

IDENTIFIKASI HASIL SINTESIS SENYAWA ORGANIK MENGGUNAKAN SPEKTROFOTOMETRI INFRAMERAH (IR), ^1H -NMR, DAN ^{13}C -NMR

**Nadiah Nofri Yani^{1)*}, Nurjumiati²⁾, Nur Adinda Anggraini³⁾, Farah Nadhira⁴⁾,
Nita Rusdiana⁵⁾**

Universitas Muhammadiyah A.R Fahcrudhin, Kab. Tangerang, Indonesia

nadianofriyani1225@gmail.com^{*1)}; nurjumiati18@gmail.com^{*2)}
dinda02082007@gmail.com^{*3)} farahnadhira57@gmail.com

Abstrak

Sintesis senyawa organik merupakan tahap penting dalam pengembangan senyawa kimia dan bahan aktif farmasi. Untuk memastikan keberhasilan sintesis, diperlukan metode identifikasi struktur molekul yang akurat dan reliabel. Penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi hasil sintesis senyawa organik menggunakan metode spektrofotometri inframerah (IR), spektroskopi proton nuclear magnetic resonance (^1H -NMR), dan karbon-13 nuclear magnetic resonance (^{13}C -NMR). Spektrofotometri IR digunakan untuk mengidentifikasi gugus fungsi utama berdasarkan pita serapan karakteristik, sedangkan spektroskopi ^1H -NMR dan ^{13}C -NMR digunakan untuk mengonfirmasi lingkungan atom hidrogen dan karbon dalam struktur molekul. Hasil analisis menunjukkan adanya kesesuaian antara data spektrum yang diperoleh dengan struktur senyawa yang diharapkan, yang ditandai dengan munculnya pita serapan dan sinyal NMR khas. Berdasarkan hasil tersebut, dapat disimpulkan bahwa senyawa hasil sintesis telah terbentuk sesuai dengan struktur yang direncanakan.

Kata kunci: sintesis senyawa, spektrofotometri IR, ^1H -NMR, ^{13}C -NMR, identifikasi struktur

Abstract

Organic compound synthesis is an essential stage in the development of chemical compounds and pharmaceutical active ingredients. To ensure the success of the synthesis process, accurate and reliable molecular structure identification methods are required. This study aims to identify the synthesized organic compounds using infrared (IR) spectrophotometry, proton nuclear magnetic resonance (^1H -NMR) spectroscopy, and carbon-13 nuclear magnetic resonance (^{13}C -NMR) spectroscopy. IR spectrophotometry was employed to identify the main functional groups based on their characteristic absorption bands, while ^1H -NMR and ^{13}C -NMR spectroscopy were used to confirm the hydrogen and carbon atomic environments within the molecular structure. The analysis results indicate a good agreement between the obtained spectral data and the expected compound structure, as evidenced by the presence of characteristic absorption bands and NMR signals. Based on these findings, it can be concluded that the synthesized compound was successfully formed according to the intended structure.

Keywords: compound synthesis, IR spectrophotometry, ^1H -NMR, ^{13}C -NMR, structural identification

Received: Januari 2026

Reviewed: Januari 2026

Published: Januari 2026

Plagirism Checker No 832

Prefix DOI : Prefix DOI :

10.8734/Nutricia.v1i2.365

Copyright : Author

Publish by : Medic Nutricia



This work is licensed under
a [Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

PENDAHULUAN

Sintesis senyawa organik merupakan salah satu bidang fundamental dalam ilmu kimia yang memiliki peranan sangat penting, khususnya dalam pengembangan senyawa kimia baru dan bahan aktif farmasi. Proses sintesis memungkinkan perancangan struktur molekul tertentu yang diharapkan memiliki aktivitas biologis, sifat fisikokimia, serta stabilitas yang sesuai untuk diaplikasikan dalam bidang farmasi. Oleh karena itu, sintesis senyawa organik tidak hanya berfokus pada pembentukan senyawa baru, tetapi juga pada pemahaman struktur dan karakteristik senyawa yang dihasilkan (Silverstein et al., 2017).

