

# **DASAR-DASAR SPEKTROSKOPI**

**PROF. DR. HARDJONO SASTROHAMIDJOJO**  
GURU BESAR EMERITUS FMIPA-UGM  
YOGYAKARTA

**GADJAH MADA UNIVERSITY PRESS**

## DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR .....	v
DAFTAR ISI .....	vii
DAFTAR GAMBAR .....	xi
DAFTAR TABEL .....	xiv
<b>BAB I. SPEKTROSKOPI SINAR ULTRA VIOLET DAN 1 SINAR TERLIHAT/TAMPAK .....</b>	<b>1</b>
1.1. Radiasi Elektromagnetik .....	1
1.1.1. Pendahuluan .....	1
1.1.2. Tenaga dan Radiasi Sinar Elektromagnetik .....	2
1.1.3. Sifat-sifat Partikel .....	4
1.2. Kegunaan Spektroskopi UV-VIS: Analisis Secara Kuantitatif .....	6
1.2.1. Penjabaran Hukum Beer-Lambert .....	6
1.2.2. Cara Menentukan Konsentrasi .....	13
1.3. Kegunaan Spektroskopi UV-VIS: Analisis Secara Kualitatif .....	15
1.3.1. Pengertian Cuplikan .....	15
1.3.2. Pembentukan Senyawa .....	16
1.3.3. Klasifikasi Transisi Serapan Elektronik .....	31
1.3.4. Pengaruh Konjugasi .....	32
1.4. Prediksi Panjang Gelombang ( $\lambda$ ) Menurut Woodward-Fieser .....	34
1.4.1. Dena Terkonjugasi Sistem Terbuka .....	35
1.4.2. Dena Sistem Tertutup .....	35
1.4.3. Sistem Enon .....	40

1.5. Instrumentasi .....	44
<b>BAB II. SPEKTROMETRI INFRAMERAH .....</b>	<b>47</b>
2.1. Pendahuluan .....	47
2.1.1. Kisaran Panjang Gelombang .....	47
2.1.2. Proses Serapan Inframerah .....	49
2.1.3. Kegunaan Spektrum Inframerah .....	51
2.2. Ragam Vibrasi .....	52
2.2.1. Ragam Vibrasi Rentang dan Bengkok .....	52
2.2.2. Penghitungan Frekuensi Vibrasi .....	55
2.3. Faktor-faktor yang Mempengaruhi Vibrasi .....	57
2.3.1. Resonansi .....	59
2.3.2. Ikatan Hidrogen .....	60
2.3.3. Efek Elektronik .....	64
2.3.4. Sudut Ikatan .....	65
2.3.5. Pengaruh Besar/Ukuran Cincin .....	66
2.4. Identifikasi Berdasarkan Gugus Fungsi .....	67
2.5. Senyawa Organik yang Mengandung Hetero Atom .....	85
2.5.1. Senyawa Organo-Silikon .....	85
2.5.2. Senyawa Organo-Belerang .....	86
2.5.3. Senyawa Organo-Fosfor .....	88
2.6. Cara Menganalisis Spektra Inframerah .....	89
2.7. Cara Penanganan Cuplikan .....	104
2.8. Instrumentasi Spektrometer Inframerah .....	105
<b>BAB III. RESONANSI MAGNETIK INTI .....</b>	<b>108</b>
3.1. Pengertian-pengertian Dasar .....	108
3.1.1. Kedudukan Spin Inti .....	108
3.1.2. Momen Magnet Inti .....	109
3.1.3. Penyerapan Tenaga .....	111
3.1.4. Mekanisme Serapan (Resonansi) .....	114
3.1.5. Pergeseran Kimia dan Perlindungan .....	116
3.1.6. Spektrometer Resonansi Magnet Inti .....	119
3.1.7. Kekimiaan yang Ekuivalen .....	121
3.2. Lingkungan Kimia dan Pergeseran Kimia .....	124

