

# Analisis Spektrum $^1\text{H-NMR}$ : Penjelasan Sederhana

Irfan Ananda Ismail<sup>\*1</sup>, Riga Riga<sup>2</sup>, Okta Suryani<sup>2</sup>, Munadia Insani<sup>2</sup>, Niza Lian Pernadi<sup>2</sup>, Agnes Febriyanti<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Master Candidate in Chemistry Education, FMIPA Universitas Negeri Padang, West Sumatera, Indonesia

<sup>2</sup>Departemen Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Padang

<sup>3</sup>Institut Kesehatan Mitra Bunda Batam, Bachelor of Pharmacy, Batam, Indonesia

[\\*halo@irfanananda28.com](mailto:*halo@irfanananda28.com)

**Abstract** — Nuclear magnetic resonance (NMR) adalah instrumen kimia yang dapat digunakan untuk mengevaluasi struktur senyawa kimia selain FTIR, GC-MS, dan HPLC. Salah satu spektrum NMR yang biasa digunakan untuk analisis senyawa adalah  $^1\text{H-NMR}$ . Teknik yang dapat digunakan untuk menentukan jumlah proton, stereotomik relatif, konformasi struktur, dalam struktur senyawa kimia. Sejauh ini, sudah banyak publikasi terkait penggunaan teknik spektroskopi ini. Namun, langkah-langkah dalam membaca dan menafsirkan spektrum  $^1\text{H-NMR}$  tidak dijelaskan secara rinci. Dengan demikian, dalam artikel ini, kami menjelaskan langkah-langkah dalam membaca dan menafsirkan spektrum  $^1\text{H-NMR}$  berdasarkan tingkat kesulitan: (1) senyawa sederhana, (2) senyawa yang cukup kompleks, dan (3) senyawa yang lebih kompleks

**Kata Kunci** —  $^1\text{H-NMR}$ , Memahami NMR, Membaca

## I. PENGANTAR

Spektrometer resonansi magnetik nuklir (NMR) adalah instrumen kimia yang digunakan untuk memperoleh informasi mengenai struktur dan konformasi senyawa kimia. Spektroskopi NMR adalah metode penjelasan yang cukup baik dalam menentukan struktur senyawa organik. Spektroskopi NMR memanfaatkan interaksi antara nukleus yang bertindak sebagai magnet kecil dan medan magnet eksternal, sehingga dapat diterapkan untuk mengevaluasi ikatan kimia dan lingkungan nuklir [1]. Sinyal yang diperoleh dari spektroskopi NMR memberikan informasi tentang interaksi antara inti dan elektron serta interaksi inti between, yang dapat membantu menentukan struktur senyawa kimia [2]. Spektrum NMR yang dihasilkan adalah kumpulan satu atau lebih puncak resonansi pada frekuensi tertentu.

Ada dua jenis spektroskopi NMR, yaitu  $^1\text{H-NMR}$  Salah satu informasi penting yang ditunjukkan oleh spektrum  $^1\text{H-NMR}$  adalah pergeseran kimia dari berbagai jenis proton dalam sampel, sedangkan  $^{13}\text{C-NMR}$  dapat memberikan informasi struktural yang terkait dengan senyawa berdasarkan shifts kimia dari berbagai jenis karbon. Selain digunakan untuk menentukan struktur senyawa kimia, spektroskopi NMR juga dapat digunakan dalam teknik pencitraan medis tingkat lanjut, seperti MRI. NMR kini telah menjadi teknologi analitik yang dapat diterapkan in banyak disiplin ilmu penelitian, kedokteran, dan berbagai industri [3].

Banyak penelitian yang telah menggambarkan penerapan spektroskopi  $^1\text{H-NMR}$  dan  $^{13}\text{C-NMR}$  dalam analisis struktur suatu senyawa kimia khususnya senyawa organik such sebagai analisis senyawa levodopa menggunakan  $^1\text{H-NMR}$  yang dilakukan oleh Talebpour [4], analisis senyawa eugenol. yang diekstrak dari cengkeh menggunakan  $^1\text{H-NMR}$  dan  $^{13}\text{C-NMR}$  [5], analisis ligan berbasis pyrazole[6], dan lainnya. Selain penggunaan kualitatif, spektroskopi NMR juga dapat digunakan

untuk tujuan analisis kuantitatif [7]. Namun, pembacaan dan interpretasi spektrum  $^1\text{H-NMR}$  dan  $^{13}\text{C-NMR}$  tidak dijelaskan secara rinci.

