokimia. Penelitian oleh [12] terhadap surfaktan non-ionik berbahan dasar kelapa atau coco monoethanolamide (CMEA) melalui metoda eksperimen dan komputasi diketahui bahwa CMEA dalam lingkungan 1 M HCL memiliki efisiensi inhibisi mencapai 99,01 % dengan konsentrasi 0,6163 mM dan suhu 60⁰C. berdasarkan indicator potensiodinamik polarisasi, CMEA termasuk tipe inhibitor korosi campuran. Artinya pada saat yang bersamaan terjadi proteksi anodic dan katodik pada permukaan logam. Nilai EHOMO and ELUMO of CMEA adalah –7.203 eV and 0.414 eV, ini menunjukkan bahwa tranfer electron inhibitor dari tingkat HOMO ke tingkat LUMO pada atom Fe atom melalui proses kemisorpsi. Metoda DFT dan simulasi Monte Carlo telah digunakan oleh [13] pada surfaktan gemini kationik (CGS) untuk mengevaluasi efek penghambatan korosi pada baja karbon dalam lingkungan keasaman yang tinggi (10% H₂SO₄ dan 15% HCl). Nilai energi adsorpsi dalam H₂SO₄ (-4796.54 kcal mol⁻¹) lebih negative dibandingkan dengan dalam larutan HCl (-3824.25 kcal mol⁻¹) sehingga dapat diasumsikan bahwa molekul CGS teradsorpsi pada antarmuka baja dalam H₂SO₄, membentuk lapisan teradsorpsi yang stabil dan melindungi baja dari korosi, hasil ini sesuai antara hasil percobaan maupun secara komputasi.

Review ini membahas lebih lanjut metoda eksperimen seperti metoda kehilangan berat (weight loss) dan Teknik elektrokimia serta metoda komputasi khususnya DFT, MD dan MC simulasi yang digunakan dalam mengevaluasi efektifitas penghambatan korosi oleh inhibitor senyawa organik terutama yang terdapat dalam tumbuhan untuk bahan logam dalam larutan asam dengan mempertimbangkan parameter-parameter adsorpsi yang terkait.

Me METODOLOGI PENELITIAN

Metoda Evaluasi Inhibitor Korosi

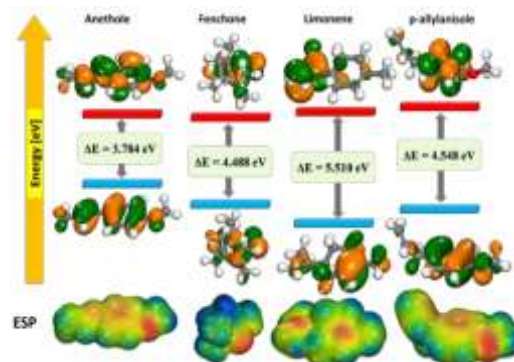
1. Density Functional Theory (DFT)

DFT merupakan salah satu perhitungan kuantum yang digunakan dalam mempelajari efek penghambatan korosi oleh inhibitor. Informasi tentang situs molekuler senyawa yang bertanggung jawab dalam interaksi dengan permukaan logam mampu dijelaskan lebih detail dengan teori ini. Selain itu, DFT ampuh menjelaskan efek penghambatan relative dari serangkaian senyawa yang memiliki struktur yang mirip. Dalam tingkat orbital molekul, DFT bisa menggambarkan situs senyawa yang paling disukai yang bertanggung jawab untuk interaksi dengan substrat logam. Berbagai parameter adsorpsi dalam DFT menggambarkan kekuatan relative dari interaksi logam dengan inhibitor [14]. Metode eksperimental merupakan metoda yang paling banyak dilakukan para peneliti, untuk evaluasi kinerja inhibitor. Namun, metode ini memakan banyak waktu, biaya dan memerlukan instrumentasi kompleks dan membutuhkan ketrampilan laboratorium khusus dari berbagai bidang, seperti sintesis organik, elektrokimia, kimia, dan teknik mesin, serta ilmu material. Selanjutnya, estimasi yang tepat tentang pemahaman pada aspek struktur molekul dari inhibitor korosi, dapat difasilitasi dengan menggunakan teknik komputasi [15]. M. Rbaa et al telah mengevaluasi efek inhibisi korosi dari dua senyawa turunan D-glucose yang ramah lingkungan terhadap baja karbon dalam 1 M HCl. Melalui teknik potensiodinamik polarisasi diketahui bahwa inhibitor ini menyebabkan perubahan nilai slope anodic dan katodik (β_a and β_c) juga nilai E_{corr} menjadi lebih negative yang menunjukkan bahwa inhibitor ini bersifat katodik [16]. Untuk memahami deskripsi molekul

