

BAB V

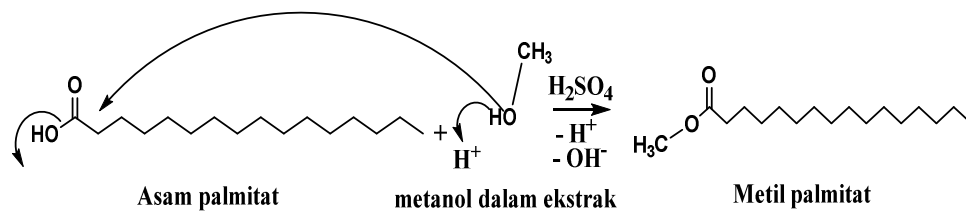
PEMBAHASAN

5.1 Ekstraksi Kombinasi Daun Lidah Buaya (*Aloe vera*) (DLB), Daun Jambu Biji (*Psidium guajava* Linn.) (DJB), dan Rimpang Kunyit (*Curcuma domestica* Val.) (RK)

Ekstraksi merupakan proses pemisahan suatu zat berdasarkan perbedaan kelarutan terhadap dua zat yang tidak saling tercampur. Pelarut polar akan mudah larut dengan zat yang memiliki polaritas tinggi. Ekstraksi komponen fitokimia pada DLB, DJB dan RK menggunakan pelarut metanol 96 %. Metanol akan memecahkan dinding dan membran sel ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK menyebabkan kelompok senyawa polar dalam ekstrak akan mudah larut dalam metanol. Ekstraksi 900 gram simplisa DLB, DJB dan RK diperoleh jumlah ekstrak 763,38 gram dengan presentase rendemen ekstrak 84,82 % yang artinya setiap gram ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK dengan pelarut metanol akan menghasilkan ekstrak sebanyak 84,82 gram.

5.2 Uji Pelarut Metanol

Reaksi esterifikasi antara minyak goreng dan metanol dengan bantuan asam sulfat akan menghasilkan aroma wangi. Hasil uji pelarut metanol dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK tidak tercium aroma wangi yang menunjukkan bahwa ekstrak masi mengandung metanol. Secara umum reaksi esterifikasi pembentukan aroma wangi adalah sebagai berikut:



Gambar 5.1 Reaksi esterifikasi

Pada senyawa asam palmitat, adanya perbedaan keelektronegatifan antara atom C dengan atom O menyebabkan elektron cenderung tertarik ke atom O. Keadaan ini menyebabkan ikatan antara atom C dengan atom O tidak stabil dan putus menjadi C^+ dan OH^- . Pada pelarut metanol, adanya perbedaan keelektronegatifan antara atom O dengan atom H menyebabkan elektron cenderung ke atom O dan atom H lepas sebagai H^+ atom O menjadi O^- . Ion C^+ dari asam palmitat akan berinteraksi dengan O^- dari metanol membentuk senyawa metil palmitat, sedangkan ion H^+ dan OH^- membentuk air sebagai hasil samping.

5.3 Analisis Sifat Fisiko Kimia Ekstrak Kombinasi DLB, DJB, dan RK

5.3.1 Penetapan Massa Jenis

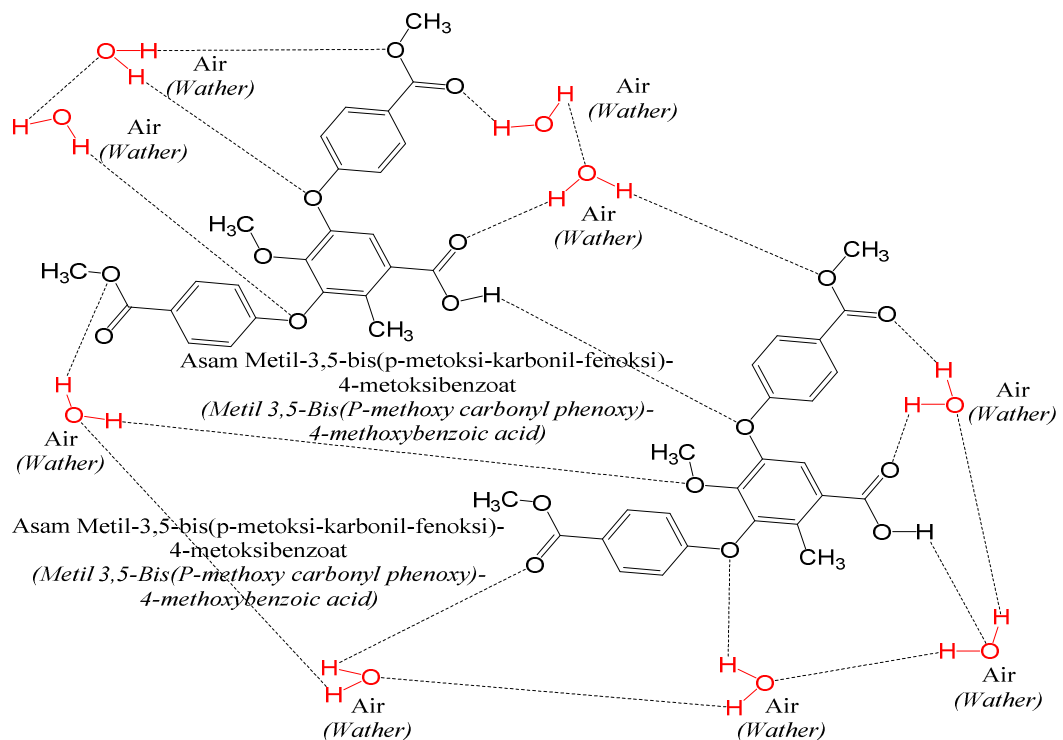
Hasil penetapan massa jenis ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK menggunakan pelarut metanol adalah 0,8482 gram/mL. Artinya dalam 1 mL ekstrak dengan metanol terdapat 0,8482 gram ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK. Atau dengan kata lain,

