

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

Adapun kesimpulan yang didapat pada penelitian ini antara lain:

1. Besarnya perubahan energi dari reaksi dan senyawa (4 - klorokarbonil - benzial) - karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester berdasarkan hasil perhitungan kimia komputasi dengan metode B3LYP/3-21G 631023,0297687885 kJ/mol
2. Besarnya perubahan energi dari reaksi dan senyawa (4- fenilkarbamil benzil) – karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester berdasarkan hasil perhitungan kimia komputasi dengan metode B3LYP/3-21G 495067,9997585155 kJ/mol
3. Besarnya perubahan energi dari reaksi dan senyawa [4-(2-nitro - fenil karbamoil) – benzil] – karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester berdasarkan hasil perhitungan kimia komputasi dengan metode B3LYP/3-21G - 766021,8240768645 kJ/mol
4. Besarnya perubahan energi dari reaksi dan senyawa [4 – 2 (amino - fenil karbamil) – benzil] – karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester berdasarkan hasil perhitungan kimia komputasi dengan metode B3LYP/3-21G 1005126,309588925 kJ/mol
5. Senyawa yang paling stabil berdasarkan hasil perhitungan dari komputasi dengan metode B3LYP/dan basic set 3-21G adalah senyawa [4-(2-nitro - fenil karbamoil) – benzil] – karbamik asam piridin – 3 - ilmetil ester berdasarkan hasil perhitungan kimia komputasi dengan metode B3LYP/3-766021,8240768645 kJ/mol

5.2. Saran

Adapun saran penulis untuk penelitian ini adalah:

1. Menggunakan perangkat lunak yang versi terbaru untuk digunakan dan memperhatikan spesifikasi komputer lebih lanjut.
2. Melakukan pengembangan lebih lanjut terhadap optimasi geometri senyawa benzamida serupa dengan variasi metode yang komputasi atau software yang lainnya.
3. Untuk memprediksi reaksi yang akan dilakukan dalam penelitian komputasi.
4. Perlu dilakukan penelitian lebih lanjut terhadap reduksi benzamida turunan yang serupa dengan menggunakan jenis katalis yang lainnya.