Dalam bidang farmasi, sintesis senyawa organik sering digunakan sebagai langkah awal dalam pengembangan obat, baik sebagai kandidat bahan aktif farmasi maupun sebagai senyawa antara. Keberhasilan suatu sintesis senyawa sangat bergantung pada ketepatan reaksi yang dilakukan serta kondisi reaksi yang digunakan. Namun demikian, terbentuknya suatu produk reaksi belum dapat secara langsung memastikan bahwa senyawa tersebut memiliki struktur yang sesuai dengan target sintesis, sehingga diperlukan tahapan identifikasi dan karakterisasi senyawa hasil sintesis secara menyeluruh (Patrick, 2019).

Identifikasi struktur senyawa organik merupakan tahap krusial dalam penelitian kimia dan farmasi. Tahap ini bertujuan untuk memastikan bahwa senyawa hasil sintesis benar-benar memiliki susunan atom dan gugus fungsi yang sesuai dengan struktur yang direncanakan. Kesalahan dalam identifikasi struktur dapat menyebabkan kesimpulan yang keliru, terutama jika senyawa tersebut akan digunakan lebih lanjut dalam pengujian aktivitas biologis atau formulasi sediaan farmasi (Carey & Sundberg, 2018).

Berbagai metode analisis telah dikembangkan untuk mengidentifikasi dan mengonfirmasi struktur senyawa organik, salah satunya adalah metode spektroskopi. Metode spektroskopi banyak digunakan karena bersifat non-destruktif, membutuhkan jumlah sampel yang relatif kecil, serta mampu memberikan informasi struktural yang detail. Di antara berbagai teknik spektroskopi yang tersedia, spektrofotometri inframerah (IR) dan spektroskopi *Nuclear Magnetic Resonance* (NMR) merupakan metode yang paling umum dan penting dalam analisis senyawa organik (Pavia et al., 2018).

Spektrofotometri inframerah digunakan untuk mengidentifikasi gugus fungsi dalam suatu molekul berdasarkan vibrasi ikatan kimia yang menyerap radiasi inframerah pada bilangan gelombang tertentu. Setiap gugus fungsi memiliki pita serapan khas yang dapat digunakan sebagai penanda keberadaannya dalam suatu senyawa. Dengan demikian, analisis IR sangat bermanfaat dalam menentukan apakah gugus fungsi utama yang diharapkan telah terbentuk pada senyawa hasil sintesis (Sastrohamidjojo, 2019).

Meskipun spektrofotometri IR efektif dalam mengidentifikasi gugus fungsi, metode ini belum mampu memberikan informasi lengkap mengenai susunan atom dalam molekul. Oleh karena itu, diperlukan metode analisis lain yang dapat memberikan informasi lebih rinci mengenai struktur molekul, khususnya mengenai lingkungan atom hidrogen dan karbon. Dalam hal ini, spektroskopi *Nuclear Magnetic Resonance* (NMR) menjadi metode yang sangat penting dan saling melengkapi dengan spektrofotometri IR (Claridge, 2016).

Spektroskopi proton (^1H -NMR) digunakan untuk mengidentifikasi jumlah, jenis, dan lingkungan atom hidrogen dalam suatu senyawa. Informasi yang diperoleh dari spektrum ^1H -NMR meliputi pergeseran kimia, intensitas sinyal, serta pola pemisahan yang mencerminkan interaksi antar atom hidrogen dalam molekul. Data ini sangat berguna dalam menentukan posisi atom hidrogen serta hubungan struktural antar bagian molekul (Lambert et al., 2017).

Selain ^1H -NMR, spektroskopi karbon-13 (^{13}C -NMR) digunakan untuk mengidentifikasi jumlah dan lingkungan atom karbon dalam senyawa. Spektrum ^{13}C -NMR memberikan gambaran mengenai kerangka karbon suatu molekul, termasuk karbon alifatik, aromatik, maupun karbonil. Kombinasi analisis ^1H -NMR dan ^{13}C -NMR memungkinkan penentuan struktur senyawa secara lebih lengkap dan akurat (Breitmaier, 2019).

