

BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

Berdasarkan hasil optimasi kandungan ekstrak daun binahong menggunakan metode DFT dan basis set B3LYP/6-31G didapatkan nilai E_{HOMO} , E_{LUMO} dan momen dipol. Secara umum, nilai parameter kimia kuantum meningkat dengan penggunaan pelarut. Berdasarkan parameter kekuatan interaksi inhibitor dengan atom Fe ditinjau dari transfer muatan (ΔN), energi interaksi ($\Delta\psi$), dan energi back-donation ($\Delta E_{\text{b-d}}$), asam ursolat merupakan molekul inhibitor terbaik diantara molekul inhibitor lainnya untuk ketiga kondisi optimasi yang berbeda. Sementara, interaksi inhibitor dengan kristal Fe (100) menunjukkan bahwa diantara tiga kandungan utama ekstrak daun binahong, asam ursolat memiliki nilai energi ikatan (E_{binding}) yang lebih baik yaitu -111,92 kJ/mol dengan nilai panjang ikatan Fe-Inh 1,91 Å, sedangkan di antara semua molekul turunan vitexin, vitexin-2''-O-glucoside merupakan inhibitor terbaik dengan nilai energi ikatan paling tinggi yaitu sebesar -122,53 kJ/mol dengan nilai panjang ikatan Fe-Inh 1,92 Å. Data energi ikatan dan panjang ikatan menunjukkan interaksi antara inhibitor dan molekul Fe adalah interaksi kimia.

5.2. Saran

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, disarankan untuk:

1. Penelitian selanjutnya dapat dilakukan perbandingan antara nilai efisiensi teori dengan eksperimen.
2. Data penelitian dapat dilengkapi dengan menganalisis parameter termodinamika dari kandungan ekstrak daun binahong.