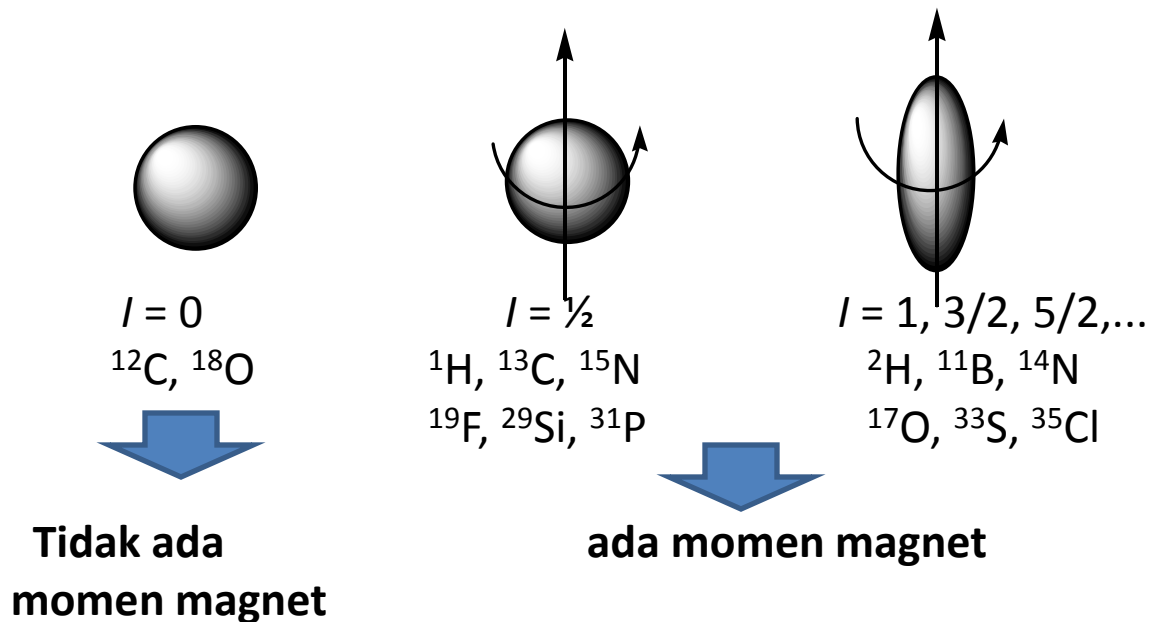


## **SPEKTROSKOPI RESONANSI MAGNET INTI (NMR = *NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE*)**

- Spektrum inframerah suatu senyawa memberikan gambaran mengenai gugus fungsional dalam sebuah molekul organik.
- Spektroskopi resonansi magnetik nuklir (NMR) memberikan gambaran mengenai jenis atom, jumlah, maupun lingkungan atom hidrogen ( $^1\text{H}$  NMR) maupun karbon ( $^{13}\text{C}$  NMR).
- Spektroskopi NMR didasarkan pada penyerapan gelombang radio oleh inti-inti tertentu dalam molekul organik, apabila molekul tersebut berada dalam medan magnet yang kuat.

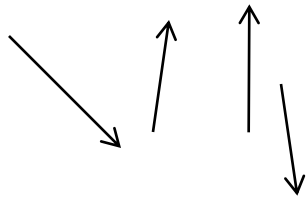
## Asal usul gejala NMR

Inti-inti atom unsur-unsur dapat dikelompokkan sebagai mempunyai spin atau tidak mempunyai spin. Suatu inti berspin akan menimbulkan medan magnet kecil, yang ditunjukkan oleh suatu momen magnet nuklir, berupa suatu vektor. Diantara inti-inti yang lebih umum yang memiliki spin dan tidak memiliki spin antara lain :

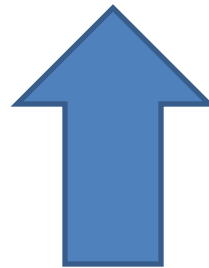


- Untuk setiap inti yang memiliki spin, jumlah kedudukan spin adalah tertentu dan ditentukan oleh bilangan kuantum spin inti  $I$ . Bilangan ini adalah tetap untuk setiap inti.
- Untuk inti dengan bilangan kuantum spin  $I$ , terdapat kedudukan spin berjumlah  $2I + 1$  yang berkisar dengan perbedaan dari  $+I$  hingga  $-I$ . Kedudukan spin individu sesuai dengan urutan  $-I, (-I + 1), \dots, (I-1), I$ .
- Sebagai contoh (inti hidrogen) mempunyai bilangan kuantum spin  $I = \frac{1}{2}$  maka akan mempunyai kedudukan spin ( $2 \times (1/2) + 1 = 2$ ) untuk intinya =  $-1/2$  dan  $+ \frac{1}{2}$ . Untuk klor,  $I = 3/2$ , maka terdapat kedudukan spin  $2 (3/2) + 1 = 4$ , untuk intinya :  $-3/2, -1/2, + \frac{1}{2}$ , dan  $+ 3/2$ .

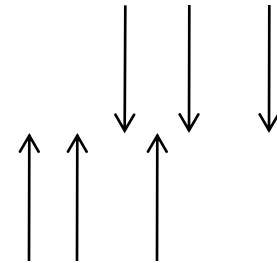
- Bila tidak ada medan magnet yang diberikan, semua kedudukan/ tingkatan spin dari suatu inti mempunyai tenaga yang sama, dengan arah tidak beraturan.
- Bila medan magnet digunakan, maka setiap inti yang berputar menghasilkan medan magnet, dengan arah momen magnet menjadi searah ( $\alpha$  atau  $+1/2$ ) atau berlawanan arah ( $\beta$  atau  $-1/2$ ) terhadap  $B_0$  (medan magnet luar)



tak ada medan  
arah momen magnet tidak  
beraturan

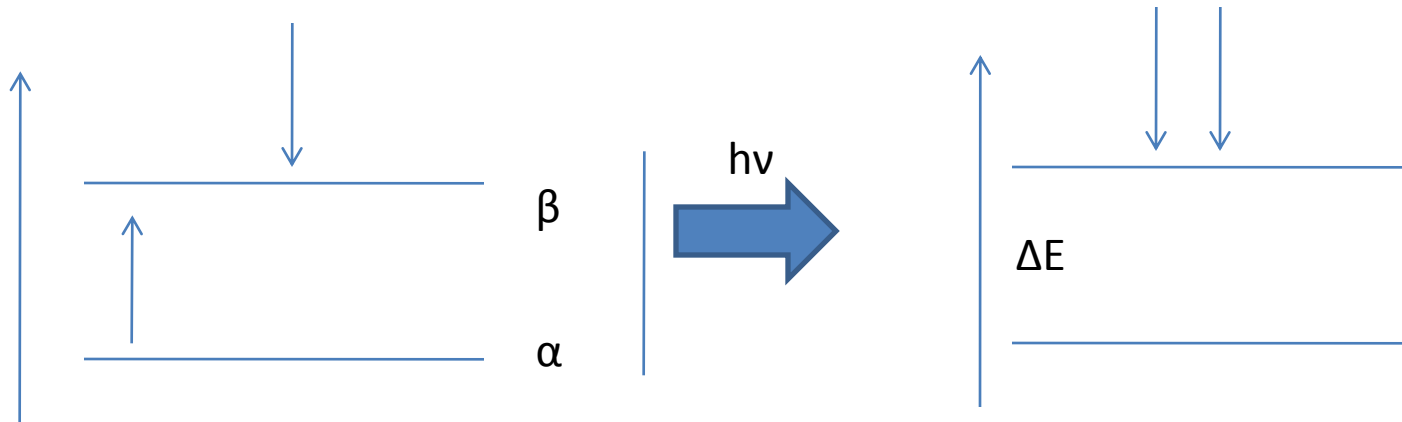


medan terpasang  
 $B_0$



arah momen magnet  
menjadi searah ( $\alpha$ ) atau  
berlawanan arah ( $\beta$ )  
terhadap  $B_0$  (medan  
magnet luar)

Kedudukan spin  $+\frac{1}{2}$  ( $\alpha$ ) mempunyai tenaga rendah kerana ia searah dengan medan, sedangkan kedudukan spin  $-\frac{1}{2}$  ( $\beta$ ) mempunyai tenaga tinggi kerana ia berlawanan dengan medan yang digunakan. Hingga pada penggunaan medan magnet kuat, kedudukan spin dipecah menjadi dua kedudukan dengan tenaga yang berbeda.



