

## BAB 5. KESIMPULAN DAN SARAN

### 5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil optimasi komponen minyak atsiri daun lengkuas dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) dan Basis set B3LYP/6-31G maka diperoleh nilai parameter kimia kuantum berupa nilai  $E_{\text{HOMO}}$ ,  $E_{\text{LUMO}}$ , bandgap ( $\Delta E$ ), Energi Ionisasi ( $I$ ), Afinitas elektron ( $A$ ), elektronegativitas ( $\chi$ ), *hardness* ( $\eta$ ), *softness* ( $\sigma$ ), elektrofilitas ( $\omega$ ), nukleofilitas ( $\xi$ ), dan potensial kimia ( $\mu$ ), transfer muatan ( $\Delta N$ ), energi interaksi ( $\Delta\Psi$ ), dan Energi back donasi ( $\Delta E_{\text{b-d}}$ ). Berdasarkan parameter kimia kuantum yang didapatkan, dapat disimpulkan bahwa senyawa terbaik yang berpotensi sebagai inhibitor korosi besi yaitu Inh-G. Kemampuan inhibisi korosi lebih meningkat dalam pelarut metanol. Interaksi antara inhibitor dengan atom Fe diperoleh panjang ikatan kecil dari 2 Å dan energi ikatan fasa gas sebesar -145,277 kJ/mol dan dengan pelarut methanol sebesar -244,266 kJ/mol menandakan interaksi yang terjadi adalah interaksi kimia.

### 5.2 Saran

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, maka disarankan:

1. Penelitian selanjutnya dilakukan optimasi senyawa utama ekstrak daun lengkuas dengan beberapa pelarut
2. Penelitian selanjutnya dapat dilakukan secara eksperimen dan membandingkan data eksperimen dengan data yang diperoleh secara komputasi.