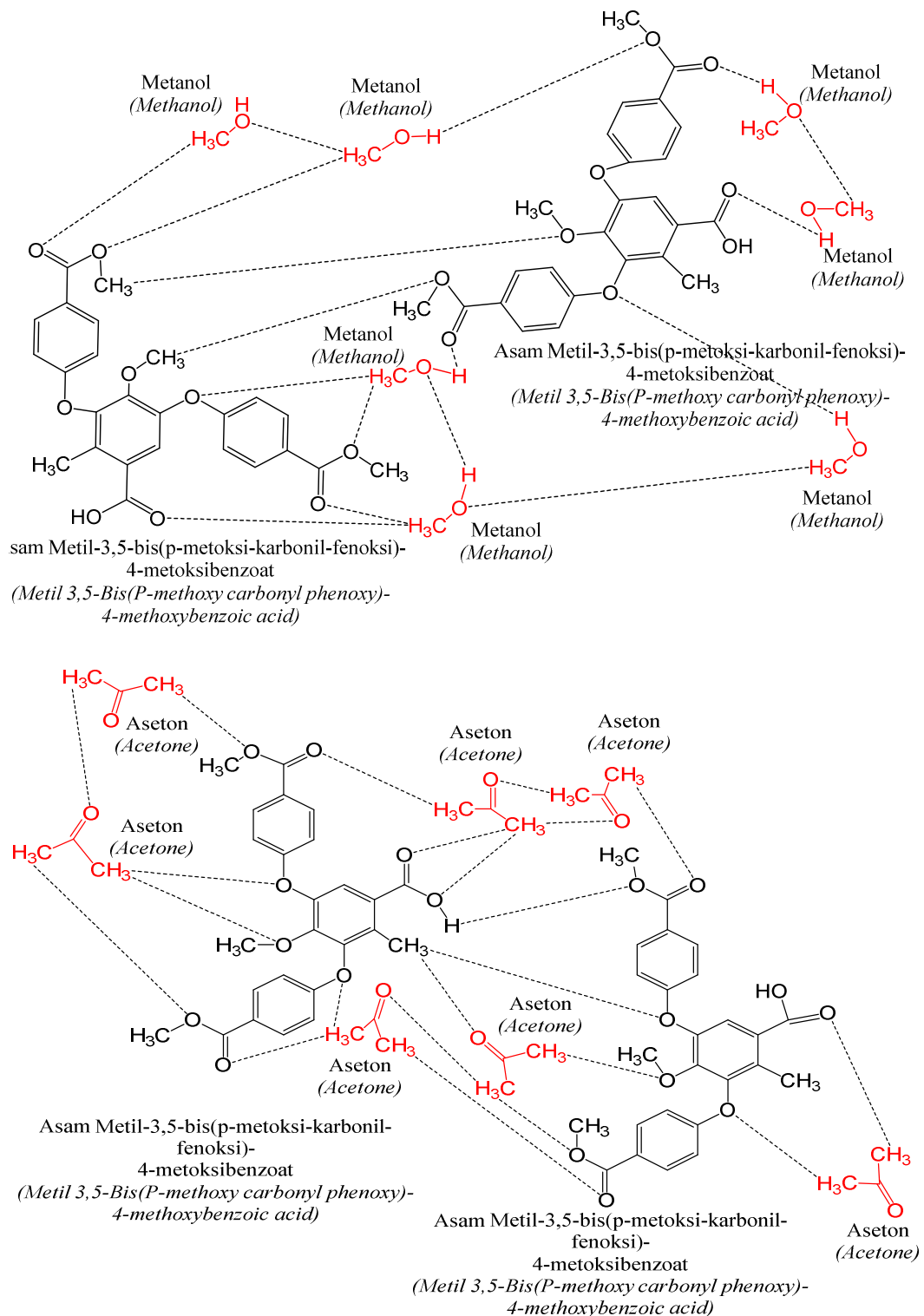
0,8482 gram ekstrak kombinasi ∞ 1 mL larutan

5.3.2 Uji Kelarutan

Hasil uji kelarutan ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK menggunakan pelarut aquades, metanol, aseton, kloroform, dan dietil eter menunjukkan ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK larut dalam pelarut polar seperti aquades, metanol dan aseton tetapi tidak larut dalam pelarut nonpolar seperti kloroform dan dietil eter.