inhibitor yang terlibat dalam penghambatan korosi terhadap logam besi dilakukan optimisasi geometri molekul ini melalui metoda DFT. Beberapa parameter quantum menunjukkan keefektifan senyawa turunan D-glucose sebagai inhibitor. Diantaranya parameter ΔN , secara umum, molekul yang memiliki jumlah electron yang di transfer (ΔN) positif dan tinggi ($\Delta N < 3,6$) menunjukkan molekul ini memiliki daya hambat yang lebih baik. Parameter reaktivitas dan kestabilan molekul dievaluasi bersamaan dengan kekerasan kimia (η) dan keelektronegatifan (χ). Nilai (η) yang tinggi dan nilai (χ) yang rendah menunjukkan tingginya reaktifitas dan kestabilan molekul inhibitor untuk melepaskan electron.

M. En-Nyly et al telah melakukan pengujian terhadap senyawa hydrazone baru yang (N^{\prime} -[(Z)-(4-chlorophenyl)methylidene]-2-(5-methoxy-2-methyl-1H-indol-3-yl)acetohydrazide, yang disingkat dengan HTH. Baja yang dipilih adalah baja karbon dengan lingkungan asam 1.0 mol/L HCl. Hasil polarisasi potensiodinamik membuktikan bahwa HTH termasuk jenis inhibitor campuran (Mixed type inhibitor), pada suhu 303-333 K senyawa mampu melindungi permukaan logam dengan efisiensi inhibisi 89 %. Analisis SEM/EDX juga memperlihatkan terbentuknya lapisan pelindung (protective layer) pada permukaan logam. Energi HOMO dan LUMO yang sesuai dari molekul netral dan molekul HTH terprotonasi masing-masing adalah -5.052 dan -2.74 eV, dan -6.62 eV dan -3.749 eV berarti bahwa kemampuan menyumbangkan elektron dari molekul menurun setelah protonasi sementara kecenderungan penerimaan elektronnya meningkat. Melalui metoda eksperimen dan metoda komputasi quantum (DFT dan MD) dibuktikan bahwa HTH merupakan senyawa inhibitor yang efektif untuk menghambat aju korosi pada logam.[17].

S. El Hajjaji et al, telah menganalisa ekstrak senyawa *Pimpinella Anisum* sebagai inhibitor korosi logam aluminium dalam 1 M HCl menggunakan metoda eksperimen polarisasi, EIS dan metoda komputasi DFT. Data eksperimen menunjukkan pada konsentrasi ekstrak (3 g/L) efisiensi inhibisi mencapai 91.04 %. Senyawa Anise termasuk tipe inhibitor campuran yang dapat diketahui dari nilai E_{corr} dengan kecendrungan arah negative dan positif pada parameter polarisasi potensiodinamik.



Gambar 1. HOMO, LUMO dan ESP dari senyawa dalam ekstrak inhibitor *Pimpinella Anisum* (anethole, fenchone, limonene dan p- allylanisole) [18].