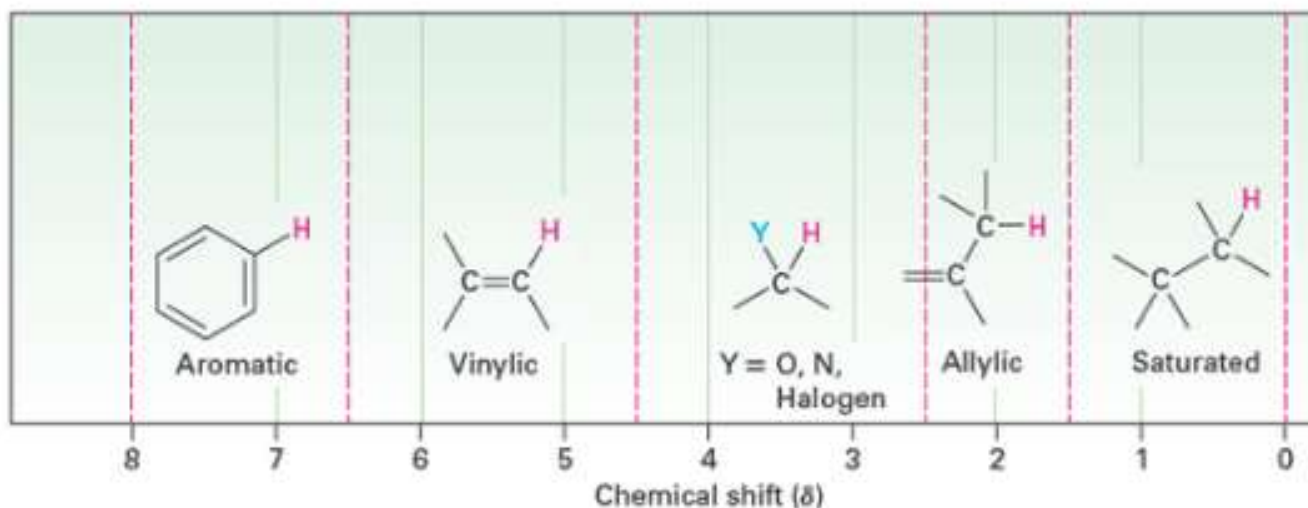
Berdasarkan masalah tersebut tujuan penelitian ini adalah untuk menjelaskan cara membaca dan menginterpretasikan spektra  $^1\text{H-NMR}$  yaitu paparan langkah demi langkah dalam menentukan senyawa sederhana, senyawa yang cukup kompleks, senyawa yang lebih kompleks, dan senyawa yang sangat kompleks. Menafsirkan sangat penting karena dapat memungkinkan peneliti dan praktisi untuk analisis lebih lanjut serta memudahkan pelajar khususnya dalam memahami instrument ini.

## II. LEBIH DEKAT MENGENAL SPEKTRUM $^1\text{H-NMR}$

### I. Spektrum dalam Hasil Analisis $^1\text{H-NMR}$

. Spektroskopi  $^1\text{H-NMR}$  adalah metode analisis yang digunakan untuk menentukan struktur suatu senyawa berdasarkan jenis proton atau hidrogen. Spektrum  $^1\text{H-NMR}$  memberikan informasi mengenai jumlah jenis proton dalam suatu senyawa dan sifat lingkungan dari masing-masing jenis proton hidrogen. Menurut Harwood dan Claridge [8], ada beberapa informasi penting yang muncul dalam spektrum  $^1\text{H-NMR}$ , Adapun sebagai berikut :

- 1) Resonansi proton didistribusikan di sepanjang sumbu frekuensi. Setiap proton berada dalam lingkungan kimia yang berbeda yang ditandai dengan pergeseran kimianya ( $\delta$ ).
- 2) Puncak yang berbeda dalam spektrum dapat dilihat muncul dengan intensitas yang berbeda yang terkait dengan jumlah proton yang menimbulkan sinyal.
- 3) Beberapa resonansi proton dapat berinteraksi dengan atom tetangga. Tingkat interaksi atau kopling ditunjukkan oleh konstanta kopling (J).



