

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang diperoleh maka didapatkan beberapa kesimpulan:

1. Besarnya perubahan energi dari reaksi reduksi nitrobenzene menjadi anilin berdasarkan hasil perhitungan kimia komputasi dengan metode B3LYP/3-21G sebesar $-77,611$ KJ/mol.
2. Besarnya perubahan energi dari reaksi reduksi 4-Flouornitrobenzena menjadi 4-Flouroanilin berdasarkan hasil perhitungan kimia komputasi dengan metode B3LYP/3-21G sebesar $-720,658$ KJ/mol.
3. Besarnya perubahan energi dari reaksi reduksi 4-Kloronitrobenzena menjadi 4-Kloroanilin berdasarkan hasil perhitungan kimia komputasi dengan metode B3LYP/3-21G sebesar $-805,511$ KJ/mol.
4. Besarnya perubahan energi dari reaksi reduksi 4-Bromonitrobenzena menjadi 4-Bromoanilin berdasarkan hasil perhitungan kimia komputasi dengan metode B3LYP/3-21G sebesar $-512,406$ KJ/mol.
5. Adanya gugus halogen yang berbeda memberikan nilai perubahan energi yang berbeda.
6. Ion halogen yang memberikan nilai energi paling rendah adalah ion Cl⁻.

5.2 Saran

Dalam penelitian yang telah dilakukan penulis menyarankan

1. Perlu dilakukan penelitian lebih lanjut terhadap reduksi nitrobenzena menjadi anilin yang serupa dengan menggunakan reaksi nitrasi dan jenis katalis yang lainnya.
2. Melakukan pengembangan lebih lanjut terhadap optimasi geometri hidrogenasi nitrobenzena serupa dengan variasi metode yang komputasi atau software yang lainnya.

3. Menggunakan perangkat lunak versi terbaru dan memperhatikan spesifikasi perangkat komputer yang akan digunakan.
4. Untuk memprediksi reaksi yang akan dilakukan dalam penelitian komputasi.



THE
Character Building
UNIVERSITY