

SPEKTROSKOPI VIBRASIONAL:
TEORI DAN APLIKASINYA UNTUK
ANALISIS FARMASI

**SPEKTROSKOPI VIBRASIONAL:
TEORI DAN APLIKASINYA UNTUK
ANALISIS FARMASI**

Abdul Rohman

GADJAH MADA UNIVERSITY PRESS

SPEKTROSKOPI VIBRASIONAL:

Teori dan Aplikasinya untuk Analisis Farmasi

Penulis:

Abdul Rohman

Korektor:

Tim UGM Press

Desain sampul:

Tim UGM Press

Tata letak isi:

Tim UGM Press

Penerbit:

Gajah Mada University Press

Anggota IKAPI

Ukuran: 15,5 X 23 cm; x + 120 hlm

ISBN: 978-979-420-909-7

1902063-B5E-100(1)

Redaksi:

Jl. Grafika No. 1, Bulaksumur

Yogyakarta, 55281

Telp./Fax.: (0274) 561037

ugmpress.ugm.ac.id | gmupress@ugm.ac.id

Cetakan pertama: November 2014

Cetakan kedua: Maret 2019

2803.044.03.19

Hak Penerbitan © 2014 Gajah Mada University Press

Dilarang mengutip dan memperbanyak tanpa izin tertulis dari penerbit, sebagian atau seluruhnya dalam bentuk apa pun, baik cetak, photoprint, microfilm, dan sebagainya.

PENGANTAR

Dengan mengucapkan syukur ke hadirat Allah, Tuhan Yang Maha Esa, akhirnya buku *Spektroskopi Vibrasional: Teori dan Aplikasinya untuk Analisis Farmasi* telah selesai penulis susun. Maksud dari penerbitan buku ini adalah untuk membantu mahasiswa Farmasi serta mahasiswa lain yang salah satu mata kuliahnya adalah Spektroskopi dan Analisis Farmasi. Di samping itu, buku ini juga dapat digunakan untuk melengkapi kepustakaan di bidang Ilmu Farmasi terutama yang terkait dengan spektroskopi dan kemometrika.

Dalam penyusunan buku ini tidak lupa penulis mengucapkan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada keluarga besar Bagian Kimia Farmasi, Fakultas Farmasi UGM serta Laboratorium Penelitian dan Pengujian Terpadu (LPPT) UGM atas dukungannya selama penulis menyiapkan buku ini. Penulis menyadari bahwa penyiapan buku ini telah mengganggu konsentrasi penulis dalam menjalankan tugas sehari-hari sebagai dosen di Fakultas Farmasi UGM dan sebagai Kepala Bidang Layanan Penelitian, Kalibrasi, dan Sertifikasi di LPPT-UGM. Ucapan terima kasih juga penulis sampaikan kepada para guru, khususnya Alm. Prof. Dato' Dr. Yaakob bin Che Man dari Institut Penyelidikan Produk Halal, Universiti Putra Malaysia (UPM), yang telah membimbing, memotivasi, dan membantu penulis ketika penulis mengambil program S-3 di UPM, terutama terkait dengan penggunaan spektroskopi inframerah (salah satu jenis spektroskopi vibrasional) untuk analisis minyak/lemak.

Tiada gading yang tak retak, begitu juga dengan buku ini. Akhirnya, penulis mengharapkan saran, kritik, dan masukan yang membangun demi perbaikan buku ini di masa yang akan datang. Penulis berharap semoga buku ini dapat bermanfaat bagi kita semua. Amin.

