

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 ^1H -NMR senyawa insektisida *chlorpyrifos* 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 *chlorpyrifos* 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 ^1H -NMR) bernilai paling kecil yaitu sebesar 50.639,1387. Hasil masing-masing parameter perhitungan panjang ikatan, sudut ikatan, spektrum IR, dan spektrum ^1H -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 *chlorpyrifos* 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 *chlorpyrifos* baru.