

BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil optimasi komponen utama minyak atsiri daun pucuk merah dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) dan Basis set B3LYP/6-31G maka diperoleh 3-Carene merupakan inhibitor terbaik dalam kondisi gas, sedangkan dalam kondisi dengan pelarut metanol, caryophyllene merupakan inhibitor terbaik. Begitu juga dengan parameter kekuatan interaksi inhibitor dengan atom Fe, 3-Carene juga merupakan molekul inhibitor terbaik diantara molekul inhibitor lainnya untuk kondisi optimasi tanpa pelarut, sedangkan dengan pelarut metanol, caryophyllene merupakan inhibitor terbaik diantara molekul inhibitor lainnya. Pelarut metanol tidak mempengaruhi interaksi inhibitor dengan logam Fe dikarenakan perbedaan kepolaran antara inhibitor dengan pelarut sehingga inhibitor tidak terpolarisasi. Interaksi inhibitor dengan kristal Fe (100) menunjukkan bahwa diantara lima komponen utama minyak atsiri daun pucuk merah, caryophyllene memiliki nilai energi adsorpsi (E_{ads}) dan nilai energi ikatan ($E_{binding}$) yang lebih baik yaitu -2,12928 kJ/mol dan 2,12928 kJ/mol. Sedangkan untuk nilai panjang ikatan, yaitu bernilai 4,39 Å. Nilai energi ikatan dan panjang ikatan menunjukkan interaksi antara inhibitor dan molekul Fe adalah interaksi fisika.

5.2 Saran

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, disarankan untuk:

1. Penelitian selanjutnya dilakukan optimasi komponen utama minyak atsiri daun pucuk merah dengan pelarut yang tepat seperti n-heksana.
2. Melakukan optimasi Fe dengan *software* material studio sehingga dapat membandingkan hasil yang didapatkan.