Gambar 1 memperlihatkan molekul orbital dari senyawa ekstrak, dimana HOMO untuk anethole terdistribusi pada cincin pusat dan atom oksigen. untuk limonene, HOMO didistribusikan secara merata ke seluruh sistem dan untuk p-allylanisole, sebagian besar densitas HOMO berada di bagian tengah molekul. Di sisi lain, di anethole LUMO didistribusikan ke seluruh struktur molekul; untuk fenchone, LUMO terkonsentrasi di dekat atom O; untuk limonena, ini difokuskan pada bagian dari gugus metil yang melekat, sedangkan untuk p-alililanol, kerapatan LUMO berpusat di bagian tengah molekul. Nilai HOMO yang signifikan mengacu kepada kemampuan inhibitor untuk menyumbangkan electron. Sedangkan LUMO mewakili kemampuan molekul inhibitor untuk menerima electron kedalam orbital molekul anti ikatan yang kosong [5] artinya molekul inhibitor mengarah pada kemampuan mereka untuk berinteraksi dengan permukaan Al(111) melalui donasi dan penerimaan elektron. Ditambah dengan nilai ΔE yang rendah mengindikasikan kereaktifan dari senyawa inhibitor untuk berikatan dengan logam.

1. Simulasi Molecular Dynamic (MD) dan Monte Carlo (MC)

Metoda teoritis quantum Molecular Dynamic (MD) dan Monte Carlo (MC) memberikan informasi tentang interaksi logam dan inhibitor dalam bentuk energi adsorpsi (E_{ads}). Keuntungan terbesar MD dan MC adalah memberikan orientasi bergambar dari inhibitor korosi pada permukaan logam. Inhibitor dengan orientasi horizontal/datar akan menutupi permukaan logam yang lebih luas sehingga bertindak sebagai inhibitor yang lebih unggul dibandingkan senyawa dengan orientasi vertical. Sedangkan simulasi Monte Carlo (MC) dilakukan untuk

mendukung teori DFT dan MD serta menunjukkan efek lingkungan terhadap kemampuan adsorpsi molekul inhibitor. Bersamaan dengan MD, MC memberikan informasi tentang efektifitas adsorpsi dan mode serta orientasi inhibitor. [9]

Vorobyova et al telah melakukan studi terhadap ekstrak Quebracho tannin (QE) dalam lingkungan netral 3,5 % NaCl. Hasil DFT memberikan informasi tentang interaksi inhibitor dengan logam untuk mengevaluasi energetika adsorpsi dari proses korosi. Untuk menentukan Eads digunakan pers berikut :[19]

$$\Delta E_{ads} = E_{inhibitor/Fe} - (E_{inhibitor} + E_{Fe}) \quad (3)$$

Dimana $E_{inhibitor/Fe}$ adalah energi potensial dari set simulasi yang mengandung inhibitor pada permukaan Fe dan $E_{inhibitor}$ adalah energi potensial inhibitor terisolasi dan E_{Fe} adalah energi potensial dari permukaan Fe yang diisolasi. Hasil penelitian menunjukkan bahwa tannin teradsorpsi secara spontan pada permukaan logam Fe dengan energi -156 kcal/mol sampai -465 kcal/mol.

Sampah bawang merah (Onion waste) telah dievaluasi oleh Das, Chandan et al, untuk melihat efek inhibisinya terhadap baja kualitas broiler (BQ) dalam medium 1 M HCl dan 0,5 M H₂SO₄ menggunakan metoda elektrokimia dan komputasi DFT. Hasil teori DFT menunjukkan nilai E_{HOMO} yang tinggi (-5,744 eV) artinya ada kecenderungan untuk mentransfer electron ke tingkat energi orbital yang lebih rendah atau meningkatkan interaksi antara permukaan logam dan molekul yang menghasilkan adsorpsi molekul yang lebih baik. Sementara itu nilai E_{LUMO} yang lebih kecil (-1,96 eV) artinya molekul mungkin menerima electron dari orbital berenergi lebih tinggi [4]. Beberapa ekstrak senyawa yang digunakan sebagai inhibitor dirangkum dalam tabel 2.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Ekstrak Tanaman sebagai Inhibitor Korosi Hijau