Gambar 1. Pergeseran kimia ( $\delta$ ) dari spektrum  $^1\text{H-NMR}$   
Sumber: McMurry 9<sup>th</sup> Edition

Puncak penyerapan yang muncul dalam spektrum  $^1\text{H-NMR}$  diwakili oleh perbedaan frekuensi resonansi nukleus terhadap standar dalam satuan ppm atau pergeseran kimia ( $\delta$ ). Nilai pergeseran kimia ( $\delta$ ) dipengaruhi oleh beberapa faktor, seperti: (1) efek induktif, (2) anisotropi ikatan, dan (3) pembentukan ikatan hidrogen. Skema puncak spektral  $^1\text{H-NMR}$  untuk berbagai jenis penyerapan proton ditunjukkan pada **Gambar 1**

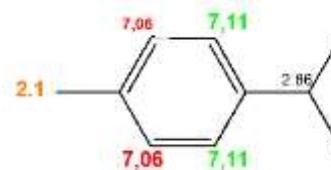
**Gambar 1** menunjukkan bahwa efek induktif atom elektronegatif seperti oksigen dan nitrogen menyebabkan puncak muncul dalam pergeseran kimia besar, yang dikenal sebagai de-shielded. Hal ini dapat terjadi karena atom elektronegatif seperti O memiliki arah sirkulasi awan elektron searah dengan magnet eksternal field, sehingga memberikan efek induksi medan magnet. Selain efek induksi dari keberadaan atom elektronegatif seperti N dan O, pergeseran kimia juga dipengaruhi oleh anisotropi ikatan kimia, seperti senyawa dengan gugus alkena ( $\text{C}=\text{C}$ ), alkin ( $\text{C}\equiv\text{C}$ ), karbonil ( $\text{C}=\text{O}$ ), dan aromatik (Ar). Puncak muncul pada pergeseran kimia yang lebih besar dengan adanya ikatan rangkap.

Berbeda dengan  $^1\text{H-NMR}$ , puncak penyerapan yang ditunjukkan dalam spektrum  $^{13}\text{C-NMR}$  memberikan informasi struktural berdasarkan pergeseran kimia dari berbagai jenis karbondalam senyawa kimia. Skema  $^{13}\text{C}$  puncak spektral C-NMR untuk berbagai jenis penyerapan proton ditunjukkan pada **Gambar 2**. Pergeseran kimiawi karbon ditentukan oleh jenis ikatan karbon itu sendiri. Karbon karbonil ( $\text{C}=\text{O}$ ) sangat de-shielded dan memiliki nilai pergeseran kimia yang lebih besar, gugus karboksilat dan ester memiliki nilai pergeseran kimia yang lebih kecil. Gugus keton dan aldehida memiliki nilai pergeseran kimia sekitar 200 ppm, sedangkan karbon aromatik memiliki nilai pergeseran kimia antara 110–160 ppm. Karbon dengan ikatan rangkap memiliki nilai pergeseran kimia antara 100–50 ppm, metine, metilen, dan metil memiliki nilai pergeseran kimia antara 10–50 ppm.

## II. Mengenal Grafik $^1\text{H-NMR}$

Ada enam langkah utama dalam membaca dan menafsirkan spektrum  $^1\text{H-NMR}$ , yaitu:

- 1) **Langkah 1:** Identifikasi jumlah sinyal yang muncul dengan mengamati lingkungan kimia dari struktur senyawa yang dianalisis. Sinyal yang muncul mewakili perbedaan lingkungan kimia atom hidrogen dalam suatu molekul. Misalnya, **Gambar 3** menunjukkan struktur senyawa p-cymene.



Gambar 3. Struktur p-cymene

Struktur p-cymene menunjukkan adanya gugus CH dan CH<sub>3</sub> yang berada di lingkungan kimia yang sama seperti yang ditunjukkan pada Gambar 3. Kelompok CH dan CH<sub>3</sub> yang berada di lingkungan kimia yang sama ditunjukkan sebagai satu puncak spektrum sehingga senyawa p-cymene menimbulkan lima puncak spektral.  $^1\text{H-NMR}$

- 2) **Langkah 2:** Identifikasi banyaknya sinyal yang muncul karena adanya proton tetangga. Identifikasi ini dilakukan untuk mengetahui multiplisitas atau pola puncak yang muncul pada spektrum  $^1\text{H-NMR}$ . Ingat bahwa terdapat rumus  $N+1$ .

