BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Adapun kesimpulan yang diperoleh dari penelitian yang telah dilakukan yaitu sebagai berikut:

1. Besar energi dari hasil perhitungan komputasi dengan menggunakan RHF/6-31G untuk struktur $\text{Fe}(\text{SCN})_2(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_4$: -1524.86976182444 KJ/mol; struktur $\text{Fe}(\text{SCN})_3(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_3$: -1557.98302881166 KJ/mol; dan struktur $\text{Fe}(\text{SCN})_2(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_4$: -2083.53616162888 KJ/mol.
2. Perubahan energi pembentukan menunjukkan bahwa struktur $[\text{Fe}(\text{SCN})_4(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_2]$ adalah yang paling stabil.
3. Rumus molekul yang paling sesuai untuk senyawa kompleks Fe(II) adalah $[\text{Fe}(\text{SCN})_4(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_2]$.

5.2 Saran

Dari penelitian yang telah dilakukan, penulis menyarankan:

1. Melakukan pengembangan lebih lanjut dengan basis set yang lebih besar dan spesifik untuk logam transisi karena Basis set 6-31G dirancang untuk molekul kecil dan atom ringan. Untuk logam transisi seperti Fe, akurasinya terbatas.
2. Melakukan penelitian yang lebih lanjut mengenai senyawa kompleks yang diprediksi lebih stabil yaitu $[\text{Fe}(\text{SCN})_2(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_4]$ yang mungkin hasilnya akan lebih baik lagi secara laboratorium dibandingkan penelitian sebelumnya.