Perpindahan dari keadaan energi  $\alpha$  ke  $\beta$  = Resonansi

Perpindahan dari energi  $\beta$  ke  $\alpha$  = Relaksasi

- Supaya terjadi transisi proton dari keadaan spin yang satu ke keadaan spin yang lainnya, sampel dapat ditempatkan di daerah medan magnet yang kekuatannya tetap,  $B_0$ , dan frekuensi mengosilasi komponen vektor magnet radiasi elektromagnet,  $U$  diubah-ubah sampai dicapai resonansi.
- 
- Cara lain, menggunakan frekuensi radiasi elektromagnet yang tetap dan medan magnet diubah-ubah sampai dicapai keadaan resonansi. Cara ini dari segi pelaksanaan lebih memuaskan. Digunakan frekuensi pengosilasi yang tetap dan medan magnet diubah-ubah perlahan-lahan sampai dicapai keadaan resonansi.

Dengan menggunakan frekuensi pengosilasi tetap sebesar 60 MHz diperlukan medan magnet sebesar kurang lebih 14 000 gauss untuk resonansi proton. Medan magnet ( $B_0$ ) yang sangat besar digunakan untuk menjamin didapatnya pemisahan tingkat energi yang dapat diukur.

Makin besar medan magnet yang digunakan, makin besar perbedaan tenaga antara kedudukan-kedudukan spin yang ada :

$$\Delta E = f (B_0)$$

- Besarnya pemisahan tingkatan tenaga juga tergantung pada inti yang terlibat.
- Setiap inti (hidrogen atau karbon) mempunyai perbedaan momen magnetnya dengan momentum angularnya, **karena setiap inti mempunyai perbedaan muatan dan massa.**



- Perbandingan ini disebut perbandingan giro magnet ( $\gamma$ ), adalah tetap untuk setiap inti dan menentukan ketergantungan tenaga terhadap medan magnet.
- Frekuensi angular (frekuensi larmor) gerakan presisi dinyatakan

$$\omega_0 = \gamma B_0 \qquad \Delta E = \gamma (h/2\pi) B_0$$

$\gamma$  = perbandingan giromagnetik  
(tergantung pada jenis inti)

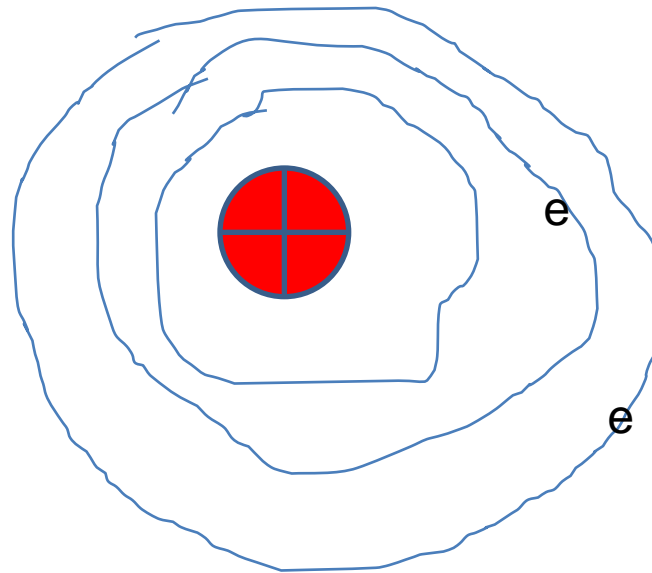
$$\Delta E = h U$$

$$U = (\gamma / 2\pi) B_0$$

## Pergeseran kimia (*Chemical shift*)

- Kegunaan yang besar dari resonansi magnet inti adalah karena tidak setiap proton dalam molekul beresonansi pada frekuensi yang identik sama.
- Setiap proton dalam molekul dikelilingi elektron, sehingga menimbulkan sedikit perbedaan lingkungan elektronik dari satu proton dengan proton lainnya.
- Proton-proton dilindungi oleh elektron-elektron yang mengelilingi, di dalam medan magnet, perputaran elektron-elektron valensi dari proton menghasilkan medan magnet yang melawan medan magnet luar yang digunakan.

- Besarnya perlindungan tersebut tergantung pada kerapatan elektron yang mengelilinginya. Makin besar kerapatan elektron yang mengelilingi inti, maka makin besar pula medan yang dihasilkan yang melawan medan luar yang digunakan ( $B_0$ ). Akibatnya inti/ proton merasakan adanya pengurangan medan yang mengenainya.
- Setiap inti atau proton dalam molekul mempunyai lingkungan kimia yang berbeda.



- Perbedaan dalam frekuensi resonansi adalah sangat kecil, sehingga sangat sukar untuk mengukur secara tepat frekuensi resonansi setiap proton. Oleh karena itu digunakan senyawa standar frekuensi yang ditambahkan dalam larutan senyawa yang akan diukur, dan frekuensi resonansi setiap proton dalam cuplikan diukur relatif terhadap frekuensi resonansi dari proton-proton senyawa standar.
- Salah satu senyawa standar yang digunakan adalah tetrametilsilan  $(\text{CH}_3)_4\text{Si}$ , disebut TMS. Senyawa ini dipilih karena proton-proton dari gugus metil jauh lebih terlindungi bila dibandingkan dengan kebanyakan senyawa cuplikan.

- Inti atom yang mempunyai nilai geseran kimia ( $\delta$ ) daerah rendah (dekat TMS) disebut *high shielded field* (daerah medan magnet tinggi), sedangkan daerah makin jauh dari TMS disebut *low shielded field* (daerah medan rendah).

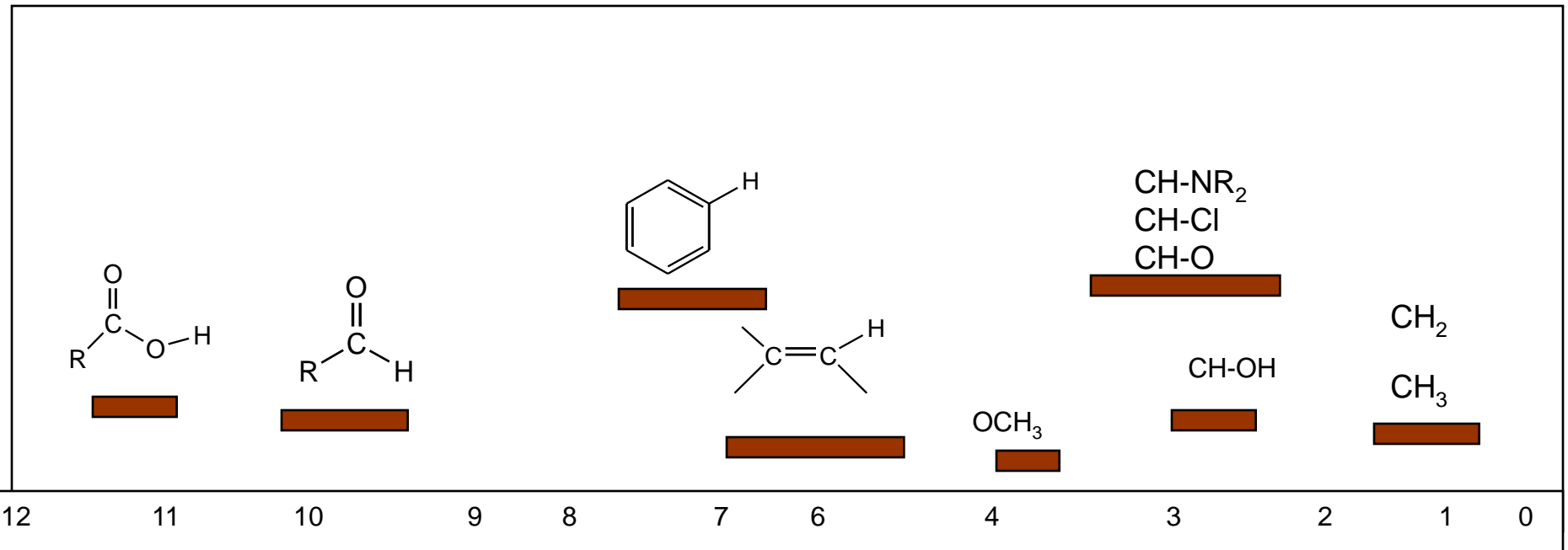


Kerapatan elektron disekeliling proton dipengaruhi oleh berbagai faktor antara lain :

1. **efek induksi** berbagai gugus yang bekerja melalui ikatan kimia yang terdapat pada proton, yang umumnya disebabkan oleh adanya atom-atom yang bersifat elektronegatif, seperti O, N, Cl. Proton atau inti atom yang makin dekat dengan atom elektronegatif elektron yang mengelilingi proton tersebut menjadi kurang rapat.
2. **Efek anisotropi suatu ikatan kimia**, seperti adanya ikatan kimia yang mengandung gugus alkena ( $C=C$ ), alkuna ( $C\equiv C$ ), karbonil ( $C=O$ ), dan aromatik (Ar). Efek anisotrop ini dapat menghasilkan medan magnet pada daerah proton yang memperkuat atau memperlemah medan magnet yang digunakan.