S. Cherrad et al telah melakukan pengujian inhibitor korosi menggunakan ekstrak minyak buah *Cupressus arizonica* (CAFEO) terhadap baja karbon (CS) dalam larutan 1.0 mol/L HCl. Teknik yang digunakan diantaranya Teknik elektrokimia, potensiodinamik polarisasi (PDP), electrochemical impedance spectroscopy (EIS), dan analisa permukaan logam dengan teknik scanning electron microscope (SEM). Analisa PDP membuktikan bahwa ekstrak CAFEO termasuk tipe inhibitor campuran namun lebih dominan tipe inhibitor katodik. Data EIS menunjukkan bahwa resistansi transfer muatan elektroda CS meningkat dari 20,9 Ω cm² menjadi 294,5 Ω cm² dalam larutan HCl dengan konsentrasi inhibitor 0,5 g/L CAFEO pada 298 K, hal ini kenaikan efisiensi inhibisi sebesar 93% [20]

C. F. Nwachukwu et al telah mengevaluasi efektifitas campuran ekstrak Guava dan daun Fluted Pumpkin sebagai inhibitor korosi dalam larutan 0,5 M HCL menggunakan metoda kehilangan berat, FTIR, SEM dan RSM [21]. Hasil penelitian didapatkan efisiensi inhibisi senyawa campuran 93.70%, ekstrak Guava 63.7% dan Fluted Pumpkin 78.14%. Hal ini menunjukkan efisiensi inhibitor senyawa inhibitor bervariasi sesuai dengan variasi lingkungannya karena adanya efek sinergistik antara gugus-gugus fungsi yang terdapat dalam ekstrak.

Ekstrak *apium graveolens* (APG), *punica granatum* (PCG), dan *camellia sinensis* (CLS) telah diteliti oleh R. T. Loto et al menggunakan metoda coupon measurement, Teknik potensiodinamik polarisasi dan karakterisasi mikroskop optic [22]. Pengujian dilakukan terhadap baja karbon dalam medium 0,5 M H₂SO₄. Rentang konsentrasi ekstrak antara 15% sampai 90%. Dari hasil Coupon measurement terbukti bahwa ekstrak berfungsi menjadi inhibitor yang efektif pada konsentrasi 60%. Kurva potensiodinamik polarisasi menggambarkan efek inhibisi ekstrak yang bersifat katodik.

N.K.Bixi et al telah menginvestigasi efisiensi inhibisi ekstrak daun Henna (HLE) dan senyawa turunannya yaitu Lawsone dan asam galic dalam lingkungan 0,5 M NaCl melalui metoda elektrokimia, potensiodinamik polarisasi, EIS dan analisis permukaan logam melalui Scanning Elektron Microscopy (SEM). nilai E_{corr} maksimum HLE 140mV dan asam Gallic 134mV vs SCE melebihi nilai ambang batas (85 mV). maka HLE dan asam Gallic dapat dianggap sebagai inhibitor korosi tipe anodik sedangkan, E_{corr} maksimal untuk Lawsone adalah 27mV vs SCE, sehingga Lawsone dapat diklasifikasikan sebagai inhibitor korosi campuran atau dasarnya anodik [23].

Robinia pseudoacacia L telah diteliti oleh Pourzarghan and Fazeli-Nasab sebagai inhibitor korosi hijau untuk bronze alloy dalam lingkungan korosif 0,5 m NaCl dengan waktu kontak 4 minggu. Efisiensi inhibisi tercapai pada konsentrasi 1800 ppm, namun pada konsentrasi ekstrak lebih tinggi terjadi penurunan efektifitas inhibitor. gambar SEM menunjukkan bahwa adanya ekstrak *Robinia pseudoacacia* L, korosi butir yang terjadi pada permukaan logam semakin berkurang [24].

