

## **BAB 5**

### **KESIMPULAN DAN SARAN**

#### **5.1 Kesimpulan**

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, didapatkan beberapa kesimpulan sebagai berikut.

1. Hasil perhitungan panjang ikatan, sudut ikatan, serapan spektrum IR dan  $^1\text{H-NMR}$  senyawa insektisida *chlorpyriphos* dapat diidentifikasi dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) yang menggunakan himpunan basis 6-31G\*, 6-31G\*\*, 6-311G, dan 6-311G\*\* dan *hybrid exchange-correlation* (B3LYP, B3PW91, EDF1, dan Becke97) dengan membandingkannya menggunakan data eksperimen. Perhitungan yang diperoleh untuk masing-masing parameter tersebut memiliki perbedaan nilai PRESS.
2. Metode *Density Functional Theory* (DFT) yang paling sesuai untuk senyawa senyawa *chlorpyriphos* ditunjukkan pada himpunan basis 6-311G\*\*/B3LYP. Hal ini ditunjukkan oleh nilai PRESS yang dihasilkan berdasarkan beberapa parameter perhitungan (panjang ikatan, sudut ikatan, spektrum IR, dan spektrum  $^1\text{H-NMR}$ ) bernilai paling kecil yaitu sebesar 50.639,1387. Hasil masing-masing parameter perhitungan panjang ikatan, sudut ikatan, spektrum IR, dan spektrum  $^1\text{H-NMR}$  secara berturut-turut yaitu 0,0881; 111,7624; 50.525,7002; dan 1,5880.

#### **5.2 Saran**

Adapun saran yang dapat diberikan berdasarkan penelitian yang telah dilakukan adalah sebagai berikut.

1. Perlunya untuk melakukan pemodelan senyawa *chlorpyriphos* lanjutan menggunakan berbagai variasi himpunan basis lainnya dengan kombinasi lebih tinggi yang tertera pada perangkat lunak *Hyperchem*.
2. Perlunya untuk melakukan penelitian lebih lanjut terkait *molecular docking* yang dapat digunakan dalam penentuan Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas (HKSA) untuk pengembangan senyawa *chlorpyriphos* baru.