

## BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

### 5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil optimasi senyawa morin dan turunannya menggunakan metode DFT dan Basis sets B3LYP 6-31G dapat diambil kesimpulan bahwa struktur morin yang terbaik sebagai inhibitor korosi besi adalah inhibitor 2 dan 6 dikarenakan dari berbagai perhitungan parameter kereaktifan dan kekuatan interaksi yang telah dianalisis didapatkan inhibitor 2 dan 6 cenderung lebih reaktif. Berdasarkan nilai parameter kereaktifan dan interaksi inhibitor dengan ion  $Fe^{+3}$  juga diketahui bahwa inhibitor cenderung lebih reaktif dalam fasa pelarut dibandingkan dalam fasa gas. Hal ini karena dalam fasa pelarut terjadi proses pengkutuban sehingga atom oksigen akan lebih bermuatan negatif dan molekul inhibitor dengan ion  $Fe^{+3}$  akan lebih mudah untuk bereaksi. Interaksi antara inhibitor dengan ion  $Fe^{+3}$  memiliki nilai energi bebas Gibbs yang positif yang menandakan interaksi yang terjadi berlangsung secara tidak spontan dan nilai energi ikatan berada pada range  $-3,9783 \times 10^3$  sampai  $-4,0503 \times 10^3$  kJ/mol yang menunjukkan bahwa interaksi yang terjadi adalah interaksi kimia.

### 5.2 Saran

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan disarankan:

1. Penelitian selanjutnya dapat dilakukan secara eksperimen dan mengkorelasikan data eksperimen dengan data yang diperoleh secara komputasi.
2. Membandingkan hasil yang telah didapatkan dengan optimasi senyawa inhibitor dan atom Fe memakai material studio.
3. Melakukan penelitian senyawa organik lainnya yang berpotensi sebagai inhibitor anti korosi.