Penggunaan spektrofotometri IR yang dikombinasikan dengan spektroskopi ^1H -NMR dan ^{13}C -NMR merupakan pendekatan yang sangat efektif dalam identifikasi senyawa hasil sintesis. Ketiga metode ini saling melengkapi, di mana spektrofotometri IR berperan dalam identifikasi gugus fungsi, sedangkan spektroskopi NMR berperan dalam konfirmasi struktur molekul secara detail, sehingga tingkat keakuratan penentuan struktur senyawa dapat ditingkatkan (Gunawan & Harahap, 2020).

Berdasarkan uraian tersebut, penelitian ini dilakukan untuk mengidentifikasi hasil sintesis senyawa organik menggunakan metode spektrofotometri inframerah (IR), spektroskopi ^1H -NMR, dan spektroskopi ^{13}C -NMR. Melalui penelitian ini diharapkan dapat diperoleh informasi struktural yang lengkap dan akurat, sehingga dapat memastikan bahwa senyawa hasil sintesis telah terbentuk sesuai dengan struktur yang direncanakan dan dapat digunakan sebagai dasar untuk penelitian lanjutan (Pavia et al., 2017).

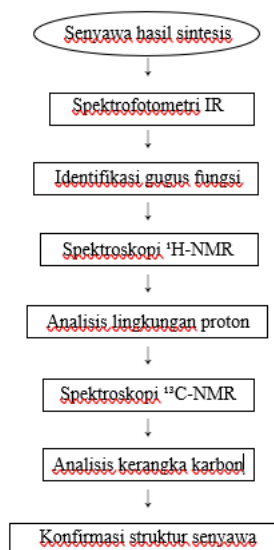
METODE

Penelitian ini dilakukan menggunakan metode studi kepustakaan dengan pendekatan deskriptif kualitatif. Data yang dianalisis diperoleh dari literatur ilmiah yang relevan dengan topik identifikasi hasil sintesis senyawa menggunakan spektroskopi IR, ^1H -NMR, dan ^{13}C -NMR. Sumber data meliputi jurnal nasional, jurnal internasional, serta buku ilmiah yang berkaitan dengan analisis struktur senyawa obat.

Literatur yang digunakan dibatasi pada publikasi lima tahun terakhir untuk menjamin keterbaruan informasi. Teknik pengumpulan data dilakukan dengan menelusuri database ilmiah, kemudian menyeleksi sumber yang sesuai dengan ruang lingkup penelitian. Data yang terkumpul dianalisis dengan cara mengelompokkan informasi berdasarkan jenis metode spektroskopi, prinsip kerja, serta perannya dalam identifikasi struktur senyawa hasil sintesis.

Hasil analisis disajikan dalam bentuk uraian naratif yang terstruktur dan dikaitkan dengan teori serta temuan penelitian sebelumnya. Pendekatan ini bertujuan memperoleh pemahaman yang komprehensif mengenai efektivitas penggunaan spektrofotometri IR, ^1H -NMR, dan ^{13}C -NMR dalam memastikan keberhasilan sintesis senyawa obat.

HASIL DAN PEMBAHASAN



Gambar 1. Skema Alur Identifikasi Struktur Senyawa Hasil Sintesis

Berdasarkan hasil telaah pustaka, identifikasi struktur senyawa hasil sintesis merupakan tahapan fundamental dalam penelitian kimia farmasi. Tahap ini bertujuan memastikan bahwa senyawa yang dihasilkan benar-benar sesuai dengan struktur target yang dirancang. Keakuratan identifikasi struktur sangat menentukan validitas penelitian lanjutan, khususnya pada uji aktivitas biologis dan evaluasi keamanan senyawa obat.

