

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan uraian hasil penelitian dan pembahasan, diperoleh kesimpulan sebagai berikut.

1. Energi minimum dari model molekul tetramer polietilena dapat ditentukan melalui perhitungan kimia komputasi DFT dan didapatkan hasil energi minimum sebesar -198.158,922588 kkal/mol dengan kombinasi himpunan basis dan fungsi 6-311++G**/EDF1.
2. Metode kimia komputasi DFT yang terbaik untuk molekul tetramer polietilena dapat ditentukan melalui uji PRESS dengan memanfaatkan parameter panjang ikatan, sudut ikatan, spektrum IR, dan spektrum $^1\text{H-NMR}$ yang digunakan data eksperimen dalam meningkatkan hasil penelitian yang diperoleh. Hasil PRESS yang paling kecil terdapat pada kombinasi himpunan basis 6-311++G**/B3LYP sebesar 124.007,387167 sehingga dinyatakan metode DFT ini adalah metode dengan hasil yang terbaik untuk molekul tetramer polietilena.

5.2 Saran

Adapun saran yang dapat diberikan dalam penelitian mendatang adalah sebagai berikut.

1. Menggunakan kombinasi himpunan basis dan fungsi XCP lain dengan memvariasikan struktur molekul polietilena yang dapat mewakili struktur sebagai polimer.
2. Menggunakan metode yang telah ditentukan untuk analisis hubungan kuantitatif struktur-sifat (HKSS), seperti suhu leleh fasa amorf dan suhu transisi gelas dari polietilena.