Kelarutan senyawa polar dalam ekstrak dengan pelarut polar mengindikasikan terbentuknya ikatan hidrogen. Secara molekular pembentukan ikatan hidrogen antara aquades, metanol dan aseton dengan senyawa Asam Metil-3,5-bis(p-metoksi-karbonil-fenoksi)-4-metoksibenzoat (*Metil 3,5-Bis(P-methoxy carbonyl phenoxy)-4-methoxybenzoic acid*)³





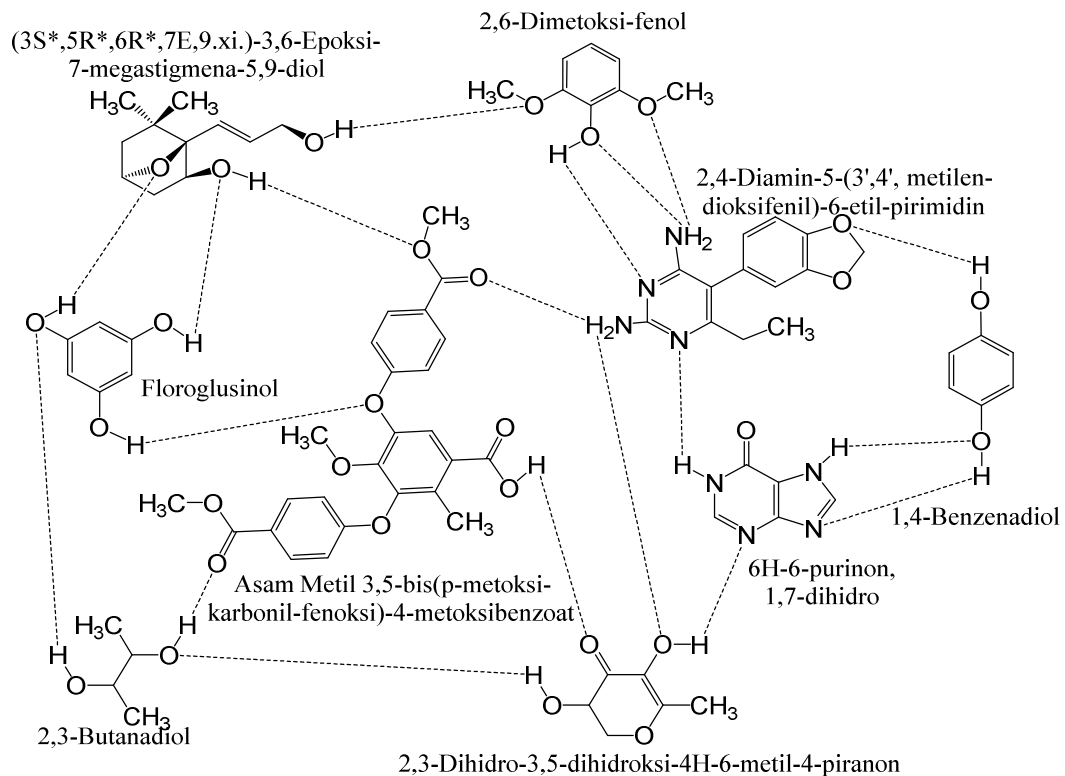
Gambar 5.2 Kelarutan senyawa Asam Metil-3,5-bis(p-metoksi-karbonil-fenoksi)-4-metoksibenzoat (*methyl 3,5-bis(p-methoxy carbonyl phenoxy)-4-methoxybenzoic acid*) ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK dengan pelarut polar.

Pembentukan ikatan hidrogen antara senyawa polar ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK seperti senyawa Asam Metil-3,5-bis(p-metoksi-karbonil-fenoksi)-4-metoksibenzoat (*methyl 3,5-bis(p-methoxy carbonyl phenoxy)-4-methoxybenzoic acid*) dengan pelarut polar seperti aquades, metanol dan aseton terjadi karena adanya elektron bebas dari atom O pada senyawa Asam Metil-3,5-bis(p-metoksi-karbonil-fenoksi)-4-metoksibenzoat (*methyl 3,5-bis(p-methoxy carbonyl phenoxy)-4-methoxybenzoic acid*) yang berkeelektronegatifan tinggi mengakibatkan atom O menghasilkan muatan parsial negatif, sedangkan atom H yang elektropositif menghasilkan muatan parsial positif. Atom O yang bermuatan parsial negatif seolah-olah berikatan dengan atom H yang bermuatan parsial positif membentuk ikatan hidrogen. Hal ini menyebabkan senyawa polar dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK seperti senyawa Asam Metil-3,5-bis(p-metoksi-karbonil-fenoksi)-4-metoksibenzoat (*methyl 3,5-bis(p-methoxy carbonyl phenoxy)-4-methoxybenzoic acid*) larut dalam pelarut polar seperti aquades, metanol dan aseton.

5.3.3 Penentuan Titik Didih

Hasil penentuan titik didih ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK adalah 90⁰C. Titik didih berhubungan dengan adanya gaya tarik-menarik antara ion molekul dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK. Besar/kecilnya titik didih dalam ekstrak sangat bergantung pada kuat/lemahnya gaya tarik antar molekul yang ditunjukkan dengan ikatan

hidrogen. Secara molekular pembentukan ikatan hidrogen antar molekul dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK digambarkan sebagai berikut:



Gambar 5.3 Ikatan hidrogen antar molekul dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK.

