

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil optimasi senyawa monomer dari lignin dan gabungan monomer dari lignin menggunakan metode DFT dan basis sets B3LYP/6-31G didapatkan nilai E_{HOMO} , E_{LUMO} , bandgap (ΔE), energi ionisasi (I), afinitas elektron (A), elektronegativitas (χ), *hardness* (η), *softness* (σ), elektrofilitas (ω), nukleofilitas (ϵ), transfer muatan (ΔN), Energi interaksi ($\Delta\psi$), Energi back donasi ($\Delta E_{\text{b-d}}$), dan momen dipol. Nilai parameter kimia kuantum meningkat dengan penggunaan pelarut sehingga meningkatkan kereaktifan molekul inhibitor. Dari parameter kimia kuantum itu monomer dan gabungan monomer dari lignin yang terbaik sebagai inhibitor korosi besi adalah inhibitor 3 dan 4. Pengaruh gugus pendorong CH_3 yang lebih banyak pada inhibitor 3 dan 4 menyebabkan elektron π akan lebih mudah beresonansi ke gugus $-\text{OH}$ yang berfungsi menginhibisi korosi besi lebih baik dibandingkan dengan molekul inhibitor lainnya. Inhibitor 3 dan 4 mempunyai nilai energi ikatan sebesar 118,0705 kJ/mol dan 109,6979 kJ/mol yang menandakan interaksi yang terjadi antara inhibitor dengan besi adalah interaksi kimia.

5.2 Saran

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan disarankan:

1. Penelitian selanjutnya dapat dilakukan perbandingan antara nilai efisiensi teori dengan eksperimen.
2. Penelitian selanjutnya dilakukan optimasi molekul monomer dari lignin dan gabungan monomer dari lignin dalam pelarut heksana.

