

## BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

### 5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil analisis optimasi yang diperoleh dapat disimpulkan bahwa :

1. Kemampuan inhibisi korosi senyawa  $\alpha$ -Terpinen,  $\beta$ -Caryophilen,  $\alpha$ -Elemen dan  $\alpha$ -Humulen dapat ditentukan dengan metode DFT dibuktikan dengan adanya gambar struktur optimal molekul inhibitor, *contour Highest Occupied Molecular Orbital* (HOMO), *contour Lowest Unoccupied Molecular Orbital* (LUMO),  $E_{HOMO}$ ,  $E_{LUMO}$  dan kerapatan muatan mulliken.
2. Setiap parameter kimia kuantum dapat ditentukan dengan menggunakan nilai  $E_{HOMO}$  dan  $E_{LUMO}$  yang didapatkan. Berdasarkan hasil perhitungan kimia kuantum, maka senyawa yang paling berpotensi sebagai inhibitor korosi yaitu  $\alpha$ -Terpinen.
3. Berdasarkan hasil perhitungan kimia kuantum, maka senyawa yang paling berpotensi sebagai inhibitor korosi dengan menggunakan medium pelarut air sama dengan ketika tanpa menggunakan pelarut yaitu senyawa  $\alpha$ -Terpinen.
4. Interaksi inhibitor yang terjadi dengan atom Fe adalah yaitu interaksi kimia dikarenakan nilai  $\Delta G$  yang didapatkan kecil dari -40 kJ/mol yaitu sebesar -201,142 kJ/mol.

### 5.2 Saran

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, maka disarankan :

1. Penelitian selanjutnya dilakukan secara eksperimen untuk membandingkan hasil yang didapatkan secara komputasi.
2. Melakukan penelitian dengan menggunakan metode komputasi yang lain.
3. Melakukan penelitian dengan menggunakan senyawa organik lainnya yang berpotensi sebagai inhibitor korosi.