Pembentukan ikatan hidrogen antar molekul terjadi pada beberapa senyawa dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK diantaranya senyawa (3S*,5R*,6R*,7E,9.xi.)-3,6-Epoksi-7-megastigma-5,9-diol; 2,6-Dimetoksi-fenol; 2,4-Diamin-5-(3',4'-metilen-dioksifenil)-6-etil-pirimidin; Floroglusinol; Asam Metil 3,5-bis(p-metoksi-karbonil-fenoksi)-4-metoksibenzoat; 1,4-Benzenadiol; 2,3-Dihidro-3,5-dihidroksi-4H-6-metil-4-piranon; 2,3-Butanadiol dan 1,7-Dihidro-6H-6-purinon.

Atom O maupun N yang berkeelektronegatifan tinggi dalam senyawa-senyawa tersebut akan menghasilkan muatan parsial negatif,

sedangkan atom H yang elektropositif akan menghasilkan muatan parsial positif. Atom O maupun atom N yang bermuatan parsial negatif seolah-olah berikatan dengan atom H yang bermuatan parsial positif membentuk ikatan hidrogen. Semakin banyak ikatan hidrogen yang terbentuk maka semakin besar energi yang dibutuhkan untuk memutuskan ikatan hidrogen tersebut. Hal ini pula yang menyebabkan tingginya titik didih dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK.

5.3.4 Penentuan Putar Optik

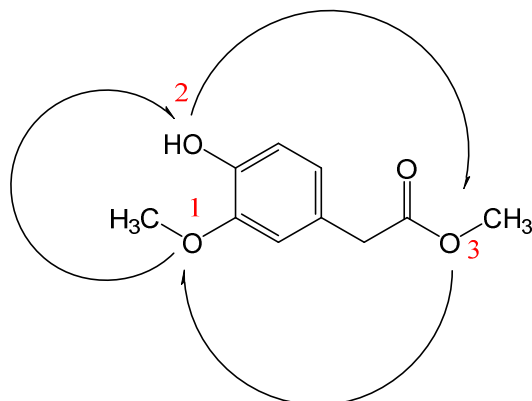
Hasil penentuan putar optik menunjukkan ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK diperoleh sudut putar jenis $[\alpha]_D^{20} = +19,2^0$ pada konsentrasi 0,5 gram/mL, memberi makna senyawa-senyawa polar dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK seperti senyawa Asam,-metil ester-3-metoksi-4-hidroksi-benzenasetat (*Benzeneacetic acid, 4-hydroxy-3-methoxy-, methyl ester*) memutar atau mempolarisasi cahaya kekanan sebesar $19,2^0$.

Sudut putar jenis $[\alpha]_D^{20} = +14,66^0$ pada konsentrasi 0,58 gram/mL, memberi makna senyawa-senyawa polar dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK seperti senyawa Asam,-metil ester-3-metoksi-4-hidroksi-benzenasetat (*Benzeneacetic acid, 4-hydroxy-3-methoxy-, methyl ester*) memutar atau mempolarisasi cahaya kekanan sebesar $14,66^0$.

Sudut putar jenis $[\alpha]_D^{20} = +11,06^0$ pada konsentrasi 0,66 gram/mL, memberi makna senyawa-senyawa polar dalam ekstrak kombinasi DLB,

DJB dan RK seperti senyawa Asam,-metil ester-3-metoksi-4-hidroksi-benzenasetat (*Benzeneacetic acid, 4-hydroxy-3-methoxy-, methyl ester*) memutar atau mempolarisasi cahaya kekanan sebesar $11,06^{\circ}$.

Tanda (+) menunjukkan ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK yang merotasi bidang cahaya terpolarisasi dearah kanan (*dekstrorotay*). Artinya ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK memiliki senyawa kiral. Proyeksi molekul senyawa Asam,-metil ester-3-metoksi-4-hidroksi-benzenasetat (*Benzeneacetic acid, 4-hydroxy-3-methoxy-, methyl ester*) pada ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK digambarkan sebagai berikut:



Asam,-metil ester-3-metoksi-4-hidroksi-benzenasetat
(*Benzeneacetic acid, 4-hydroxy-3-methoxy-, methyl ester*)

Gambar 5.4 Proyeksi molekul senyawa Asam,-metil ester-3-metoksi-4-hidroksi-benzenasetat (*Benzeneacetic acid, 4-hydroxy-3-methoxy-, methyl ester*) dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK

