

BAB 5. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil optimasi senyawa fitokasin 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), electkrofilisitas (ω), dan nukleofilisitas (ϵ), transfer muatan (ΔN), energi interaksi ($\Delta \psi$), energi *back* donasi ($\Delta E_{\text{b-d}}$), dan momen dipol. Berdasarkan parameter kimia kuantum yang didapatkan, senyawa fitokasin yang terbaik yang berpotensi sebagai inhibitor korosi besi yaitu fitokasin B dalam pelarut air dan fitokasin E dalam pelarut gas. Kereaktifan fitokasin dalam pelarut lebih besar dibanding dalam fasa gas. Interaksi antara inhibitor dengan atom Fe memiliki nilai ΔG sebesar -537,00 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 didapatkan secara komputasi.
2. Membandingkan hasil yang telah didapatkan dengan optimasi senyawa inhibitor dan atom Fe menggunakan aplikasi DFT lainnya.