Penelitian yang dilakukan oleh A. M. Abdel-Gaber et al, terhadap ekstrak Biji fenugreek (*Fen*) dan ekstrak daun gooseberry cape (*CgL*) sebagai inhibitor korosi hijau untuk baja dalam lingkungan asam fosfat 20 %. Teknik evaluasi menggunakan Fourier Transform Infrared (FTIR), electrochemical impedance spectroscopy (EIS), potentiodynamic polarization, scanning electron microscope (SEM), dan perhitungan simulasi quantum. Analisa gugus fungsi ekstrak menggunakan FTIR mengidentifikasi beberapa gugus fungsi yang terdapat dalam ekstrak seperti yang tertulis dalam table 1.

Tabel 1. FTIR band assignments for Fen and CgL extracts.[25]

Fen extract		CgI extract	
Band, cm ⁻¹	Assignment	Band, cm ⁻¹	Assignment
3289	NH stretching	3403	OH of phenolic compound
2927	C-H absorption bands	2925	The aromatic ring C-H stretching
2867	CH ₃ symmetric stretching vibration	2858	C-H symmetric vibration
1744	C=O stretching (e.g. in -COOH groups of amino acids)	1732	C=O stretching vibration of a carbonyl group
1662	=C-H stretching vibrations	1627	C=C vibration
1542	Aromatic -C=C stretching vibrations	1430	Aromatic C=C bends
1457	C-H bending (scissoring)	1373	C-O-H bending
1391	COO ⁻ symmetric stretch	1321	C-H deformation
1237	C-O stretching band	1247	Phenolic C-O stretching vibrations
1158	C-C-N stretching	1154	The C-O-C bridge unsymmetric stretching
1083	In-plane deformation of C-H bonds	1102	C-O-C cyclic ether
716	Aromatic C-H bending	1061	C-O stretching

Dari tabel 1 dapat dilihat gugus fungsi yang terdapat dalam ekstrak Fen dan CgI memungkinkan ekstrak dapat berfungsi sisi aktif pada proses penghambatan korosi pada permukaan logam. Dari pengukuran metoda kehilangan berat diketahui bahwa Efisiensi inhibisi meningkat dengan konsentrasi ekstrak mencapai sekitar 80% untuk 0,4 g/L CgI dan 1,2 g/L ekstrak Fen.

Tabel 2. Ekstrak inhibitor dalam medium korosif dan metoda evaluasi

Plant extract	Type of metal	Type medium	Medium concentration	Inhibitor concentration	Temperature
Point A	—	—	—	—	—
Point B	87	—	—	—	—
Point C	64	56	—	—	—
Point D	37	32	91	—	—
Point E	93	35	54	43	—

KESIMPULAN

Permasalahan korosi merupakan isu yang mengiringi perkembangan pemakaian bahan logam khususnya dalam dunia industri. Salah satu solusinya adalah dengan penggunaan inhibitor korosi. Seperti yang dibahas dalam review ini, banyak ekstrak senyawa dan banyak metoda yang telah dikembangkan para peneliti baik metoda eksperimen seperti metoda kehilangan berat, elektrokimia, potensiodinamik polarisasi dll maupun metoda teoritis yg dikenal dengan metoda kuantum menjadi pilihan mengingat hemat biaya dan ramah lingkungan. DFT, MD dan MC memberikan parameter adsorpsi yang lebih spesifik untuk memnggambarkan mekanisme penghambatan korosi yang terjadi pada logam.