Kajian literatur menunjukkan bahwa pendekatan spektroskopi menjadi metode utama dalam identifikasi hasil sintesis. Kombinasi spektrofotometri infra merah (IR), ¹H-NMR, dan ¹³C-NMR digunakan karena mampu memberikan informasi struktural yang saling melengkapi. Alur identifikasi struktur secara umum ditunjukkan pada Gambar 1.

Berdasarkan hasil telaah pustaka, identifikasi struktur senyawa hasil sintesis merupakan tahap krusial dalam penelitian kimia farmasi karena menentukan validitas senyawa target yang dihasilkan. Berbagai literatur menunjukkan bahwa kesalahan identifikasi struktur dapat berdampak langsung terhadap interpretasi aktivitas biologis dan keamanan senyawa obat. Oleh karena itu, penggunaan metode spektroskopi yang tepat menjadi standar utama dalam penelitian sintesis senyawa farmasi. (Silverstein et al., 2014)

Spektrofotometri infra merah (IR) secara umum digunakan sebagai teknik awal dalam identifikasi hasil sintesis. Metode ini berperan penting dalam memastikan keberadaan gugus fungsi utama yang terbentuk selama reaksi kimia. Gugus fungsi seperti karbonil, hidroksil, amina, dan ikatan aromatik dapat dikenali melalui pita serapan khas pada spektrum IR. Literatur menunjukkan bahwa kemunculan pita serapan karbonil pada daerah bilangan gelombang sekitar 1650-1750 cm⁻¹ sering dijadikan indikator keberhasilan sintesis senyawa turunan ester, amida, maupun asam karboksilat. Ketidakhadiran pita ini sering dikaitkan dengan kegagalan reaksi atau reaksi yang belum berlangsung sempurna. (Silverstein et al., 2014)

Selain gugus karbonil, analisis IR juga digunakan untuk mengidentifikasi gugus hidroksil dan amina melalui pita serapan lebar pada daerah 3200-3600 cm⁻¹. Keberadaan pita ini memberikan informasi penting terkait sifat polar dan potensi interaksi senyawa dengan reseptor

biologis. Hal ini menjadi pertimbangan penting dalam pengembangan senyawa obat. (Skoog et al., 2018)

Meskipun demikian, berbagai sumber menyebutkan bahwa IR memiliki keterbatasan karena tidak mampu memberikan informasi detail mengenai susunan atom dalam molekul. Oleh sebab itu, spektroskopi NMR digunakan sebagai metode lanjutan untuk memperoleh gambaran struktur yang lebih komprehensif. Spektroskopi ^1H -NMR berperan penting dalam mengidentifikasi jumlah dan lingkungan proton dalam senyawa hasil sintesis. Setiap sinyal proton pada spektrum ^1H -NMR mencerminkan posisi dan jenis proton yang berbeda dalam molekul. Pergeseran kimia yang muncul sangat dipengaruhi oleh lingkungan elektronik di sekitar proton tersebut. (Silverstein et al., 2014)

Hasil kajian pustaka menunjukkan bahwa nilai pergeseran kimia proton aromatik umumnya muncul pada daerah 6,0-8,5 ppm, sedangkan proton alifatik muncul pada daerah yang lebih rendah. Informasi ini digunakan untuk memastikan keberadaan cincin aromatik atau rantai alifatik dalam struktur senyawa hasil sintesis. Selain pergeseran kimia, pola pemisahan sinyal (splitting) pada spektrum ^1H -NMR juga memberikan informasi mengenai jumlah proton tetangga. Pola doublet, triplet, maupun multiplet sering digunakan untuk menafsirkan hubungan antar atom dalam molekul. Interpretasi ini sangat penting dalam konfirmasi struktur senyawa. Integrasi sinyal pada spektrum ^1H -NMR memungkinkan peneliti menentukan perbandingan jumlah proton dalam senyawa hasil sintesis. Kesesuaian antara nilai integrasi teoritis dan eksperimen menjadi indikator kuat bahwa struktur senyawa telah terbentuk sesuai dengan rancangan awal. (Silverstein et al., 2014)

