

BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil analisis optimasi yang diperoleh dapat disimpulkan bahwa :

1. Hasil optimasi molekul senyawa mirisetin (A), mirisitrin (B), mirisetin α -alfa-arabinofuranoside (C) dan mirisetin 3'-glukosida (D) diperoleh nilai E_{HOMO} , E_{LUMO} , dan momen dipol. Nilai E_{HOMO} , E_{LUMO} yang diperoleh digunakan untuk perhitungan parameter kimia kuantum seperti energi gap (ΔE), potensial ionisasi (I), afinitas elektron (A), elektronegativitas (χ), *hardness* (η), *softness* (σ), elektrofilitas (ω) dan elektron transfer (ΔN). Hasil perhitungan parameter kimia kuantum menunjukkan senyawa B sebagai inhibitor tertinggi.
2. Efisiensi inhibisi korosi senyawa A yang dilaporkan Haldhar et al., (2018) sebesar 92,26%, sedangkan efisiensi inhibisi korosi B, C dan D meningkatkan sebesar 92,63%, 92,58%, dan 92,29%. Diantara senyawa ABCD, senyawa B memiliki efisiensi inhibisi korosi tertinggi sebesar 92,63%. Hal ini menunjukkan bahwa penambahan gugus glukosa pada ring C senyawa induk meningkatkan efisiensi inhibisi korosi.
3. Penambahan substituen CH_3 pada senyawa B (B3) meningkatkan kinerja inhibisi korosi dengan nilai E_{HOMO} yang besar, energi gap (ΔE) yang kecil, potensial ionisasi (I) yang kecil, *softness* (σ) yang besar, *hardness* (η) yang kecil dan transfer elektron (ΔN) yang lebih kecil dari 3,6 dibandingkan dengan penambahan substituen NH_2 (B2) dan NO_2 (B1).
4. Hasil optimasi senyawa A, B, C dan D yang berikatan dengan atom Fe, menunjukkan bahwa senyawa B memiliki nilai energi interaksi yang paling rendah, maka senyawa B lebih stabil berikatan dengan atom Fe dibandingkan senyawa lainnya

5.2 Saran

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan disarankan untuk penelitian selanjutnya dapat meneliti senyawa mirisetin dengan fasa dan substituen yang berbeda, serta disarankan mengkorelasikan data eksperimen dengan data yang diperoleh secara kimia komputasi.