

BAB VI

KESIMPULAN DAN SARAN

6.1 Kesimpulan

1. Dengan Teori Orbital Molekul Huckel (HMO) Sederhana, bisa dicari indeks valensi bebas dari molekul hidrokarbon aromatik. Valensi bebas ini mempunyai korelasi linier dengan konstanta reaktifitas substituen (σ_r) dan logaritma laju relatif ($\log k$), sehingga bisa diramalkan kemungkinan sintesa molekul derivatnya.
2. Dalam penggunaan teori ini, masih perlu dipertimbangkan adanya efek rintangan sterik yang ikut berperan dalam reaktifitas molekul.
3. Teori HMO Sederhana tak tepat digunakan untuk memprediksi kereaktifan dari molekul heteroatom karena adanya asumsi harga α (integral coulomb) yang sama untuk setiap atom karbon.

6.2 Saran

- a. Mencoba menerapkan teori HMO Sederhana pada molekul hidrokarbon yang lebih besar, dengan menggunakan indeks kereaktifan lainnya.
- b. Untuk memperoleh korelasi yang lebih baik antara indeks kereaktifan dengan reaktifitas molekul, dianjurkan untuk menggunakan metode Extended Huckel Theory (EHT).