3. **Ikatan hidrogen**, pembentukan ikatan hidrogen dari suatu atom H dari gugus hidroksil dengan gugus karbonil (C=O) menyebabkan nilai geseran kimia ke arah medan rendah, menjauhi dari TMS dan akan muncul pada daerah sekitar 13 ppm
4. **Pelarut**, pelarut yang polar akan sedikit berpengaruh terhadap senyawa polar, sebab dapat terjadi ikatan hidrogen, terutama pada sampel yang mengandung gugus COOH, NH<sub>2</sub>, dan OH. Efek ikatan hidrogen terhadap pelarut dapat dihindari dengan menggunakan pelarut yang kurang polar, konsentrasi encer, atau temperatur ditinggikan.
5. **Temperatur**, akan sedikit berpengaruh pada sampel yang cenderung membentuk ikatan hidrogen.

Daerah geseran kimia proton bernilai antara 0 – 12 ppm,  
berikut daerah geseran kimia yang penting untuk beberapa  
proton



Arus cincin dari ikatan  $\pi$

Induksi dari ikatan  $\sigma$

Daerah medan rendah  
(*downfield*)



Daerah medan tinggi  
(*Highfield*)



Pergeseran kimia diberi simbol  $\delta$ , yang menyatakan bilangan untuk menunjukkan sejauh mana resonansi proton digeserkan dari standar atau TMS dengan satuan *parts per million* (ppm) terhadap frekuensi spektrometer yang dipakai. Harga  $\delta$  untuk suatu proton akan selalu sama tak tergantung apakah pengukuran dilakukan pada 60 MHz atau 100 MHz. Sebagai contoh, pada 60 MHz, pergeseran proton-proton dalam  $\text{CH}_3\text{Br}$  adalah 162 Hz dari TMS, sedang pada 100 MHz pergeseran adalah 270 Hz. Meskipun demikian keduanya mempunyai  $\delta$  yang sama ( $\delta = 2,7$  ppm).

$$\delta = \frac{162 \text{ Hz}}{60 \text{ MHz}} = \frac{270 \text{ Hz}}{100 \text{ MHz}} = 2,7 \text{ ppm}$$

Satuan pergeseran kimia kadang-kadang juga dilaporkan dalam tau ( $\tau$ ). Pada skala ini, kedudukan resonansi TMS dinyatakan 10, sehingga

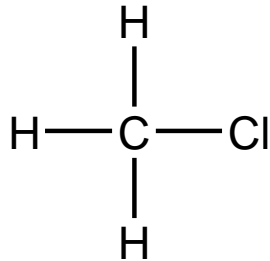
$$\tau = (10 - \delta)$$

## Lingkungan kimia proton

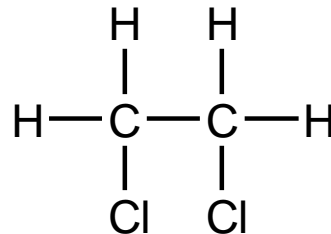
Hal lain yang menyebabkan spektrum NMR sangat bermanfaat adalah terjadinya pemecahan spin (pemecahan garis resonansi/ puncak/ sinyal) karena adanya coupling dari spin inti yang berdekatan dan memberikan informasi tentang inti magnet tetangga. Adanya pemecahan spin tersebut dapat memberikan informasi mengenai lingkungan kimia proton.

Ada tiga aturan/ hukum pemecahan spin-spin (penjodohan orde pertama):

1. proton ekuivalen kimia tidak menunjukkan pemecahan spin-spin. Hal ini dapat terjadi pada karbon yang sama atau pada karbon yang berbeda tetapi spin mereka tidak berpasangan

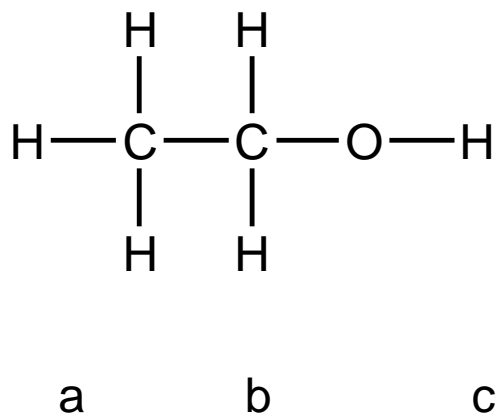


Tiga proton  
ekuivalen



Empat proton  
ekuivalen

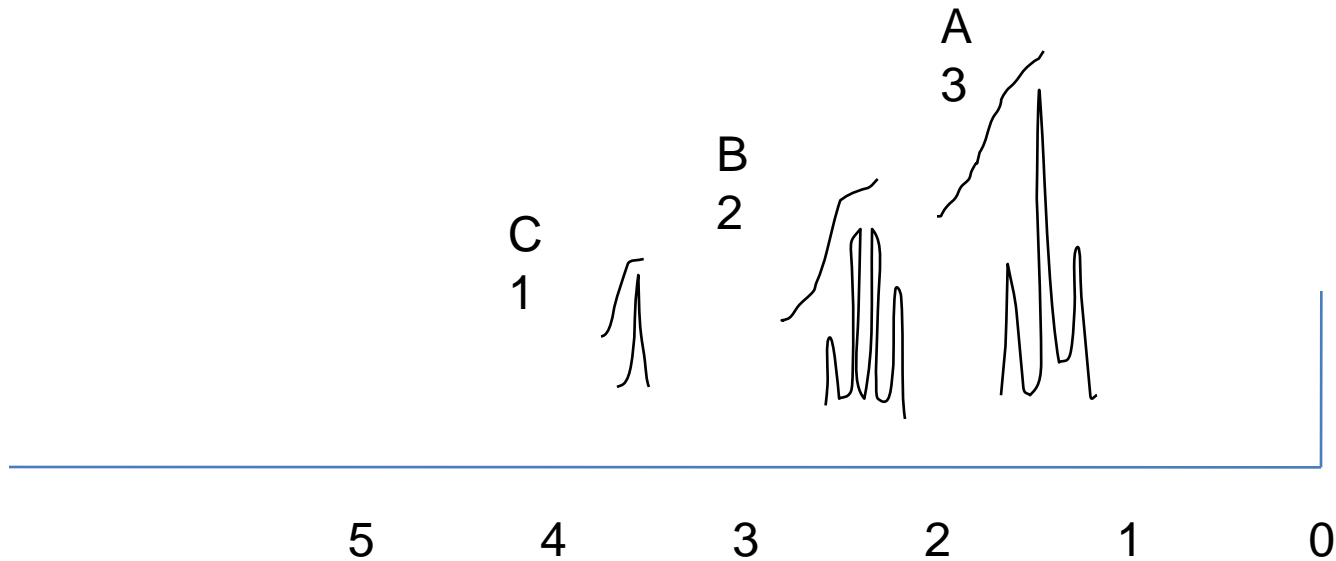
2. Proton yang memiliki  $n$  proton tetangga yang ekuivalen memberikan sinyal yang pecah menjadi puncak multiplet  $(n + 1)$  dengan konstanta kopling =  $J$



Proton a mempunyai dua proton tetangga, sinyal proton a akan pecah menjadi  $(2 + 1)$  puncak = 3 puncak (triplet)

Proton b mempunyai 3 proton tetangga, sehingga sinyal proton b akan pecah menjadi  $(3 + 1)$  puncak = 4 puncak (quartet)

Proton c tidak mempunyai tetangga (karena dipisahkan oleh heteroatom/ melewati tiga ikatan tunggal) akan muncul sebagai sinyal singlet. Bentuk spektra  $^1\text{H}$  NMR adalah sebagai berikut



Intensitas relatif masing-masing puncak pada sinyal tersebut mengikuti hukum segitiga pascal  $(x + 1)^n$ ,  $n$  = jumlah proton tetangga.  
Intensitas relatif masing-masing puncak pada sinyal tersebut mengikuti hukum segitiga pascal  $(x + 1)^n$ ,  $n$  = jumlah proton tetangga.