Di sisi lain, spektroskopi ^{13}C -NMR digunakan untuk mengidentifikasi kerangka karbon senyawa secara lebih menyeluruh. Setiap sinyal karbon merepresentasikan lingkungan karbon yang unik dalam molekul. Teknik ini sangat berguna untuk membedakan karbon karbonil, aromatik, dan alifatik. Literatur menunjukkan bahwa karbon karbonil biasanya muncul pada daerah pergeseran kimia 160-220 ppm, sedangkan karbon aromatik berada pada rentang 110-160 ppm. Informasi ini membantu memastikan keberadaan gugus fungsi penting yang berkaitan langsung dengan aktivitas farmakologis senyawa. Keunggulan utama ^{13}C -NMR dibandingkan ^1H -NMR adalah kemampuannya dalam menampilkan seluruh atom karbon tanpa tumpang tindih sinyal yang signifikan. Hal ini sangat membantu dalam analisis senyawa kompleks yang memiliki banyak proton dengan lingkungan serupa. (Pavia et al., 2015)

Berdasarkan hasil telaah pustaka, penggunaan kombinasi IR, ^1H -NMR, dan ^{13}C -NMR dinilai mampu meningkatkan tingkat kepercayaan dalam identifikasi struktur senyawa hasil sintesis. Setiap metode memberikan informasi yang saling melengkapi dan memperkuat interpretasi struktur. Beberapa penelitian melaporkan bahwa ketidaksesuaian data spektral dengan struktur teoritis sering mengindikasikan adanya pengotor atau produk samping reaksi. Oleh karena itu, analisis spektrum juga berperan sebagai indikator tingkat kemurnian senyawa hasil sintesis. (Gunawan et al., 2020)

Dalam konteks pengembangan obat, kemurnian senyawa hasil sintesis menjadi faktor penting karena berpengaruh terhadap hasil uji aktivitas biologis. Senyawa yang belum teridentifikasi secara tepat berpotensi memberikan hasil uji yang bias atau menyesatkan. Studi kepustakaan menunjukkan bahwa pendekatan spektroskopi telah menjadi standar internasional dalam penelitian sintesis senyawa farmasi. Hampir seluruh jurnal bereputasi mensyaratkan data IR dan NMR sebagai bukti keberhasilan sintesis. Selain sebagai alat identifikasi, data spektrum IR dan NMR juga berperan sebagai dasar dalam modifikasi struktur senyawa. Informasi struktural

yang akurat memungkinkan peneliti melakukan optimasi struktur untuk meningkatkan aktivitas dan menurunkan toksisitas. (Gunawan et al., 2020)

Dalam beberapa kasus, perbandingan data spektral dengan literatur sebelumnya digunakan untuk memastikan kesesuaian senyawa hasil sintesis dengan senyawa yang telah dilaporkan. Pendekatan ini banyak digunakan dalam penelitian replikasi dan pengembangan turunan senyawa obat. (Patrick, G. L., 2017)

Hasil kajian ini menegaskan bahwa interpretasi spektrum tidak dapat dilakukan secara parsial. Kesimpulan struktur harus didasarkan pada keseluruhan data spektroskopi yang tersedia agar diperoleh hasil identifikasi yang valid dan dapat dipertanggungjawabkan secara ilmiah. (Silverstein et al., 2014)

KESIMPULAN

Identifikasi struktur senyawa hasil sintesis merupakan tahapan yang sangat krusial dalam penelitian kimia organik dan kimia farmasi. Keberhasilan sintesis tidak dapat dinilai hanya dari terbentuknya produk reaksi, melainkan harus dibuktikan melalui karakterisasi struktur molekul secara menyeluruh dan akurat.

Penggunaan spektrofotometri inframerah (IR) terbukti efektif dalam mengidentifikasi gugus fungsi utama pada senyawa hasil sintesis melalui kemunculan pita serapan khas yang sesuai dengan struktur target. Data IR memberikan indikasi awal bahwa gugus fungsi yang diharapkan telah terbentuk selama proses sintesis.