Structural Type	J (Hz)	Structural Type	J (Hz)
	0 (unless in a rigid ideal orientation)		12 to 18
	6 to 8		7 to 12
	5 to 7		0.5 to 3
	2 to 12 (depends on dihedral angle and the nature of X and Y)		3 to 11 (depends on dihedral angle)
	0.5 to 3		2 to 3
	12 to 15 (must be diastereotopic)		o 6 to 9 m 1 to 3 p 0 to 1

Gambar 4. Nilai konstanta kopling (J)

Ada beberapa pola multiplisitas sinyal dalam spektrum  $^1\text{H-NMR}$  sebagai berikut:

- Singlet: Proton tanpa proton tetangga yang tidak setara secara magnetis menunjukkan puncak tunggal dalam spektrum  $^1\text{H-NMR}$
  - Doublet: Proton dengan satu proton tetangga yang tidak setara menimbulkan puncak yang terbelah dua atau dua kali lipat.
  - Triplet: Proton dengan dua Protons tetangga yang tidak setara satu sama lain menimbulkan puncak yang dibagi menjadi tiga.
  - Kuartet: Proton dengan tiga proton tetangga yang tidak setara satu sama lain menimbulkan puncak yang dibagi menjadi empat.
- Langkah 3: Identifikasi nilai ion** terintegrasi sinyal. Integrasi menunjukkan jumlah relatif H yang diperoleh dari pengukuran panjang setiap puncak. Semakin besar nilai integrasi, semakin banyak proton yang menghasilkan sinyal
  - Langkah 4: Identifikasi puncak** berdasarkan nilai pergeseran kimia ( $\delta$ ). Nilai pergeseran kimia untuk jenis proton tertentu dalam kelompok tertentu. Nilai pergeseran kimia ( $\delta$ ) nukleus muncul sebagai akibat dari adanya elektron dalam molekul yang membentuk efek perisai pada putaran nucleus. Atom dengan nilai pergeseran kimia TMS rendah atau dekat disebut terlindung (*shielded*) sedangkan nilai pergeseran kimia tinggi atau jauh ( $\delta$ ) dengan TMS disebut de-shielded. Nilai pergeseran kimia ( $\delta$ ) dipengaruhi oleh beberapa faktor, seperti: (1) efek induktif, (2) anisotropi ikatan, dan (3) pembentukan ikatan hidrogen. Nilai pergeseran kimia dalam spektroskopi  $^1\text{H-NMR}$  ditunjukkan pada **Tabel 1**.

#### Langkah 5: Identifikasi konstanta kopling (J).

Konstanta kopling  $^{13}\text{C-1 H}$  memiliki nilai mulai dari 125 hingga 250 Hz tergantung pada karakter ikatan C ke H dan ikatan C dan C. Langkah ini dapat dilakukan jika data konstanta kopling ditampilkan pada spektrum. Nilai konstanta kopling ditunjukkan pada **Gambar 4**. Nilai konstanta kopling (J) pada **Gambar 4** mencerminkan keberadaan lingkungan ikatan nukleus. Nilai J proton sangat spesifik sehingga banyak informasi dapat diambil. Misalnya, ikatan rangkap dapat mengambil dua bentuk, yaitu cis dan trans. Untuk ikatan rangkap trans memiliki nilai J antara 12-18 Hz, cis antara 6-11 Hz, dan geminal antara 0-3 Hz. Nilai J dari aromatik juga memberikan arti penting informasi tentang posisi gugus fungsi dalam aromatik. Sinyal proton turunan benzena dengan posisi orto memiliki nilai J 7,5 Hz, meta sekitar 1,5 Hz dan para memiliki nilai J 0,7 Hz, sedangkan naptalena dengan posisi orto memiliki nilai J sekitar 8,3, meta 1,3, dan para 0,7 Hz.

- Langkah 6:** Dari langkah 1 - 5, struktur senyawa organik dapat ditentukan. Hasil analisis digabungkan dan menyimpulkan hasil struktural dari spektrum NMR. Pertama, setelah number dari jenis proton dan lingkungan kimia proton diketahui pada langkah 1, rumus molekul berdasarkan ikatannya dengan H dapat ditentukan. Kedua, analisis perkalian sinyal memberikan informasi tentang berapa banyak atom hidrogen yang ada dalam atom karbon yang berdekatan. Akhirnya, potongan-potongan molekul digabungkan untuk membentuk formula struktural untuk senyawa. Konstanta kopling yang diperoleh pada langkah sebelumnya menunjukkan interaksi antara proton dan nilai pergeseran kimia yang diperoleh kemudian dibandingkan dengan nilai tabel pergeseran kimia (**Tabel 1**) untuk mengidentifikasi gugus fungsinya