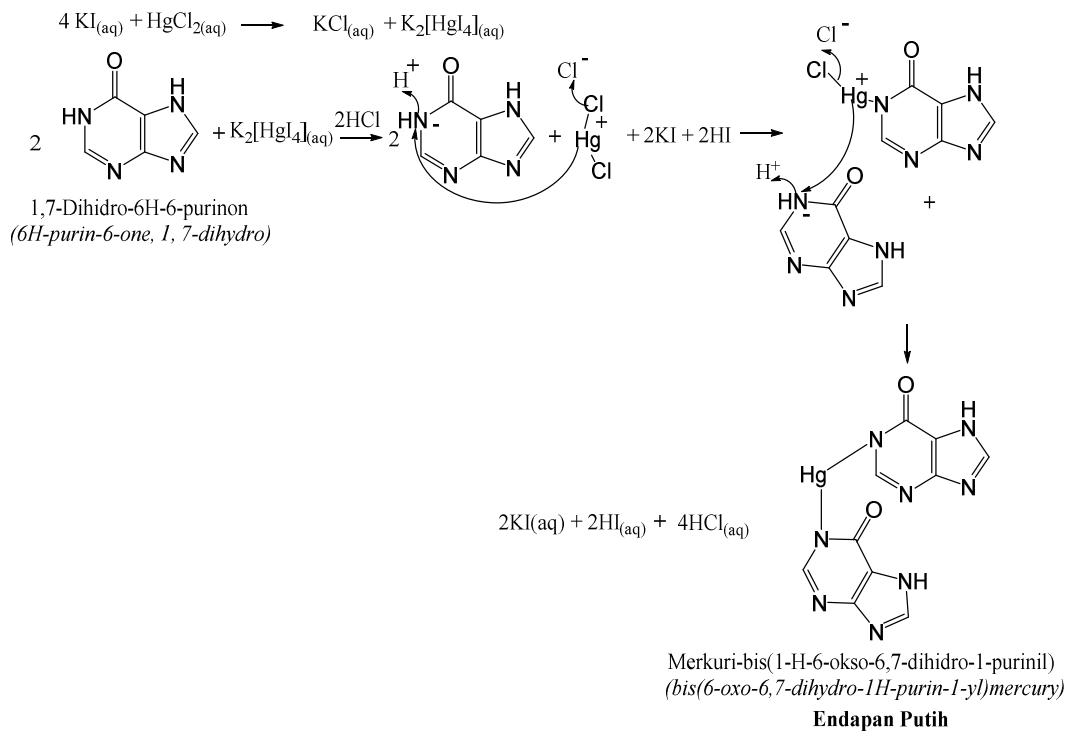
5.4 Analisis Komponen Fitokimia Ekstrak Kombinasi DLB, DJB, dan RK

5.4.1 Uji Alkaloid

Hasil analisis fitokimia ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK pada uji alkaloid dengan reagen Mayer dan Wagner sebagai berikut:

1. Reagen Mayer

Hasil analisis reagen Mayer terbentuk endapan putih yang menunjukkan adanya kelompok senyawa alkaloid dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK. Secara molekular reaksi pembentukan endapan putih dapat digambarkan sebagai berikut:

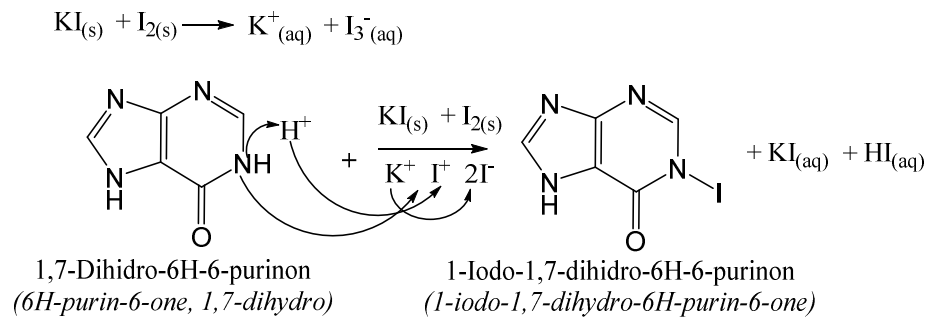


Gambar 5.5 Reaksi senyawa 1,7-Dihidro-6H-6-purion (6H-purin-6-one, 1,7-dihydro) dengan reagen Mayer

Langkah pertama KI ditambah HgCl_2 bereaksi membentuk KCl dan $\text{K}_2[\text{HgI}_4]$. Langkah kedua $\text{K}_2[\text{HgI}_4]$ dilarutkan dalam HCl membentuk HgCl_2 , KI dan HI. Adanya perbedaan keelektronegatifan antara atom Hg dan Cl menyebabkan elektron cenderung tertarik ke atom Cl. Keadaan tersebut mengakibatkan ikatan antara atom Hg dan Cl menjadi tidak stabil dan putus menghasilkan ion Hg^{2+} dan ion Cl^- . Ion Hg^{2+} kemudian mengikat ion N^- pada 2 senyawa 1,7-Dihidro-6H-6-purinon (*6H-purin-6-one, 1,7-dihydro*) membentuk senyawa Merkuri-bis(1-H-6-okso-6,7-dihidro-1-purinil) (*Bis(6-oxo-6,7-dihydro-1H-purin-1-yl)mercury*) endapan berwarna putih. Dengan demikian dapat disimpulkan ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK mengandung kelompok senyawa alkaloid.