Namun demikian, analisis IR memiliki keterbatasan dalam menjelaskan susunan atom secara detail. Oleh karena itu, spektroskopi $^1\text{H-NMR}$ dan $^{13}\text{C-NMR}$ digunakan sebagai metode lanjutan untuk mengonfirmasi lingkungan atom hidrogen dan karbon dalam molekul. Data $^1\text{H-NMR}$ memberikan informasi mengenai jumlah, jenis, serta interaksi antar proton, sedangkan data $^{13}\text{C-NMR}$ memberikan gambaran kerangka karbon senyawa secara komprehensif.

Hasil interpretasi gabungan spektrum IR, $^1\text{H-NMR}$, dan $^{13}\text{C-NMR}$ menunjukkan adanya kesesuaian antara data spektral yang diperoleh dengan struktur senyawa yang direncanakan. Kesesuaian pergeseran kimia, pola pemisahan, serta jumlah sinyal yang muncul menjadi indikator kuat bahwa senyawa hasil sintesis telah terbentuk sesuai dengan struktur target.

Dengan demikian, kombinasi metode spektrofotometri IR, $^1\text{H-NMR}$, dan $^{13}\text{C-NMR}$ dapat disimpulkan sebagai pendekatan yang efektif, reliabel, dan saling melengkapi dalam identifikasi struktur senyawa hasil sintesis. Pendekatan ini meningkatkan tingkat kepercayaan terhadap keberhasilan sintesis dan menjadi dasar yang valid untuk penelitian lanjutan, khususnya dalam pengujian aktivitas biologis dan pengembangan senyawa farmasi.

DAFTAR PUSTAKA

- Breitmaier, E. (2019). *Structure elucidation by NMR in organic chemistry: A practical guide*. John Wiley & Sons.
- Carey, F. A., & Sundberg, R. J. (2018). *Advanced organic chemistry: Part A - Structure and mechanisms* (5th ed.). Springer.
- Claridge, T. D. W. (2016). *High-resolution NMR techniques in organic chemistry* (3rd ed.). Elsevier.

- Gunawan, D., & Harahap, Y. (2020). Aplikasi spektroskopi inframerah dan NMR dalam identifikasi struktur senyawa organik. *Jurnal Kimia*, 14(2), 85-92.
- Gunawan, S. G., Setiabudy, R., Nafrialdi, & Elysabeth. (2020). *Farmakologi dan terapi* (Edisi 6). Jakarta: Badan Penerbit FKUI.
- Lambert, J. B., Shurvell, H. F., Lightner, D. A., & Cooks, R. G. (2017). *Organic structural spectroscopy*. Pearson Education.
- Patrick, G. L. (2017). *An introduction to medicinal chemistry* (6th ed.). Oxford: Oxford University Press.
- Patrick, G. L. (2019). *An introduction to medicinal chemistry* (6th ed.). Oxford University Press.
- Pavia, D. L., Lampman, G. M., Kriz, G. S., & Vyvyan, J. R. (2015). *Introduction to spectroscopy* (5th ed.). Boston: Cengage Learning.
- Pavia, D. L., Lampman, G. M., Kriz, G. S., & Vyvyan, J. A. (2017). *Introduction to organic laboratory techniques: A microscale approach*. Cengage Learning.
- Pavia, D. L., Lampman, G. M., Kriz, G. S., & Vyvyan, J. A. (2018). *Introduction to spectroscopy* (5th ed.). Cengage Learning.
- Sastrohamidjojo, H. (2019). *Spektroskopi*. Liberty.
- Silverstein, R. M., Webster, F. X., & Kiemle, D. J. (2017). *Spectrometric identification of organic compounds* (8th ed.). John Wiley & Sons.
- Silverstein, R. M., Webster, F. X., Kiemle, D. J., & Bryce, D. L. (2014). *Spectrometric identification of organic compounds* (8th ed.). Hoboken, NJ: John Wiley & Sons.
- Skoog, D. A., Holler, F. J., & Crouch, S. R. (2018). *Principles of instrumental analysis* (6th ed.). Boston: Cengage Learning.