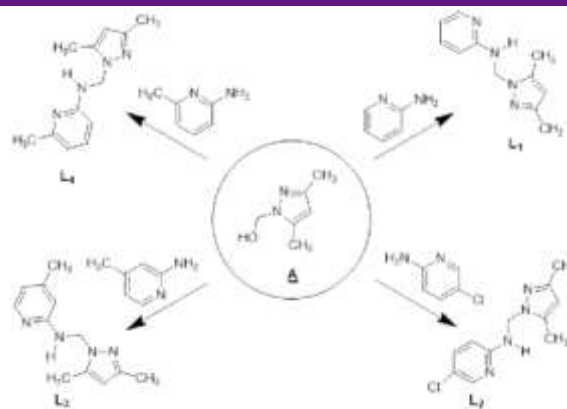
Tabel 1. Pergeseran kimia  $^1\text{H-NMR}$

Pergeseran kimia ( $\delta$ ) (ppm)	Deskripsi:
0.9	Alkil (metil)
1.3	Alkil (metilen)
1.5 – 2	Alkil (methine)
1.8	Alylic
2 – 2.3	$\text{CH } \alpha$ – karbonil ( $\text{C} = \text{O}$ )
2.3	Benzilik ( $\text{C-Ph}$ )
2.5	Alkynyl
2 – 3	$\text{CH}_\alpha$ – N
2 – 4	$\text{CH}_\alpha$ – halogen ( $\text{Cl, Br, I}$ )
3.8	$\text{CH}_\alpha$ – oksigen
4.5	$\text{CH}_\alpha$ – fluor
7.3	Aromatik
9.7	Aldehida
0.5 – 5	Alkohol
4 – 7	Fenol
10 – 13	Asam karboksilat
0.5 – 5	Amine
3 – 5	Anilin
5 – 9	Amida

### III. Metode

Untuk memahami cara membaca dan menginterpretasikan spektrum  $^1\text{H-NMR}$  tulisan ini menjelaskan secara bertahap step membaca 1 spektrum  $^1\text{H-NMR}$  melalui paparan langkah demi langkah dalam menentukan senyawa sederhana, senyawa yang cukup kompleks, senyawa yang lebih kompleks, dan senyawa yang sangat kompleks. Senyawa sederhana yang digunakan adalah: metana, metanol, asetilena, n-oktan, d iso-butana. Senyawa yang cukup kompleks yang digunakan adalah: toluena dan naftalena. Senyawa yang lebih kompleks yang digunakan adalah eugenol [5]. Senyawa yang sangat kompleks yang digunakan adalah: ligan  $\text{L}_1 - \text{L}_4$  [6].

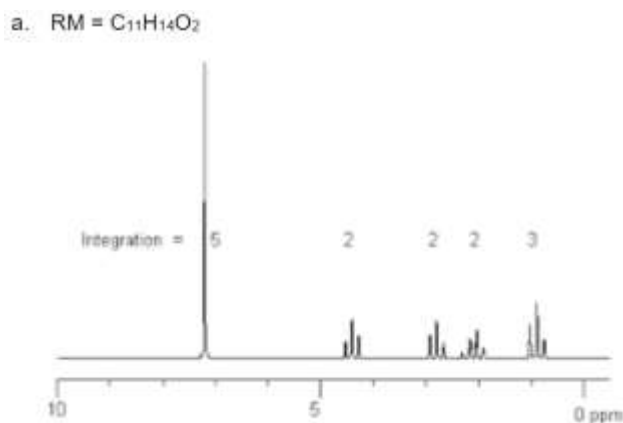
Thirukumaran et al. [5] melakukan analisis spektroskopi NMR senyawa eugenol yang diekstrak dari tanaman cengkeh. Spektroskopi NMR dilakukan menggunakan spektrometer Joel dengan tetramethylsilane (TMS) sebagai standar internal dan sampel disiapkan menggunakan  $\text{CDCl}_3$  dan Bouroumane et al. [6] mensintesis senyawa pirazolil teralkilasi N ( $\text{L}_1 - \text{L}_4$ ) melalui proses satu langkah dengan kondensasi metanol A (3,5- dimetil- $^1\text{H}$ pyrazol-1-yl) dengan amina primer yang sesuai menggunakan sistem pelarut DMSO dan struktur senyawa  $\text{L}_1 - \text{L}_4$  ditunjukkan pada Gambar 5.