REFERENSI

- [1] A. Toghan, M. Khairy, M. Huang, and H. S. Gadaw, "Electrochemical, surface analysis, and theoretical investigation of 3-hydroxy-5-(phenylamino)-4-(p-tolyldiazanyl)thiophen-2-yl(phenyl)methanone as a corrosion inhibitor for carbon steel in a molar hydrochloric acid solution," *Int. J. Electrochem. Sci.*, vol. 18, no. 4, p. 100070, 2023, doi: 10.1016/j.ijoes.2023.100070.
- [2] Z. Shang and J. Zhu, "Overview on plant extracts as green corrosion inhibitors in the oil and gas fields," *J. Mater. Res. Technol.*, vol. 15, pp. 5078–5094, 2021, doi: 10.1016/j.jmrt.2021.10.095.
- [3] J. U. Ani, I. O. Obi, K. G. Akpomie, S. I. Eze, and G. Nwatu, "Corrosion Inhibition Studies of Metals in Acid Media by Fibrous Plant Biomass Extracts and Density Functional Theory: A Mini-Review," *J. Nat. Fibers*, vol. 0, no. 0, pp. 1–11, Nov. 2020, doi: 10.1080/15440478.2020.1818345.
- [4] A. Pal and C. Das, "Novel use of kitchen waste: protection of boiler quality steel from corrosion in acidic media using onion waste,"