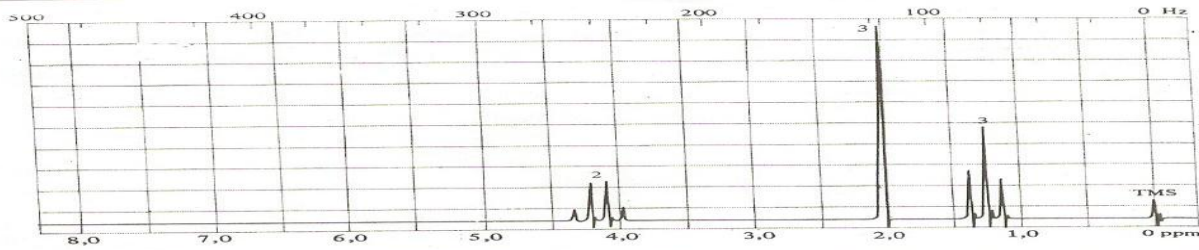
# Langkah-langkah cara menginterpretasi spektra NMR

Tentukan / perhatikan :

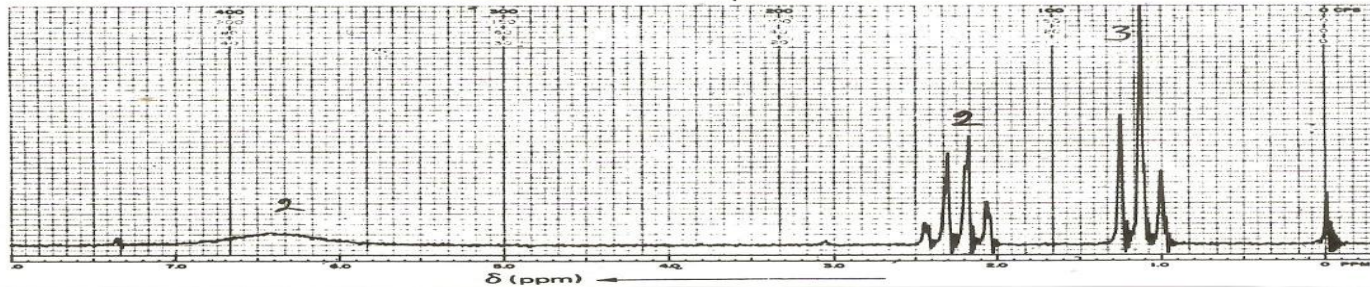
- Jumlah sinyal, menunjukkan ada berapa macam perbedaan proton yang terdapat dalam molekul.
- Kedudukan sinyal, ditunjukkan oleh geseran kimia ( $\delta$ ) ppm, menunjukkan jenis proton.
- Intensitas sinyal atau harga integrasi masing-masing sinyal, perbandingan harga integrasi menyatakan perbandingan jumlah proton.
- Pemecahan (splitting), menerangkan tentang lingkungan dari sebuah proton dengan proton lainnya yang berdekatan.

Cara penulisan data NMR :  $\delta$  ppm (jumlah H, m, J Hz),  
m = multiplisitas (singlet (s); doublet (d); triplet (t), quartet (q); dan multiplet (m)).

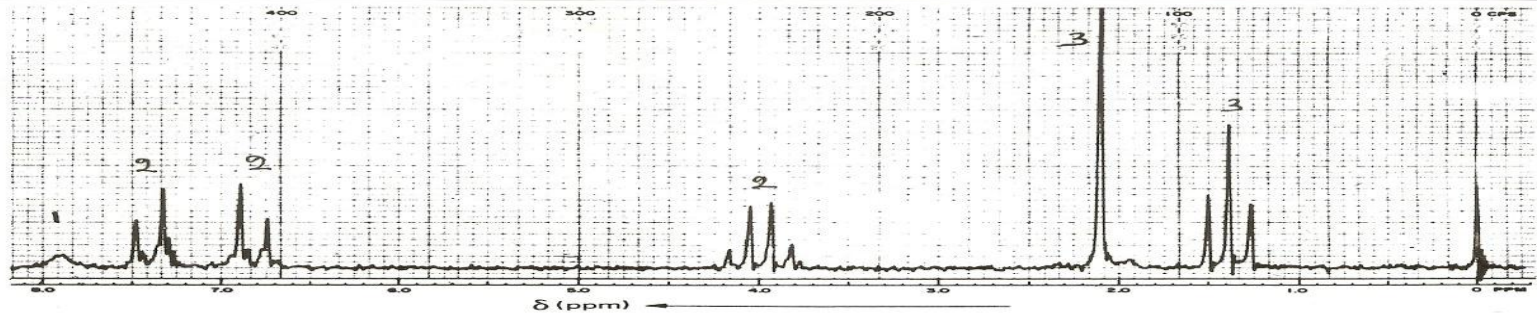
A



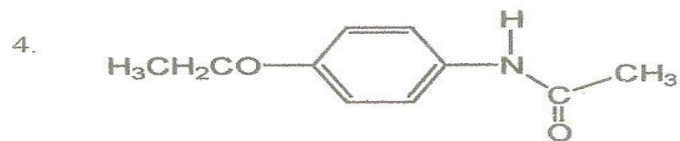
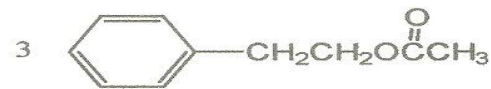
B



C



- Analisislah spektrum tersebut dan tentukan jumlah sinyal; kedudukan sinyal ( $\delta$  ppm); perbandingan intensitas masing-masing sinyal; pemecahan (multiplisitas), dan tentukan tetapan penjadohan (Hz)
- Pilihlah struktur molekul yang paling sesuai dengan spektrum tersebut.



# SPEKTROSKOPI KARBON-13

- Spektroskopi  $^{13}\text{C}$  NMR menghasilkan informasi struktur mengenai karbon-karbon dalam sebuah molekul organik.
- Dalam spektroskopi  $^1\text{H}$  NMR kita bekerja dengan isotop hidrogen alamiah dengan kelimpahan 99,985 %, atom hidrogen alamiah adalah  $^1\text{H}$ ,
- sedangkan atom karbon dalam alam 98,9 % adalah  $^{12}\text{C}$ , suatu isotop yang intinya tak mempunyai spin ( $I = 0$ ).
- Karbon -13 hanya merupakan 1,1 % atom karbon yang terdapat di alam ( $I = \frac{1}{2}$ ).

- Disamping itu transisi dari paralel ke antiparalel dari sebuah inti  $^{13}\text{C}$  adalah transisi energi rendah.
- Spektra  $^{13}\text{C}$  NMR hanya dapat diperoleh dengan spektrometer yang sangat sensitif. Kelimpahan  $^{13}\text{C}$  yang rendah akan mengurangi kerumitan spektra  $^{13}\text{C}$  dibandingkan spektra  $^1\text{H}$  NMR.
- Untuk menentukan spektra  $^{13}\text{C}$  luas di bawah puncak tidak perlu sebanding terhadap jumlah atom-atom karbon yang ekuivalen, akibatnya spektra  $^{13}\text{C}$  tidak dapat diintegrasikan.