Gambar 5. Struktur pirazol teralkilasi mono siap  $\text{L}_1 - \text{L}_4$  [6]

### IV. Menganalisis Grafik NMR dan Stepsnya

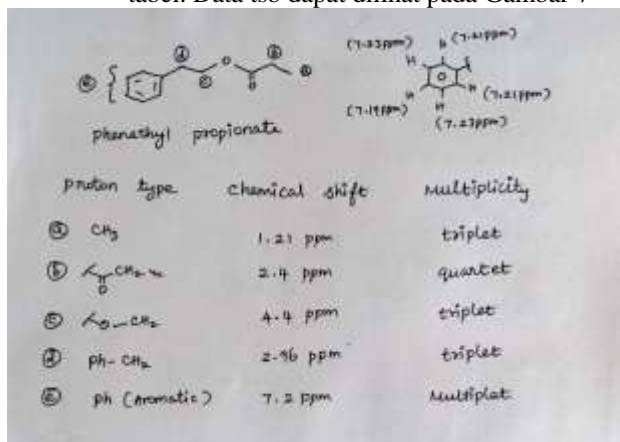
Grafik senyawa  $^1\text{H-NMR}$  ditunjukkan pada Gambar 6. Berdasarkan analisis langkah demi langkah tentang cara membaca dan menafsirkan spektrum  $^1\text{H-NMR}$ , interpretasinya dijelaskan sebagai berikut :



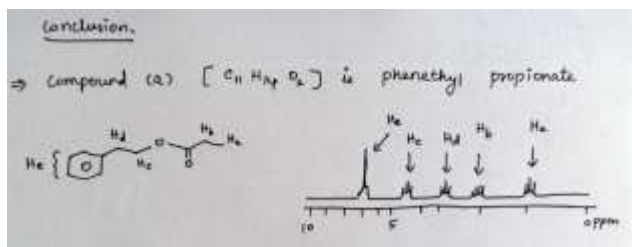
Gambar 6. Grafik  $^1\text{H-NMR}$  Spectra yang akan dianalisa

- Langkah 1:** Identifikasi jumlah sinyal yang muncul. Gambar 6 menyajikan beberapa sinyal dengan jumlah puncak yg bervariasi.
- Langkah 2:** Identifikasi banyaknya sinyal yang muncul karena adanya proton tetangga. Melalui Gambar 6 yang memiliki banyak sinyal, lebih mudah jika kita tuangkan hasil identifikasi dalam bentuk tabel.
- Langkah 3:** Identifikasi nilai integrasi sinyal. Gambar 6 sinyal yang paling kanan menunjukkan bahwa memiliki tiga puncak yang berarti ada 1 proton dirinya ditambah 2 proton tetangga. Dengan demikian, mereka muncul sebagai tiga puncak.
- Langkah 4:** Identifikasi puncak berdasarkan nilai pergeseran kimia ( $\delta$ ). Berdasarkan data referensi pada Tabel 1, Gambar 6 memiliki beberapa

pergeseran kimia yang kita terjemahkan dalam tabel. Data tsb dapat dilihat pada Gambar 7



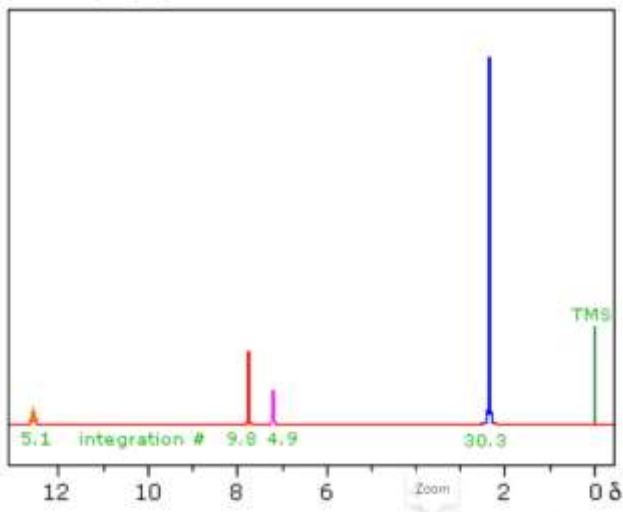
Gambar 7. Hasil pembacaan grafik NMR Gambar 6



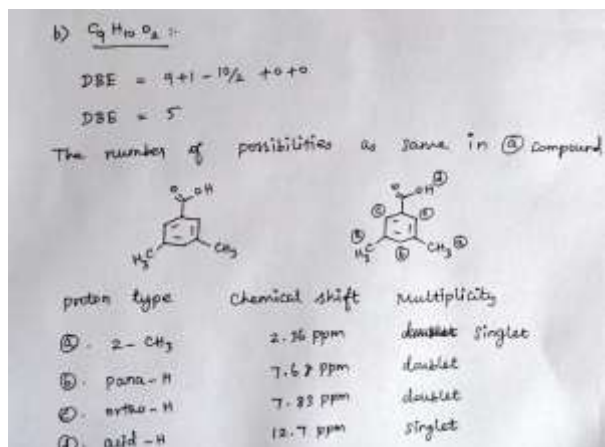
Gambar 8. Kesimpulan pembacaan grafik NMR pada gambar 6