- Chem. Pap.*, vol. 77, no. 2, pp. 1107–1127, 2023, doi: 10.1007/s11696-022-02549-7.
- [5] N. Kedimar, P. Rao, and S. A. Rao, “Ionic liquid as an effective green inhibitor for acid corrosion of aluminum composite: experimental and theoretical considerations,” *J. Appl. Electrochem.*, vol. 53, no. 7, pp. 1473–1489, 2023, doi: 10.1007/s10800-023-01854-7.
- [6] A. El-Asri *et al.*, “Carissa macrocarpa extract (ECM) as a new efficient and ecologically friendly corrosion inhibitor for copper in nitric acid: Experimental and theoretical approach,” *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.*, vol. 142, no. November 2022, 2023, doi: 10.1016/j.jtice.2022.104633.
- [7] S. Hadisaputra, A. A. Purwoko, A. Hakim, N. Prasetyo, and S. Hamdiani, “Corrosion Inhibition Properties of Phenyl Phthalimide Derivatives against Carbon Steel in the Acidic Medium : DFT , MP2 , and Monte Carlo Simulation Studies,” 2022, doi: 10.1021/acsomega.2c03091.
- [8] J. Kaur, N. Daksh, and A. Saxena, “Corrosion Inhibition Applications of Natural and Eco - Friendly Corrosion Inhibitors on Steel in the Acidic Environment : An Overview,” pp. 57–74, 2022.
- [9] M. H. Abdellatif, S. H. Alrefaee, O. Dagdag, C. Verma, and M. A. Quraishi, “Calotropis procera extract as an environmental friendly corrosion Inhibitor: Computational demonstrations,” *J. Mol. Liq.*, vol. 337, no. 2, p. 116954, 2021, doi: 10.1016/j.molliq.2021.116954.
- [10] L. Chen and D. Lu, “Organic Compounds as Corrosion Inhibitors for Carbon Steel in HCl Solution : A Comprehensive Review,” pp. 1–59, 2023.
- [11] M. P. Asfia, M. Rezaei, and G. Bahlakeh, “ur l Pre,” *J. Mol. Liq.*, p. 113679, 2020, doi: 10.1016/j.molliq.2020.113679.
- [12] A. Kumar and C. Verma, “Coco Monoethanolamide Surfactant as a Sustainable Corrosion Inhibitor for Mild Steel : Theoretical and Experimental Investigations,” 2023.
- [13] N. D. Mu’azu *et al.*, “Inhibition of low carbon steel corrosion by a cationic gemini surfactant in 10wt.% H₂SO₄ and 15wt.% HCl under static condition and hydrodynamic flow,” *South African J. Chem. Eng.*, vol. 43, no. August 2022, pp. 232–244, 2023, doi: 10.1016/j.sajce.2022.10.006.
- [14] F. Simescu-Lazar *et al.*, “Thymus satureoides Oil as Green Corrosion Inhibitor for 316L Stainless Steel in 3% NaCl: Experimental and Theoretical Studies,” *Lubricants*, vol. 11, no. 2, 2023, doi: 10.3390/lubricants11020056.
- [15] D. S. Chauhan, C. Verma, and M. A. Quraishi, “Molecular structural aspects of organic corrosion inhibitors: Experimental and computational insights,” *J. Mol. Struct.*, vol. 1227, no. xxxx, p. 129374, 2021, doi: 10.1016/j.molstruc.2020.129374.
- [16] M. Rbaa, F. Benhiba, P. Dohare, and L. Lakhri, “Synthesis of new epoxy glucose derivatives as a non-toxic corrosion inhibitors for carbon steel in molar HCl : Experimental , DFT and MD simulation.” vol. 27, 2020, doi: 10.1016/j.cdc.2020.100394.
- [17] M. En-nyly, S. Skal, Y. El, H. Lgaz, and R. J. Adnin, “Performance evaluation and assessment of the corrosion inhibition mechanism of carbon steel in HCl medium by a new hydrazone compound : Insights from experimental , DFT and first-principles DFT simulations,” *Arab. J. Chem.*, vol. 16, no. 6, p. 104711, 2023, doi: 10.1016/j.arabjc.2023.104711.
- [18] Z. Akounach *et al.*, “Contribution to the corrosion inhibition of aluminum in 1 M HCl by Pimpinella Anisum extract . Experimental and theoretical studies (DFT , MC , and MD),” no. 1, pp. 402–424, 2022, doi: 10.17675/2305-6894-2022-11-1-24.
- [19] V. Vorobyova, O. Sikorsky, M. Skiba, and G. Vasyliov, “Quebracho tannin as corrosion inhibitor in neutral media and novel rust conversion agent for enhanced corrosion protection,” *South African J. Chem. Eng.*, vol. 44, no. September 2022, pp. 68–80, 2023, doi: 10.1016/j.sajce.2023.01.003.
- [20] S. Cherrad *et al.*, “Cupressus arizonica fruit essential oil : A novel green inhibitor for acid corrosion of carbon steel,” *Arab. J. Chem.*, vol. 15, no. 6, p. 103849, 2022, doi: 10.1016/j.arabjc.2022.103849.
- [21] C. . Nwachukwu, I. M. Dagwa, and B. I. Ugheoke, “Optimization of Blended Guava and Fluted Pumpkin Leaves extract as corrosion inhibitor of mild steel in 0.5 m hydrochloric acid,” *Niger. J. Technol.*, vol. 40, no. 3, pp. 393–403, 2021, doi: 10.4314/njt.v40i3.6.
- [22] R. T. Loto, “granatum , and camellia sinensis extracts on plain carbon steel,” *Cogent Eng.*, vol. 7, pp. 1–16, 2020, doi: <https://doi.org/10.1080/23311916.2020.1798579>.
- [23] N. K. Bixi, R. Cherif, A. Bezzar, L. Sail, and A. Ait-Mokhtar, “Effectiveness of henna leaves extract and its derivatives as green corrosion inhibitors of reinforcement steel exposed to chlorides,” *Eur. J. Environ. Civ. Eng.*, vol. 26, no. 12, pp. 5912–5930, 2022, doi: 10.1080/19648189.2021.1925159.
- [24] V. Pourzarghan and B. Fazeli-Nasab, “The use of Robinia pseudoacacia L fruit extract as a green corrosion inhibitor in the protection of copper-based objects,” *Herit. Sci.*, vol. 9, no. 1, pp. 1–14, 2021, doi: 10.1186/s40494-021-00545-w.
- [25] A. M. Abdel-Gaber, A. Ezzat, and M. E. Mohamed, “Fenugreek seed and cape gooseberry leaf extracts as green corrosion inhibitors for steel in the phosphoric acid industry,” *Sci. Rep.*, vol. 12, no. 1, p. 22251, 2022, doi: 10.1038/s41598-022-26757-z.