2. Reagen Wagner

Hasil analisis reagen Wagner membentuk endapan coklat menunjukkan adanya kelompok senyawa alkaloid dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK. Secara molekular reaksi pembentukan endapan coklat dapat digambarkan sebagai berikut:



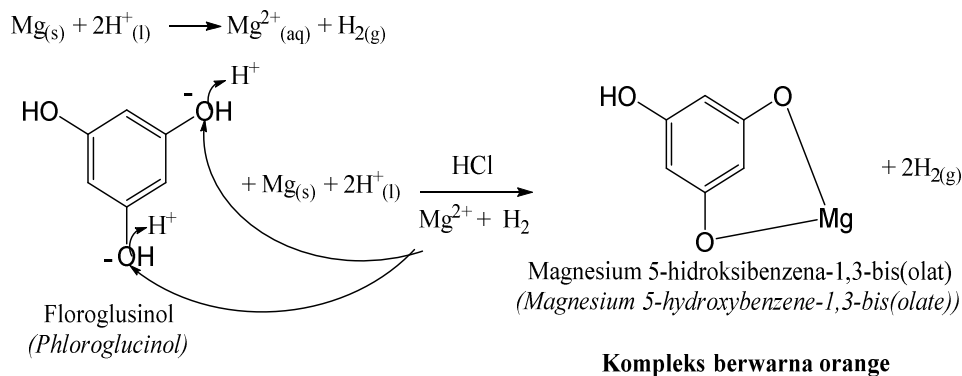
Endapan coklat

Gambar 5.6 Reaksi senyawa 1,7-Dihidro-6H-6-purion (*6H-purin-6-one, 1,7-dihydro*) dengan reagen Wagner

KI ditambah yodium bereaksi membentuk ion K^+ , I^+ , dan 2I^- . Senyawa 1,7-Dihidro-6H-6-purion (*6H-purin-6-one, 1,7-dihydro*) mengandung atom N, memiliki pasangan elektron bebas sehingga atom N bereaksi dengan ion I^+ membentuk ikatan kovalen koordinasi, disamping itu adanya perbedaan keelektronegatifan antara atom N dan H menyebabkan elektron cenderung tertarik ke atom N. Keadaan tersebut mengakibatkan ikatan antara atom N dan H menjadi tidak stabil dan putus, kemudian terjadi pembentukan ikatan yang kuat antara ion N^- dengan ion I^+ membentuk senyawa kompleks 1-Iodo-1,7-Dihidro-6H-6-purion (*1-Iodo-1,7-dihydro-6H-purin-6-one*) sebagai hasil utama, sedangkan KI dan HI sebagai hasil samping. Dengan demikian dapat disimpulkan ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK mengandung kelompok senyawa alkaloid.

5.4.2 Uji Flavonoid

Hasil uji flavonoid menggunakan reagen Wilstater sianidin (HCl dan serbuk magnesium) menunjukkan perubahan warna menjadi orange yang membuktikan ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK mengandung kelompok senyawa flavonoid. Secara molekular pembentukan kompleks kuning magnesium flavonoida sebagai berikut:

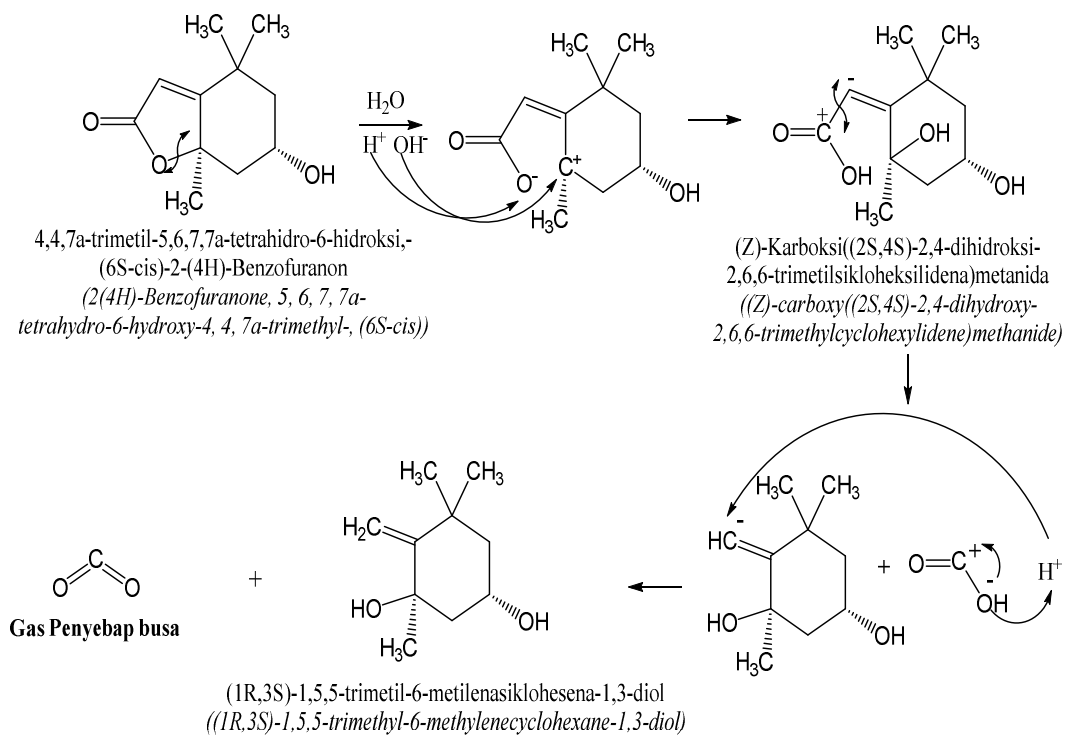


Gambar 5.7 Reaksi reagen Wilstater Sianidin dengan senyawa Floriglucosin (*phloroglucosin*)