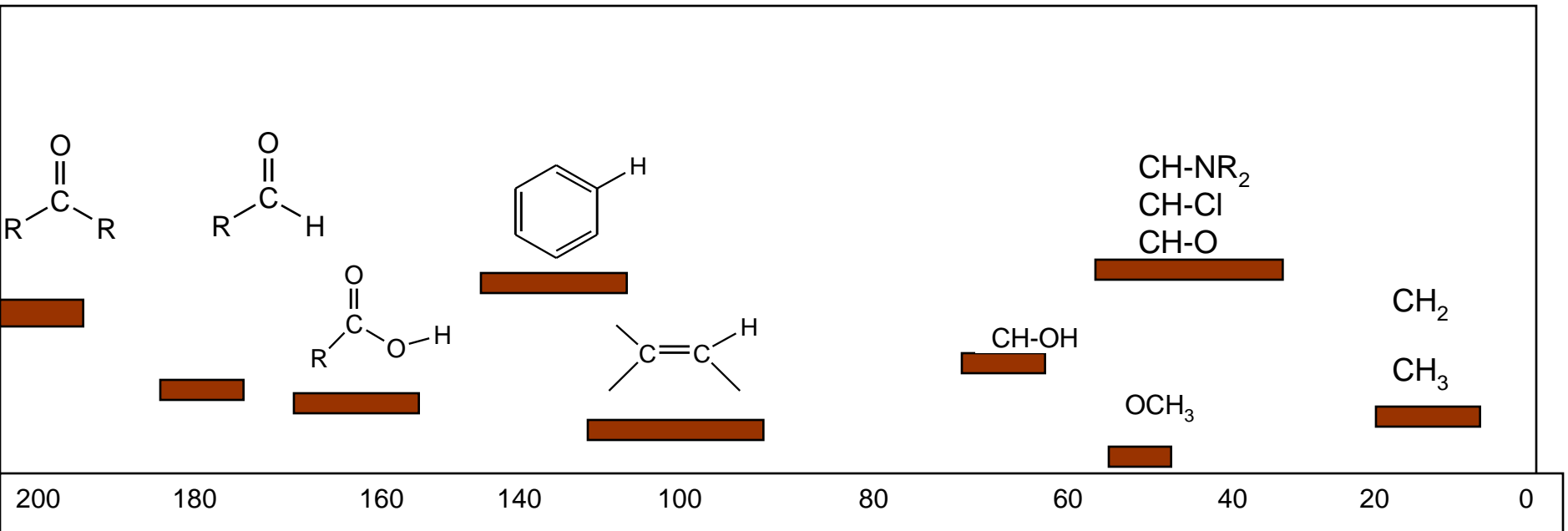


- Terdapat dua tipe utama spektrum  $^{13}\text{C}$  NMR. Tipe spektrum  $^{13}\text{C}$  NMR off resonansi,
- interaksi antar karbon yang berdekatan diabaikan, tetapi karbon dapat berinteraksi dengan proton yang diikat oleh masing-masing karbon menyebabkan terjadinya splitting yang menunjukkan puncak  $(n + 1)$ ,  $n =$  jumlah H, oleh karena itu sinyal masing-masing karbon dari :
  - karbon metil ( $\text{CH}_3\text{-C}$ ) akan muncul 4 puncak
  - karbon metilen ( $\text{-CH}_2\text{-}$ ) akan muncul 3 puncak
  - karbon metil ( $\text{-CH-}$ ) akan muncul 2 puncak
  - karbon kuarterner ( $\text{-C-}$ ) akan muncul 1 puncak

- Spektrum  $^{13}\text{C}$  NMR off resonansi ini memiliki keuntungan, karena langsung dapat membedakan jenis-jenis karbon, namun akan menjadi sangat rumit apabila banyak terdapat sinyal karbon yang saling overlap.
- Tipe spektrum karbon yang kedua adalah spektrum dekoupling-proton  $^{13}\text{C}$ , adalah suatu spektrum dimana  $^{13}\text{C}$  tidak terkopling dengan  $^1\text{H}$ , jadi tidak menunjukkan pemisahan spin-spin.
- Dekoupling dapat dicapai secara elektronis dengan menggunakan suatu radio frekuensi kedua terhadap sampel. Energi tambahan tersebut menyebabkan terjadinya interkonversi cepat antara keadaan spin paralel dan antiparalel dari proton-proton tersebut.

- Akibatnya sebuah inti  $^{13}\text{C}$  hanya melihat suatu rata-rata dari dua keadaan spin proton dan isyaratnya tak akan terurai.
- Karena tak ada penguraian dalam suatu spektrum dekoupling-proton, maka isyarat untuk tiap kelompok atom karbon yang ekuivalen secara magnetik akan muncul sebagai suatu singlet.
- Untuk membedakan jenis karbon, metil, metilen, metin, dan karbon kuarterner digunakan analisis spektrum DEPT  $^{13}\text{C}$  NMR atau NMR dua dimensi (HMQC = korelasi antara proton-karbon satu ikatan). Ada tiga jenis spektrum DEPT  $^{13}\text{C}$  NMR, yaitu :
  - DEPT  $90^\circ$  = hanya muncul sinyal C-H
  - DEPT  $135^\circ$  = muncul sinyal CH dan  $\text{CH}_3$  masing-masing berharga positif, sedangkan sinyal  $\text{CH}_2$  akan muncul sebagai sinyal berharga negatif.

Daerah geseran kimia proton bernilai antara 0 – 200 ppm,  
 berikut daerah geseran kimia yang penting untuk beberapa  
 jenis karbon



Arus cincin dari ikatan  $\pi$

Induksi dari ikatan  $\sigma$

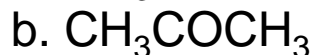
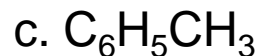
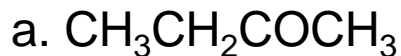
Daerah medan rendah  
 (*downfield*)



Daerah medan tinggi  
 (*Highfield*)

# latihan

1. Buatlah sketsa spektrum  $^1\text{H}$  dan  $^{13}\text{C}$  NMR yang diharapkan dari senyawa berikut :



2. Tentukan struktur senyawa berikut :

a. Senyawa dengan rumus molekul  $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$  menunjukkan data spektrum  $^1\text{H}$  NMR sebagai berikut :  $\delta$  1,0 ppm (6 H, d);  $\delta$  4,0 ppm (1 H, m);  $\delta$  4,8 ppm (1 H, s).

b. Senyawa dengan rumus molekul  $\text{C}_7\text{H}_8\text{O}$  menunjukkan data spektrum  $^1\text{H}$  NMR sebagai berikut :  $\delta$  2,0 ppm (1 H, s);  $\delta$  4,5 ppm (2 H, s);  $\delta$  7,3 ppm (5 H, s).

3. Bagaimana membedakan antara senyawa dalam pasangan berikut ini, dengan memanfaatkan spektroskopi inframerah ,  $^1\text{H}$  dan  $^{13}\text{C}$  NMR:

