

BAB 5. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

Berdasarkan hasil optimasi senyawa orizaleksin menggunakan metode DFT dan Basis set B3LYP 6-31G didapatkan nilai parameter kimia kuantum berupa nilai E_{HOMO} , E_{LUMO} , *bandgap* (ΔE), Energi Ionisasi (I), Afinitas elektron (A), elektronegativitas (χ), *hardness* (η), *softness* (σ), elektrofilitas (ω), dan nukleofilitas (ϵ), transfer muatan (ΔN), energi interaksi ($\Delta \psi$), Energi *back* donasi ($\Delta E_{\text{b-d}}$) dan momen dipol (MD). Berdasarkan parameter kimia kuantum yang didapatkan, senyawa orizaleksin yang terbaik yang berpotensi sebagai inhibitor korosi besi yaitu orizaleksin C. Senyawa orizaleksin juga dioptimasi dengan menggunakan pelarut air, dimana kemampuan inhibisi korosi lebih meningkat ketika menggunakan pelarut. Interaksi antara inhibitor dengan atom Fe memiliki nilai ΔG sebesar $-113,458 \text{ kJ/mol}$ yang menandakan interaksi yang terjadi adalah interaksi kimia.

5.2. Saran

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, maka disarankan :

1. Penelitian selanjutnya dapat dilakukan secara eksperimen dan membandingkan data eksperimen dengan data yang diperoleh secara komputasi.
2. Membandingkan hasil yang telah didapatkan dengan optimasi senyawa inhibitor dan atom Fe menggunakan aplikasi DFT lainnya.
3. Melakukan penelitian senyawa organik lainnya yang berpotensi sebagai inhibitor korosi besi.