Selanjutnya ulangi Langkah diatas untuk membaca dan menerjemahkan grafik <sup>1</sup>H-NMR, berikut contoh untuk senyawa lain :

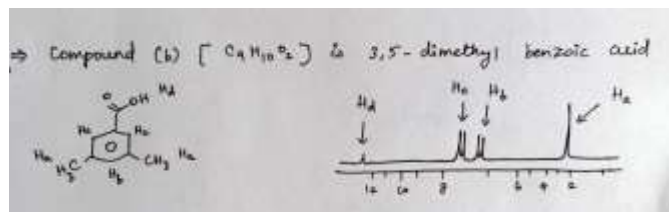
b. RM = C<sub>9</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub>



Gambar 9. Grafik <sup>1</sup>H-NMR Spectra yang akan dianalisa

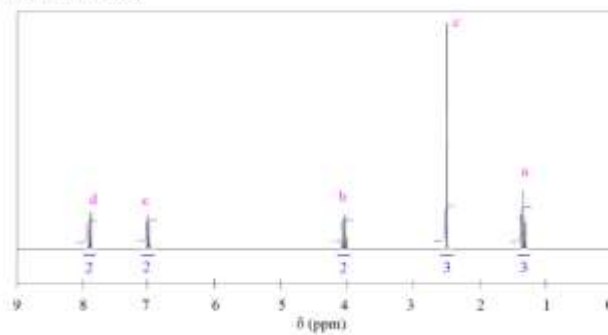


Gambar 10. Hasil pembacaan grafik NMR Gambar 9



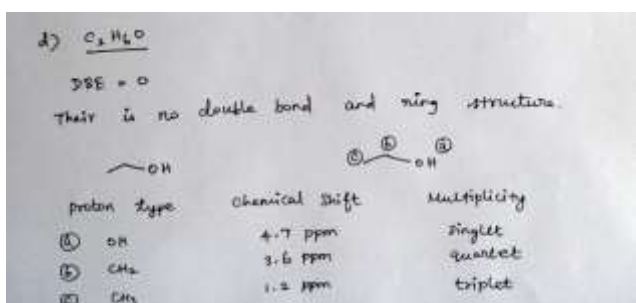
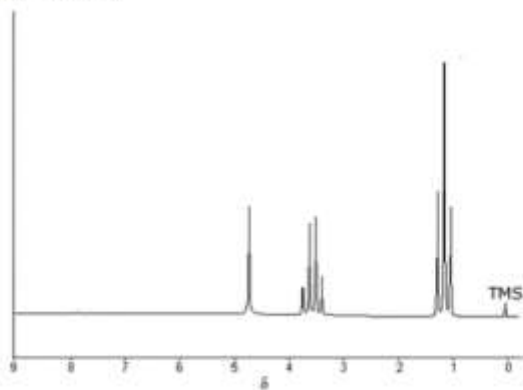
Gambar 11. Kesimpulan pembacaan grafik NMR

c. RM = C<sub>10</sub>H<sub>12</sub>O<sub>2</sub>

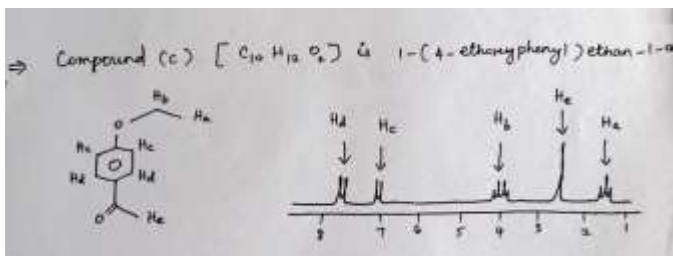


pada gambar 9  
 Gambar 12. Grafik <sup>1</sup>H-NMR Spectra yang akan dianalisa

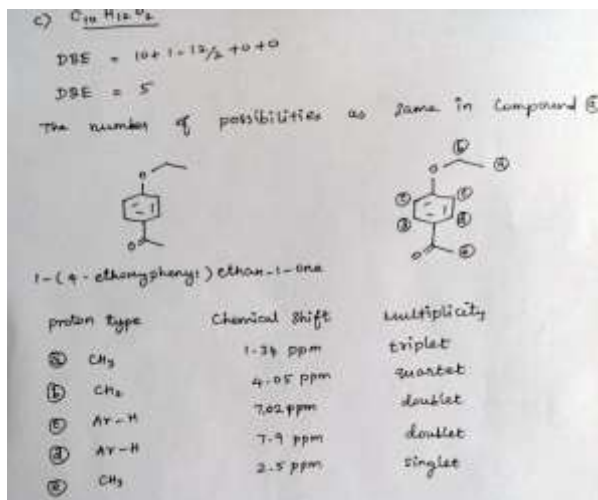
d. RM = C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>O