a. 1-propanol dan propilen oksida

b. etanol dan 1,2-etanadiol

c. etanol dan kloroetana

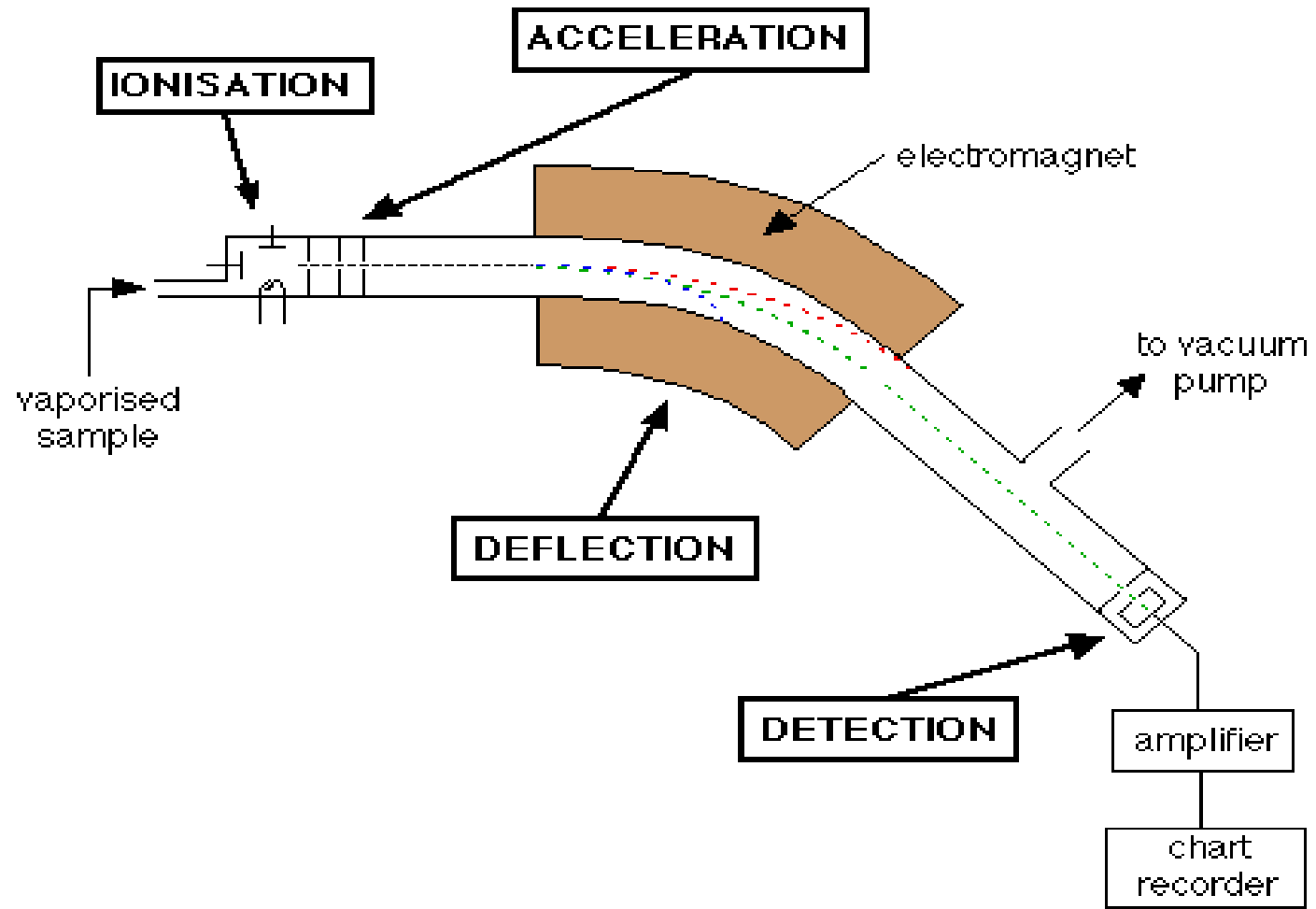
d. asam asetat dan aseton

# SPEKTROSKOPI MASSA

## **Prinsip dasar kerja spektroskopi massa**

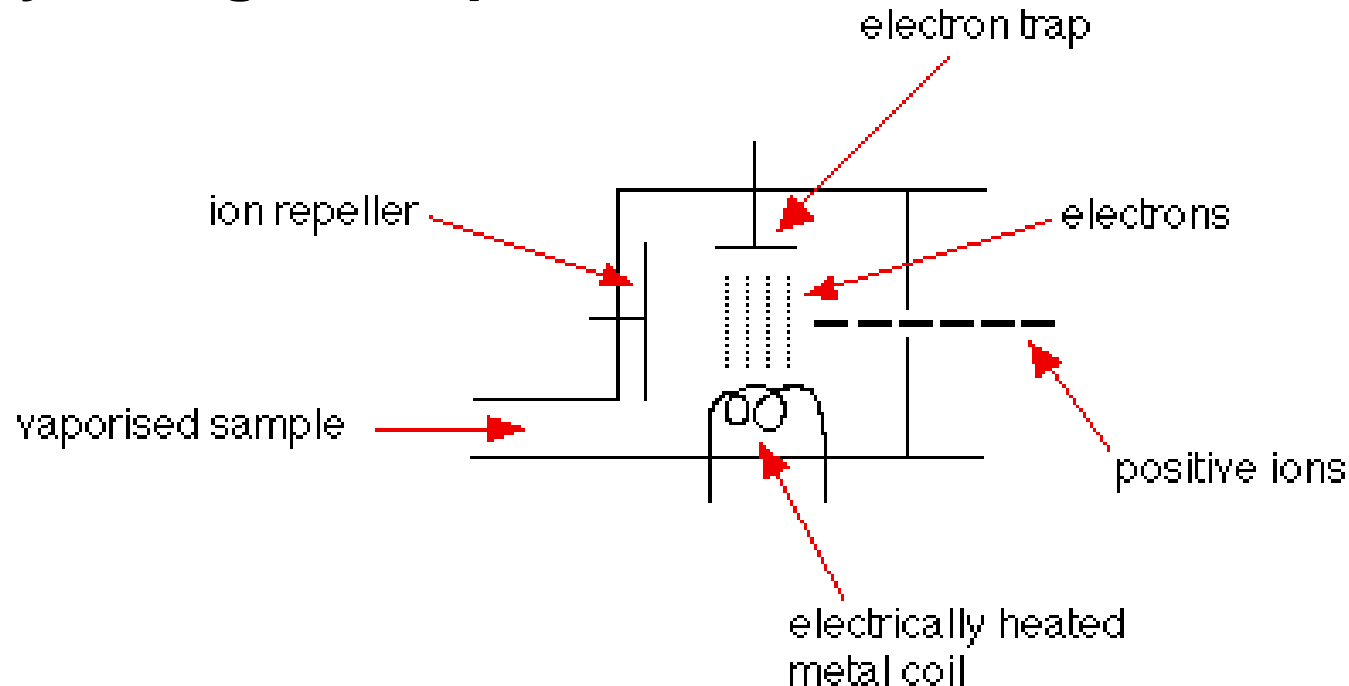
Spektroskopi massa berfungsi untuk :

- menghasilkan berkas sinar kation dari zat
- menghasilkan berkas kation menjadi bentuk spectrum massa ( $m/z$ )
- mendeteksi dan mencatat nilai massa relative ( $m/z$ ) dan kelimpahan isotopnya (%) atau intensitasnya



## Tahap pertama : **ionisasi**

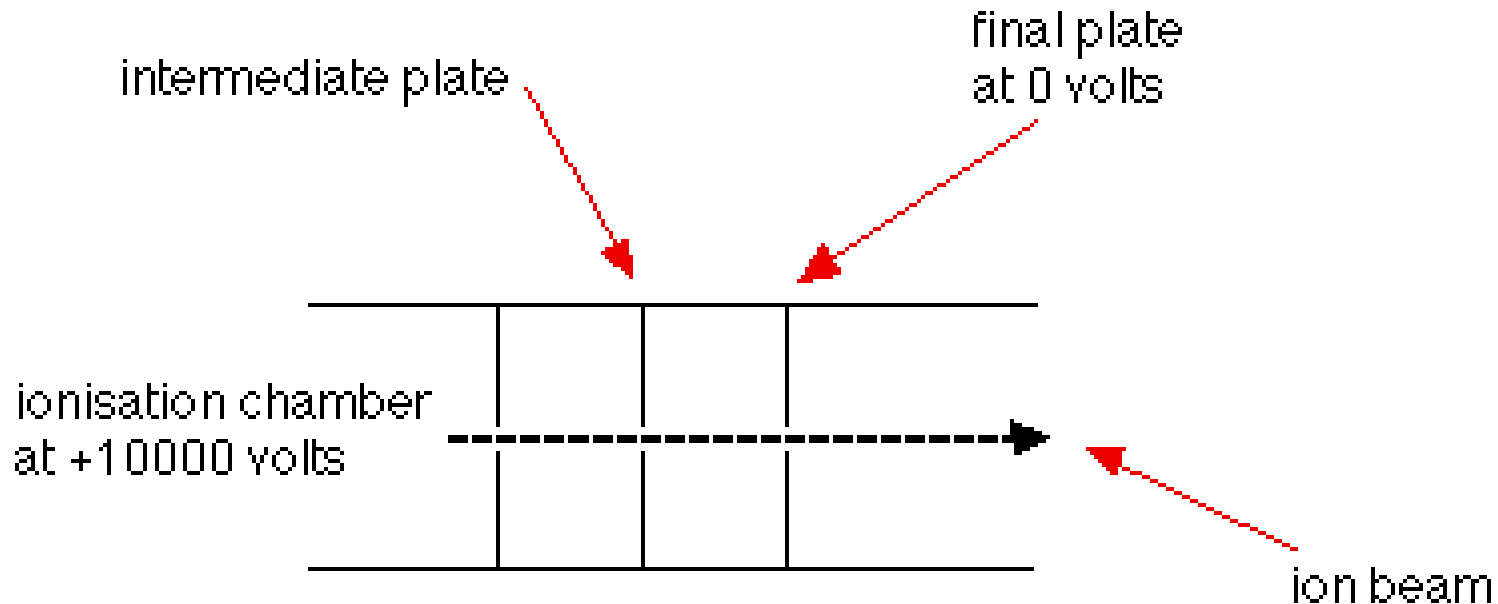
Atom di-ionisasi dengan mengambil satu atau lebih elektron dari atom tersebut supaya terbentuk ion positif. Ini juga berlaku untuk unsur-unsur yang biasanya membentuk ion-ion negatif (sebagai contoh, klor) atau unsur-unsur yang tidak pernah membentuk ion (sebagai contoh, argon). **spektrometer massa ini selalu bekerja hanya dengan ion positif.**





## Tahap kedua : **Percepatan**

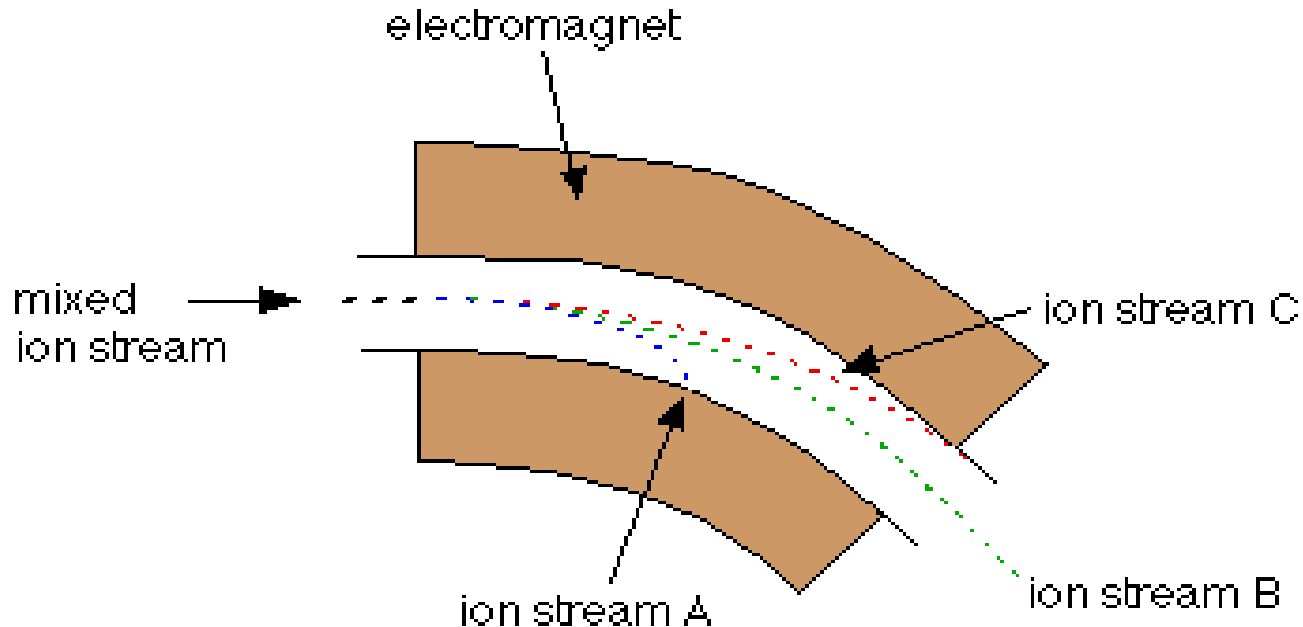
Ion-ion tersebut dipercepat supaya semuanya mempunyai kinetik yang sama.



