

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

Berdasarkan analisis hasil yang diperoleh dapat disimpulkan bahwa :

1. Metode DFT dengan menggunakan fungsional B3LYP / 6-31G (d, p) pada program gaussian09 dapat digunakan untuk mengetahui potensi dari senyawa *Xanthone* dan turunannya sebagai inhibitor korosi.
2. Salah satu turunan *Xanthone* yaitu *gartanin* merupakan inhibitor yang baik dibandingkan dengan *Xanthone* dan turunan lainnya.
3. Efisiensi penghambatan inhibitor yang diperoleh secara kimia kuantum meningkat dengan meningkatnya E_{HOMO} , penurunan E_{LUMO} serta rendahnya nilai celah energi (ΔE).
4. Nilai E_{HOMO} senyawa *gartanin* lebih tinggi dibanding senyawa lainnya sehingga *gartanin* memiliki efisiensi yang tinggi. Parameter elektronik seperti kekerasan (η) dan kelembutan (σ) mengkonfirmasi efisiensi penghambatan dalam urutan *gartanin* > *8-desoxygartanin* > α -mangostin > β -mangostine > *Xanthone*.
5. Dengan *gartanin* memiliki potensi yang lebih baik sebagai inhibitor didukung dengan didaparkannya nilai efisiensi inhibitor (IE%) untk senyawa *gartanin* adalah 86,54% lebih tinggi dibandingkan nilai IE% pada *Xanthone*.
6. Pada penambahan substituen memiliki urutan yaitu $COOH < Br < Cl < F < OCH_3 < NH_2$. Nilai dari penambahan substituen NH_2 yaitu didapatkan efesiensinya inhibitorynya adalah 92,91% yang lebih baik dibandingkan dengan penambahan substituen lainnya.
7. Interaksi pada atom Fe didapatkan hasil yang lebih baik terjadi pada posisi dengan berinteraksinya atom Fe pada posisi 1 yaitu Gar-1. dan juga nilai interaksi pada posisi atom Fe yang akan membentuk kompleks pada posisi 6 yaitu Gar-6

5.2. Saran

Berdasarkan kesimpulan yang didapatkan, untuk penelitian selanjutnya dapat dilakukan untuk secara eksperimen dan metode DFT secara teoritical ini dapat membantu peneliti untuk memudahkan dalam eksperimen selanjutnya.