3.2.1. Perlindungan Diamagnetik Setempat .....	125
3.2.2. Anisotropi Magnetik .....	130
3.2.3. Hukum Pemecahan Spin-spin ( $N + 1$ ) .....	132
3.2.4. Asal Pemecahan Spin-spin .....	137
3.2.5. Ringkasan Spin-spin <i>Coupling</i> .....	140
3.2.6. Segitiga Pascal .....	142
3.2.7. Tetapan Penggabungan .....	142
3.3. Langkah-langkah Cara Menginterpretasi Spektra NMR .....	146
3.3.1. Jumlah Proton. Proton-proton Ekuivalen dan Tidak Ekuivalen .....	147
3.3.2. Kedudukan Sinyal .....	150
3.3.3. Intensitas Sinyal: Luas Puncak dan Perhitungan Atom Hidrogen .....	153
3.3.4 Pemecahan Sinyal .....	156
<b>BAB IV. SPEKTROMETRI MASSA .....</b>	<b>161</b>
4.1. Dasar-dasar Spektrometri Massa .....	161
4.1.1. Pendahuluan .....	161
4.1.2. Instrumentasi .....	164
4.1.3. Daya pisah (Resolusi) .....	166
4.1.4. Ion Metastabil .....	167
4.1.5. Limpahan Isotop .....	168
4.2. Ion Molekul .....	171
4.3. Fragmentasi .....	173
4.3.1. Penggambaran Proses Fragmentasi .....	173
4.3.2. Bentuk-bentuk Dasar Fragmentasi dan Aturan-aturan .....	174
4.4. Fragmentasi yang dikaitkan dengan gugus fungsi .....	181
4.4.1. Alkana (Parafin) .....	181
4.4.2. Sikloalkana .....	182
4.4.3. Alkena (Olefin) .....	183
4.4.4. Alkuna .....	184
4.4.5. Hidrokarbon Anomarik .....	184
4.4.6. Halida .....	185
4.4.7. Alkohol .....	186

SOAL DAN PENYELESAIAN .....	214
DAFTAR PUSTAKA .....	225
TENTANG PENULIS .....	227

## DAFTAR GAMBAR

<b>Gambar 1.1</b>	Pembiasan Sinar Matahari/Lampu pada Prisma ..	2
<b>Gambar 1.2</b>	Sinar/Radisi Gelombang Elektromagnetik .....	3
<b>Gambar 1.3</b>	Bagan Sel/Kuvet .....	7
<b>Gambar 1.4</b>	Spektra UV-VIS campuran .....	11
<b>Gambar 1.5</b>	Kurva Baku .....	13
<b>Gambar 1.6</b>	Cara Menentukan Konsentrasi Senyawa .....	14
<b>Gambar 1.7</b>	Bentuk Orbital s .....	17
<b>Gambar 1.8</b>	Orientasi Orbital-orbital $p_x$ , $p_y$ dan $p_z$ .....	17
<b>Gambar 1.9</b>	Bentuk Orbital Hibrida s dan p .....	18
<b>Gambar 1.10</b>	Diagram Spektrofotometer .....	44
<b>Gambar 2.1</b>	Daerah Spektrum Elektromagnetik yang Menunjukkan Hubungan Vibrasi Inframerah dengan Tipe Radiasi Lain .....	48
<b>Gambar 2.2</b>	Daerah Serapan Inframerah .....	52
<b>Gambar 2.3</b>	Ragam Vibrasi .....	53
<b>Gambar 2.4</b>	Ragam Rentang Simetri dan Asimetri .....	55
<b>Gambar 2.5</b>	Vibrasi Rentang C = C dalam Sistem Endosiklis	66
<b>Gambar 2.6</b>	Vibrasi Rentang C = C dalam Sistem Eksosiklis	67
<b>Gambar 2.7</b>	Vibrasi rentangan C = O untuk Keton Terkonjugasi .....	74
<b>Gambar 2.8</b>	Vibrasi rentangan C = O untuk Keton Siklis.....	74

<b>Gambar 3.1</b>	Kedudukan Dua Spin dari Proton .....	110
<b>Gambar 3.2</b>	Pengaturan Searah dan Berlawanan dari Magnet-magnet Kecil .....	110
<b>Gambar 3.3</b>	Kedudukan Spin Proton dengan Tidak Adanya dan Adanya Medan Magnet yang Digunakan .....	111
<b>Gambar 3.4</b>	Proses Serapan NMR untuk Proton.....	111
<b>Gambar 3.5</b>	Pemisahan Tenaga Kedudukan Spin Sebagai Fungsi Kekuatan Medan Magnet yang Digunakan .....	112
<b>Gambar 3.6a</b>	Gasing dalam Medan Gravitasi Bumi .....	114
<b>Gambar 3.6b</b>	Preesi dari Inti yang Berputar yang Disebabkan Pengaruh Medan Magnet yang Digunakan .....	114
<b>Gambar 3.7</b>	Proses Resonansi Magnetik Inti; terjadi Serapan Bila $\nu = \omega$ .....	115
<b>Gambar 3.8</b>	Komponen Utama dari Spektrometer Resonansi Magnetik Inti .....	119
<b>Gambar 3.9</b>	Spektrum NMR Fenil Aseton .....	120
<b>Gambar 3.10</b>	Penentuan Perbandingan Integral untuk Benzilasetat .....	123
<b>Gambar 3.11</b>	Perlindungan Diamagnetik Setempat terhadap Proton Disebabkan Elektron-elektron Valensinya .....	126
<b>Gambar 3.12</b>	Anisotropi Diamagnetik pada Benzena .....	132
<b>Gambar 3.13</b>	Anisotropi Diamagnetik pada Asetilena .....	132
<b>Gambar 3.14</b>	Spektrum NMR 1,1,2-Trikloroetana .....	133
<b>Gambar 3.15</b>	Spektrum NMR Etil Iodida .....	135
<b>Gambar 3.16</b>	Spektrum NMR 2-Nitropropana .....	136
<b>Gambar 3.17</b>	Dua Molekul Berbeda dalam Larutan dengan Kaitannya Perbedaan Spin antara Proton $H_A$ dan $H_B$ .....	138
<b>Gambar 3.18</b>	Segitiga Pascal .....	142