Ion-ion positif yang ditolak dari ruang ionisasi tersebut akan melewati 3 celah, dimana celah terakhir itu bermuatan 0 V. Celah yang berada di tengah mempunyai voltase menengah. Semua ion-ion tersebut dipercepat sampai menjadi sinar yang sangat terfokus.

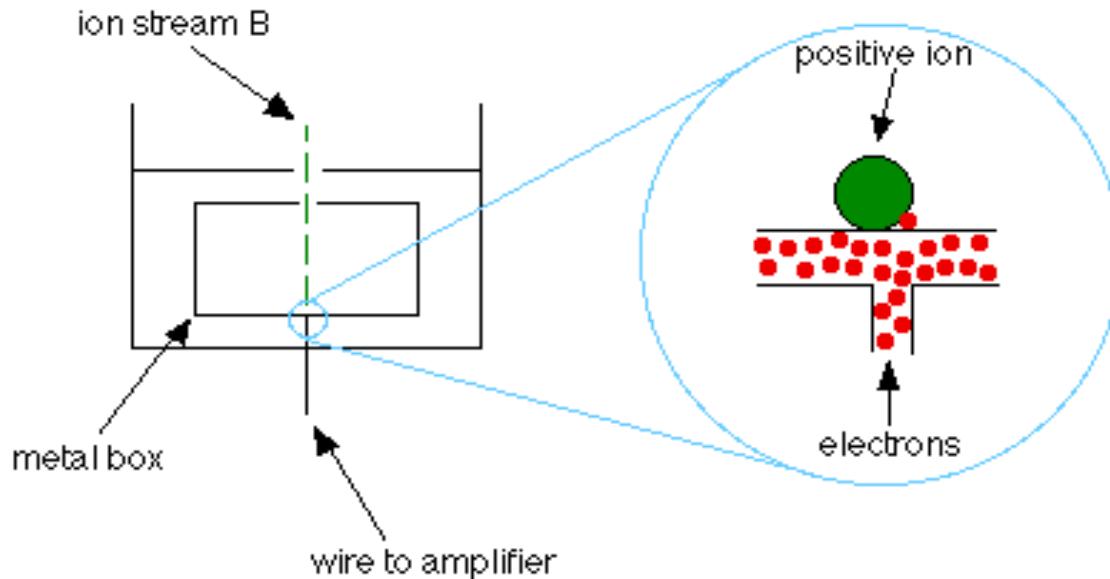
## Tahap ketiga : **Pembelokan**

Ion-ion tersebut dibelokkan dengan menggunakan medan magnet, pembelokan yang terjadi tergantung pada massa ion tersebut. Semakin ringan massanya, akan semakin dibelokkan. Besarnya pembelokannya juga tergantung pada besar muatan positif ion tersebut. Dengan kata lain, semakin banyak elektron yang diambil pada tahap 1, semakin besar muatan ion tersebut, pembelokan yang terjadi akan semakin besar.



## Tahap keempat : **Pendeteksian**

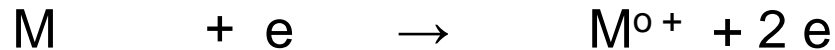
Sinar-sinar ion yang melintas dalam mesin tersebut dideteksi dengan secara elektrik.



Ketika sebuah ion menubruk kotak logam, maka ion tersebut akan dinetralisasi oleh elektron yang pindah dari logam ke ion (gambar kanan). Hal ini akan menimbulkan ruang antara elektron-elektron yang ada dalam logam tersebut, dan elektron-elektron yang berada dalam kabel akan mengisi ruang tersebut. Aliran elektron di dalam kabel itu dideteksi sebagai arus listrik yang bisa diperkuat dan dicatat. Semakin banyak ion yang datang, semakin besat arus listrik yang timbul.

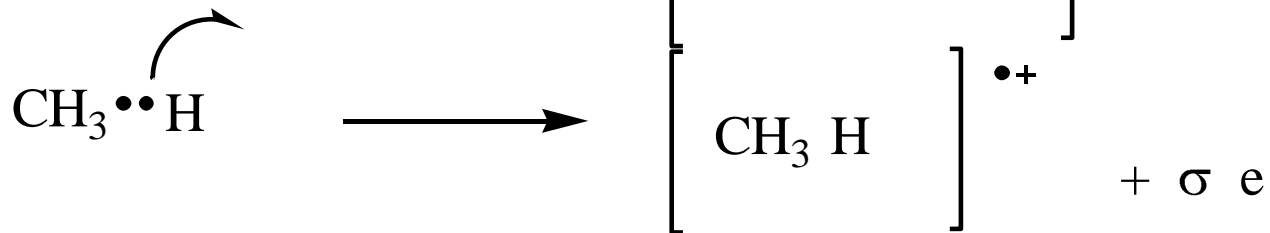
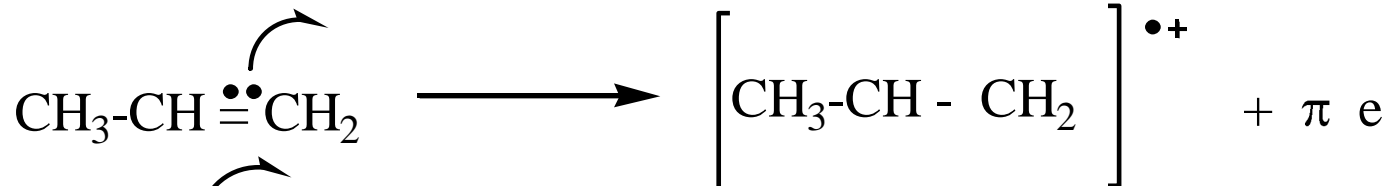
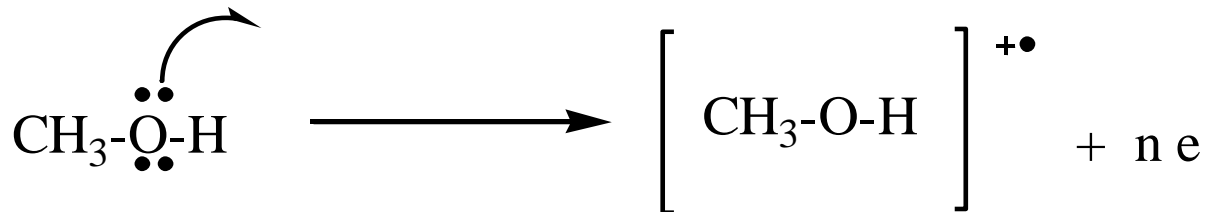
## Ionisasi dan fragmentasi

Dalam spektrofotometer massa, reaksi pertama suatu molekul adalah ionisasi awal, pengambilan sebuah elektron.

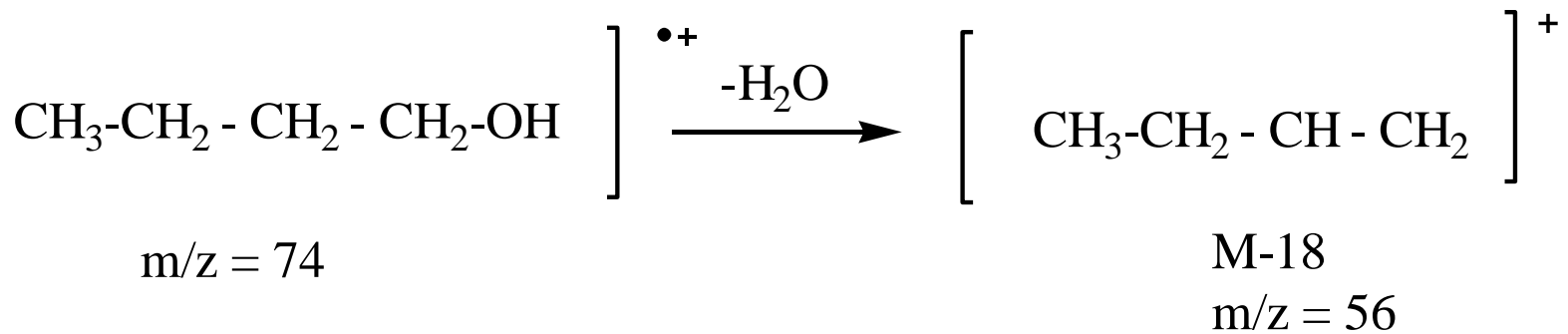


$M^{\circ+}$  disebut ion massa molekul ( $m/z$  paling besar, peak paling kanan pada spectrum MS).