Yogyakarta, Maret 2014

Penulis

Abdul Rohman

DAFTAR ISI

PENGANTAR	v
DAFTAR ISI	vii
BAB I SPEKTROSKOPI VIBRASIONAL	1
1.1 Pendahuluan	1
1.2 Radiasi Elektromagnetik, Spektroskopi, dan Jenis Vibrasi	3
1.3 Spektroskopi Inframerah Tengah.....	6
1.3.1 Penyerapan Sinar Inframerah Tengah	7
1.3.2 Bentuk-Bentuk Vibrasi	8
1.3.3 Interpretasi Spektrum Inframerah.....	16
1.4 Spektroskopi Inframerah Dekat	21
1.4.1 Pita Overtone dan Pita Gabungan	22
1.4.2 Osilasi Anharmonik	23
1.4.3 Jenis Pita-Pita Serapan Inframerah Dekat	24
Daftar Pustaka	27
BAB II SISTEM INSTRUMENTASI DAN PENANGANAN SAMPEL	28
2.1 Pendahuluan	28
2.2 Sistem Instrumentasi Spektrofotometer Inframerah Tengah (MIR)	28
2.2.1 Sistem Instrumentasi	28
2.2.2 Kalibrasi Spektrofotometer Inframerah	37
2.2.3 Cara Pengolahan Sampel	38
2.3 Sistem Instrumentasi Spektrofotometer Inframerah Dekat (NIR)	53
2.3.1 Sistem Instrumentasi	53
2.3.2 Aspek Praktik Pengukuran Spektra Inframerah Dekat	54
Daftar Pustaka	55

BAB III KEMOMETRIKA	56
3.1 Pendahuluan	56
3.2 Kemometrika	57
3.3 Kemometrika yang Terkait dengan Teknik Pemrosesan Spektra	60
3.3.1 Koreksi Dasar (<i>Baseline</i>)	61
3.3.2 Penghalusan (<i>Smoothing</i>) Spektrum	62
3.3.3 Spektra Perbedaan	64
3.3.4 Penurunan (<i>Derivatisasi</i>)	65
3.3.5 Normalisasi	67
3.3.6 Koreksi Penghamburan Multiplikatif (<i>Multiplicative Scatter Correction</i>)	67
3.3.7 <i>Standard Normal Variate</i>	67
3.4 Analisis Pengelompokan dengan Kemometrika	68
3.4.1 Analisis Komponen Utama	68
3.4.2 Analisis Kluster	73
3.4.3 Analisis Diskriminan	76
3.4.4 Metode Tetangga Terdekat K (<i>K-Nearest Neighbor</i>)	78
3.5 Kalibrasi Multivariat	79
3.5.1 Metode Kuadrat Terkecil Klasik (<i>Classical Least Square</i>)	80
3.5.2 Regresi Linier Ganda Bertahap (<i>Stepwise Multiple Linear Regression, SMLR</i>)	81
3.5.3 Regresi Komponen Utama (<i>Principle Component Regression, PCR</i>)	82
3.5.4 Regresi Kuadrat Terkecil Sebagian (<i>Partial Least Square, PLS</i>)	82
Daftar Pustaka	83
BAB IV APLIKASI SPEKTROKOPI INFRAMERAH TENGAH DALAM BIDANG FARMASI	85
4.1 Pendahuluan	85
4.2 Penggunaan Spektroskopi Inframerah untuk Analisis Kualitatif	85
4.2.1 Parasetamol	86
4.2.2 Asetosal	87
4.2.3 Deksametason	88
4.2.4 Garam Kalium Fenoksimetil Penisilin	89

4.3 Spektrofotometri IR sebagai Teknik Sidik Jari (<i>Fingerprint</i>)	90
4.4 Spektrofotometri IR sebagai Metode untuk Identifikasi Polimorfi	91
4.5 Spektra IR untuk Pemantauan Pelepasan Obat	94
4.6 Penggunaan Spektra IR untuk Analisis Kuantitatif Bahan Aktif Obat	97
4.6.1 Hukum Lambert-Beer's	97
4.6.2 Kalibrasi dan Prediksi dengan Hukum Lambert-Beer's	99
4.6.3 Analisis Kuantitatif dengan Spektrofotometri Inframerah Tengah	99
Daftar Pustaka	102

BAB V APLIKASI SPEKTROSKOPI INFRAMERAH DEKAT DALAM ANALISIS FARMASI	104
5.1 Pendahuluan	104
5.2 Aplikasi Spektroskopi Inframerah Dekat dalam Bidang Farmasi	104
5.2.1 Identifikasi dan Kualifikasi	104
5.2.2 Polimorfisme	105
5.2.3 Granulasi dan Pengeringan	107
5.2.4 Analisis Kuantitatif dengan Spektroskopi Inframerah Dekat	108
Daftar Pustaka	117