<b>Gambar 3.19</b>	Tetapan Penggabungan dalam Bentuk Pemecahan Etil .....	143
<b>Gambar 3.20</b>	Penggambaran Hubungan antara Pergeseran Kimia dengan Tetapan Penggabungan .....	144
<b>Gambar 3.21a</b>	Spektra NMR (Pergeseran Kimia)Toluena .....	153
<b>Gambar 3.21b</b>	Spektra NMR (Pergeseran Kimia) p-Xilena .....	153
<b>Gambar 3.21c</b>	Spektra NMR (Pergeseran Kimia) Mesitilena ...	153
<b>Gambar 3.22</b>	Spektrum NMR p-ters.-Butiltoluena .....	155
<b>Gambar 3.23</b>	Spektra NMR: <i>Splitting</i> dari Sinyal-sinyal .....	157
<b>Gambar 3.24</b>	Spektrum NMR Isopropilbromida .....	158
<b>Gambar 4.1</b>	Spektrum massa Metanol $m/z$ .....	162
<b>Gambar 4.2</b>	Spektrum massa Benzamida .....	163
<b>Gambar 4.3</b>	Bagan bagian kamar pengion .....	165
<b>Gambar 4.4</b>	Spektrum Massa Dodekana .....	182
<b>Gambar 4.5</b>	Spektrum Massa Sikloheksana .....	182
<b>Gambar 4.6</b>	Spektrum Massa Butan-2-ol .....	187
<b>Gambar 4.7</b>	Spektrum Massa 2 - Metil – 2 – Butanol .....	188
<b>Gambar 4.8</b>	Spektrum Massa Diisopropil Eter .....	193
<b>Gambar 4.9</b>	Spektrum Massa 2-Metilpentanal .....	197
<b>Gambar 4.10</b>	Spektrum Massa Heptan-3-on .....	199
<b>Gambar 4.11</b>	Spektrum Massa Metilbutirat .....	203
<b>Gambar 4.12</b>	Spektrum Massa Etil-1,3-Dimetilbutil Amina .....	206
<b>Gambar 4.13</b>	Spektrum Massa n-Butiramida .....	209



## DAFTAR TABEL

<b>Tabel 2.1</b>	Tipe transisi energi dalam daerah spektrum elektromagnetik .....	48
<b>Tabel 2.2</b>	Tetapan fisika untuk karbon terhibridisasi $sp$ , $sp^2$ dan $sp^3$ dan harga tetapan C–H .....	69
<b>Tabel 2.3</b>	Vibrasi rentangan untuk berbagai ikatan C – H terhibridisasi $sp^3$ .....	69
<b>Tabel 2.4</b>	Harga dasar normal Vibrasi rentangan C = O untuk gugus karbonil .....	73
<b>Tabel 2.5</b>	Pengaruh besarnya cincin, gugus tidak jenuh alfa, beta dan konjugasi dengan oksigen pada vibrasi C = O lakton .....	78
<b>Tabel 2.6</b>	Hubungan antara bahan prisma dan daerah jangkauan frekuensi .....	106
<b>Tabel 3.1</b>	Bilangan kuantum spin dan bilangan inti yang lazim .....	109
<b>Tabel 3.2</b>	Frekuensi dan kekuatan medan dari beberapa inti yang memiliki resonansi inti .....	113
<b>Tabel 3.3</b>	Pegeseran Kimia untuk senyawa yang memiliki tipe $CH_3X$ .....	125
<b>Tabel 3.4</b>	Pengaruh Substituen .....	126
<b>Tabel 3.5</b>	Tipe proton dengan berbagai pergeseran kimia .....	129
<b>Tabel 3.6</b>	Beberapa bentuk pemecahan umum yang teramati...	137
<b>Tabel 3.7</b>	Beberapa tetapan penggabungan dan harganya kira-kira (Hz) .....	145

<b>Tabel 4.1</b>	Massa-massa isotop eksak .....	169
<b>Tabel 4.2</b>	Limpahan isotop relatif unsur-unsur yang umum ..	170