Elektron yang paling mudah terlepas dalam molekul biasanya adalah elektron dalam orbital berenergi tertinggi. Jika sebuah molekul mempunyai electron-electron  $n$  (menyendiri), maka salah satunya akan dilepaskan. Jika tidak terdapat electron  $n$ , maka akan dilepaskan sebuah elektron  $\pi$ , dan jika tidak terdapat electron  $\pi$  barulah elektron pada orbital sigma ( $\sigma$ ).

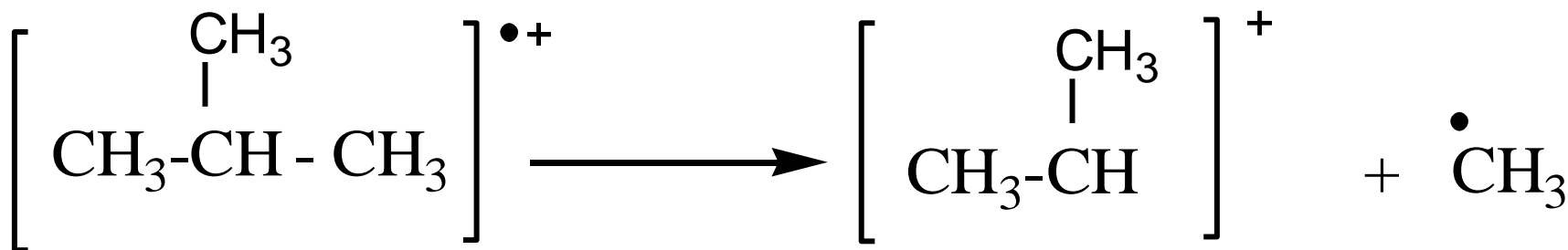


- Setelah ionisasi awal, ion molekul akan mengalami fragmentasi, suatu proses dimana radikal-radikal bebas atau molekul netral kecil dilepaskan dari ion molekul tersebut. Sebuah ion molekul tidak pecah secara acak, melainkan cenderung membentuk fragmen-fragmen yang paling stabil.
- Dalam persamaan yang menunjukkan fragmentasi biasanya fragmen radikal bebas tidak dituliskan karena tidak terdeteksi dalam spektrofotometer massa. Beberapa molekul kecil yang stabil yang mudah terlepas dari ion molekul antara lain H<sub>2</sub>O; CO<sub>2</sub>; CO; C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>



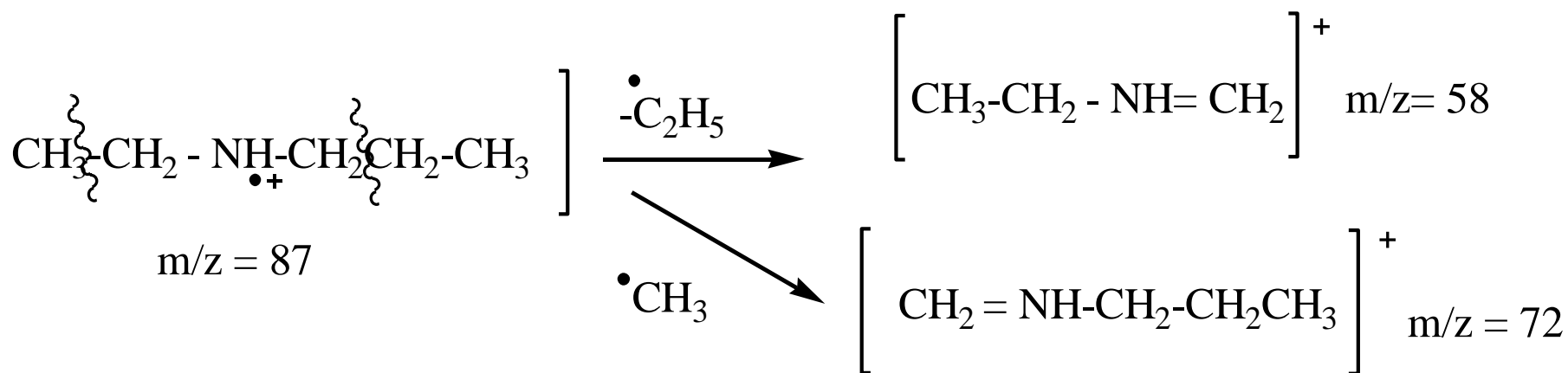
## Efek percabangan

Percabangan dalam suatu rantai hydrogen menghasilkan fragmentasi yang terjadi terutama pada cabang, karena radikal ion sekunder dan karbokation sekunder lebih stabil dari pada bentuk primer, sebagai contoh ion molekul metilpropana menghasilkan terutama kation isopropyl dan radikal metil.



## Efek heteroatom

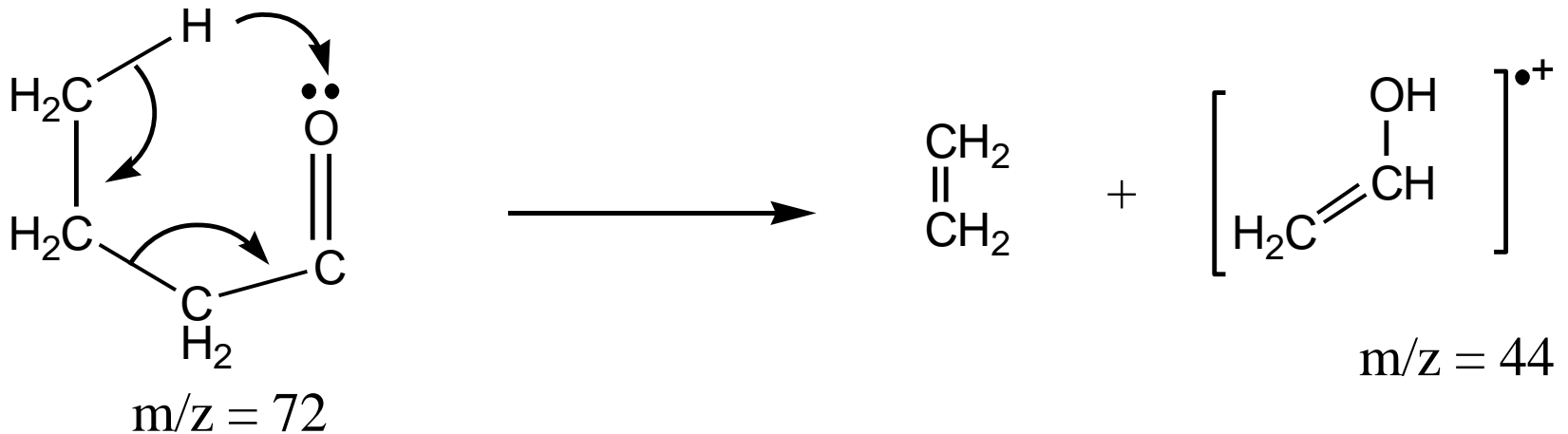
Fragmentasi ion molekul biasa terjadi pada posisi  $\alpha$  terhadap heteroatom, terutama terjadi pada amina atau eter





## Penataan ulang Mc Lafferty

Penataan ulang Mc Lafferty terjadi bila terdapat sebuah atom hidrogen  $\gamma$  terhadap gugus karbonil dalam ion molekul



## Beberapa aturan dalam spektroskopi MS

- Hukum nitrogen

Suatu molekul yang massa molekulnya genap tidak mungkin mengandung nitrogen, walaupun mengandung nitrogen maka jumlah nitrogennya harus genap. Pecahan molekul umumnya bermassa ganjil kecuali kalau terjadi penataan ulang.

- Jumlah ketidakjenuhan (DBE = *double bond ekuivalent*)

$$= (\text{jumlah karbon} + 1) - \frac{1}{2} (\sum H - \sum X + \sum N)$$

H = hidrogen; X = halogen; N = nitrogen