

BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan, terdapat beberapa kesimpulan yang diperoleh, yaitu:

1. Berdasarkan perbandingan antara hasil geometri molekul, spektrum IR dan spektrum H-NMR eksperimen dengan geometri molekul, spektrum IR dan spektrum H-NMR hasil perhitungan, terdapat perbedaan pada panjang ikatan, sudut ikatan, daerah serapan, maupun pergeseran kimia yang dihasilkan oleh perhitungan menggunakan metode Ab Initio. Masing-masing himpunan basis ini memiliki perbedaan nilai PRESS.
2. Metode Ab Initio yang paling baik dengan molekul polietilen tetramer yaitu himpunan basis 6-311++G**. Hal ini didasarkan oleh perolehan nilai PRESS terkecil dengan total sebesar 76.117,84566. Hasil dari masing-masing parameter menunjukkan bahwa nilai PRESS geometri molekul berupa panjang ikatan sebesar 0,0007861 dan sudut ikatan sebesar 6,0471, spektrum IR sebesar 76.110,2513 dan spektrum H-NMR sebesar 6,047889479.

5.2 Saran

Saran pada penelitian ini yang perlu dikembangkan untuk penelitian selanjutnya, yaitu hasil penelitian ini dapat dijadikan acuan untuk penentuan Hubungan Kuantitatif Struktur Sifat (HKSS).