Gambar 13. Hasil pembacaan grafik NMR Gambar 12



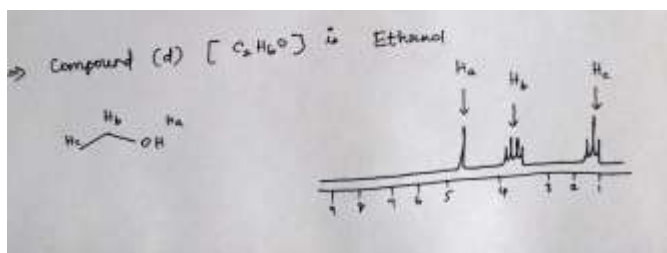
Gambar 14. Kesimpulan pembacaan grafik NMR pada gambar 12



Gambar 15. Grafik <sup>1</sup>H-NMR Spectra yang akan dianalisa

Gambar 16. Hasil pembacaan grafik NMR Gambar

15



Gambar 15. Kesimpulan pembacaan grafik NMR pada gambar 15

### III. KESIMPULAN

Penelitian ini menunjukkan cara paling sederhana untuk memahami hasil analisis spektroskopi <sup>1</sup>H-NMR. Penelitian ini dilakukan dengan mendeskripsikan langkah demi langkah cara membaca dan menginterpretasikan 1 spektrum H-NMR dari beberapa senyawa organik berdasarkan tingkat kesulitan: (1) senyawa sederhana, (2) senyawa yang cukup kompleks, dan (3) senyawa yang lebih kompleks. Dengan tulisan ini, kami percaya bahwa tulisan ini dapat digunakan sebagai dasar untuk memahami dan menginterpretasikan Data <sup>1</sup>H-NMR

### UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terimakasih kepada seluruh pihak yang terlibat dalam membantu penulis dalam pemahaman untuk pembacaan <sup>1</sup>H-NMR Spektra.

### REFERENSI

- [1] F. M. Dayrit and A. C. de Dios, "1H and 13C NMR for the Profiling of Natural Product Extracts: Theory and Applications," *Spectrosc. Anal. - Dev. Appl.*, 2017, doi: 10.5772/intechopen.71040.
- [2] N. Hilal, A. F. Ismail, T. Matsuura, and D. Oatley-Radcliffe, *Membrane Characterization*. 2017. doi:

- 10.1007/978-0-387-78991-0\_6.
- [3] I. H. Zohra, A. F. Al-Rubaye, and M. J. Kadhim, "Uses of Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy Technique in Pharmaceutical Analysis: A Review," *Int. J. Curr. Pharm. Rev. Res.*, vol. 8, no. 02, pp. 79–84, 2017, doi: 10.25258/ijcpr.v8i02.9189.
- [4] Z. Talebpour, S. Haghgoo, and M. Shamsipur, "<sup>1</sup>H nuclear magnetic resonance spectroscopy analysis for simultaneous determination of levodopa, carbidopa and methyl dopa in human serum and pharmaceutical formulations," *Anal. Chim. Acta*, vol. 506, no. 1, pp. 97–104, 2004, doi: 10.1016/j.aca.2003.10.081.
- [5] P. Thirukumaran, A. S. Parveen, and M. Sarojadevi, "Synthesis and copolymerization of fully biobased benzoxazines from renewable resources," *ACS Sustain. Chem. Eng.*, vol. 2, no. 12, pp. 2790–2801, 2014, doi: 10.1021/sc500548c.
- [6] N. Bouroumane *et al.*, "New Pyrazole-Based Ligands: Synthesis, Characterization, and Catalytic Activity of Their Copper Complexes," *Arab. J. Sci. Eng.*, vol. 47, no. 1, pp. 269–279, 2022, doi: 10.1007/s13369-021-05343-x.
- [7] I. Fernandez-Pastor *et al.*, "Quantitative NMR analysis of L-Dopa in seeds from two varieties of *Mucuna pruriens*," *Phytochem. Anal.*, vol. 30, no. 1, pp. 89–94, 2019, doi: 10.1002/pca.2793.
- [8] L. M. Harwood and T. D. W. Claridge, "o Organic Spectroscopy Organic Spectroscopy".