Langkah pertama, adisi dengan logam Mg. Logam Mg yang dilarutkan dalam asam akan membentuk ion Mg^{2+} . Pada senyawa Floriglucosin (*phloroglucosin*) ada beda keelektronegatifan antara atom O dan atom H menyebabkan elektron cenderung tertarik ke atom O. Keadaan tersebut mengakibatkan ikatan antara atom O dan H tidak stabil dan putus menjadi ion H^+ dan O^- . Ion Mg^{2+} kemudian mengikat anion oksida dari senyawa Floriglucosin (*phloroglucosin*) membentuk kompleks orange garam Magnesium 5-hidroksibenzena-1,3-bis(olat) (*Magnesium 5-hydroxybenzene-1,3-bis(olate)*).

5.4.3 Uji Saponin

Hasil analisis metode Forth membentuk busa menunjukkan adanya kelompok senyawa saponin dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK. Secara molekular reaksi pembentukan busa dapat digambarkan sebagai berikut:

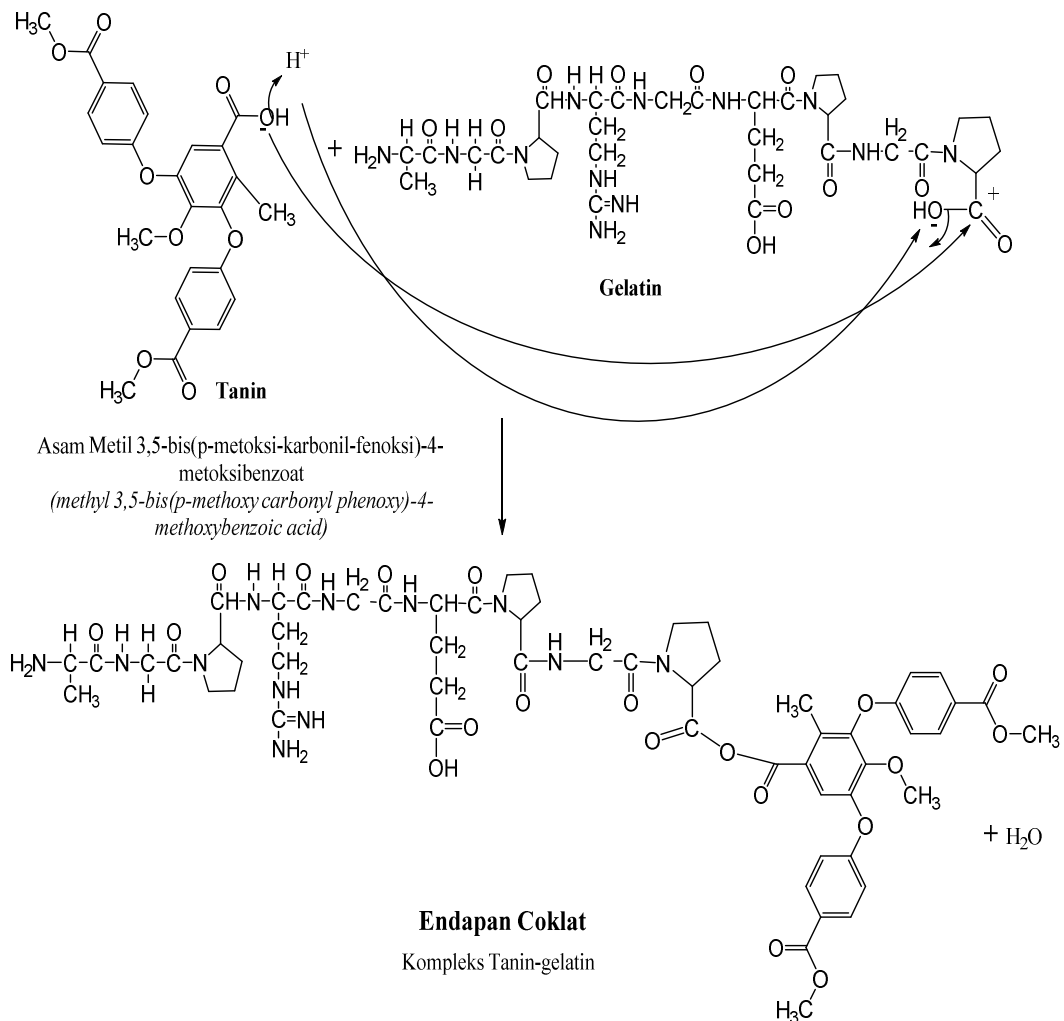


Gambar 5.8 Reaksi senyawa 4,4,7a-trimetil-5,6,7,7a-tetrahidro-6-hidroksi,-(6S-cis)-2-(2H)-Benzofuranon (2(4H)-Benzofuranone,5,6,7,7a-tetrahydro-6-hydroxy-4,4,7a-trimethyl-, (6S-cis) dengan metode Forth

Saponin merupakan kelompok senyawa yang bersifat amphifilik (memiliki gugus hidrofilik dan gugus hidrofobik). Senyawa 4,4,7a-trimetil-5,6,7,7a-tetrahidro-6-hidroksi,-(6S-cis)-2-(2H)-Benzofuranon dihidrolisis menyebabkan ikatan antara O dan C putus menjadi C⁺ dan O⁻. Interaksi H⁺ dan OH⁻ dari air dengan atom C⁺ dan O⁻ menghasilkan senyawa (Z)-Karboksi((2S,4S)-2,4-dihidroksi-2,6,6-trimetilsikloheksilidena) metanida ((Z)-Carboxy((2S,4S)-2,4-dihydroxy-2,6,6-trimethylcyclohexylidene) methanide), kemudian terurai lagi menjadi (1R,3S)-1,5,5-trimetil-6-metilenasikloheksena-1,3-diol ((1R,3S)-1,5,5-trimethyl-6-methylenecyclohexane-1,3-diol) dan gas CO₂ (penyebabkan busa).

5.4.4 Uji Tanin

Hasil uji Tanin terlihat adanya endapan coklat yang menunjukkan ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK dengan gelatin terdapat kelompok senyawa tanin. Secara molekular reaksi pembentukan endapan gelatin dapat digambarkan sebagai berikut:



Gambar 5.9 Reaksi Gelatin dengan senyawa Asam Metil 3,5-bis(p-metoksi-karbonil-fenoksi)-4-metoksibenzoat (*methyl 3,5-bis(p-methoxy carbonyl phenoxy)-4-methoxybenzoic acid*)

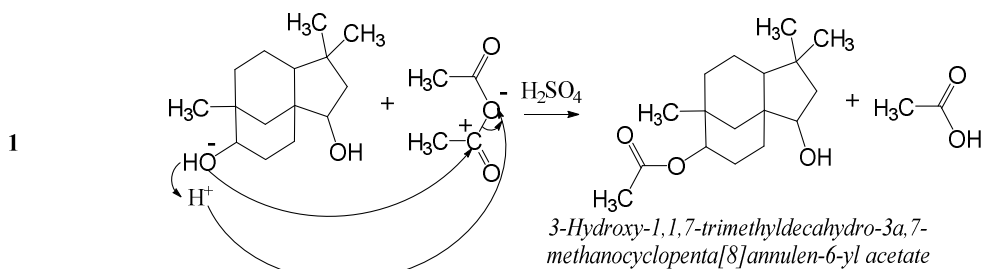
Perbedaan keelektronegatifan antara atom O dan H pada senyawa Asam Metil 3,5-bis(p-metoksi-karbonil-fenoksi)-4-metoksibenzoat (*methyl 3,5-bis(p-methoxy carbonyl phenoxy)-4-methoxybenzoic acid*) menyebabkan atom H terprotonasi menjadi H^+ sedangkan O menjadi O^- . Gelatin (protein) berperan sebagai basa yang akan melepaskan ion OH^- untuk berikatan dengan H^+ membentuk air sebagai hasil samping.

Sedangkan interaksi antara O⁻ dengan C⁺ menghasilkan kompleks tanin-gelatin dengan endapan coklat sebagai hasil utama. Dengan demikian ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK mengandung kelompok senyawa tanin.

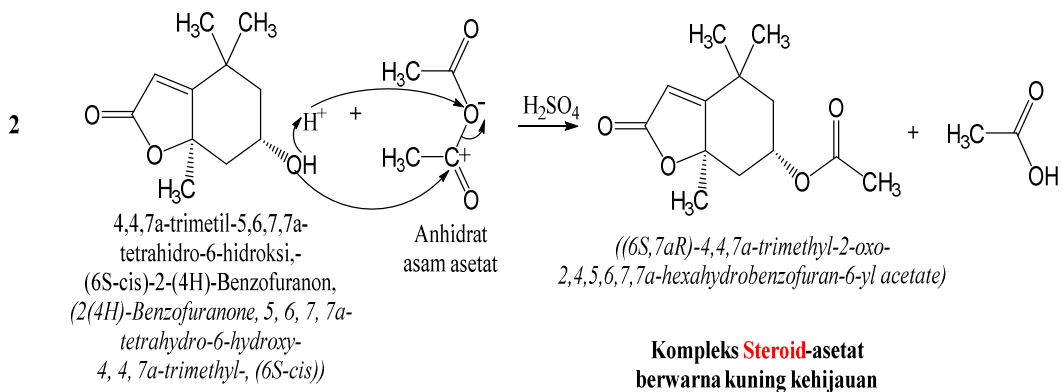
5.4.5 Uji Steroid dan Triterpenoid

Hasil analisis reagen Liebermann-Burchard (asam asetat anhidrida dan H₂SO₄ pekat), membentuk kompleks berwarna kuning kehijauan menunjukkan adanya kelompok senyawa Steroid dan triterpenoid dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB, dan RK. Warna kuning merupakan tipikal Steroid, sedangkan hijau tipikal Triterpenoid. Secara molekular reaksi pembentukan kompleks Steroid/Triterpenoid ekstrak kombinasi DLB, DJB, dan RK terlihat pada dua kelompok senyawa steroid dan triterpenoid berikut:

4,4,8,-Trimetiltrisiklo[6.3.1.0(1,5)]
dodekana-2, 9-diol
(4, 4, 8-Trimethyltricyclo[6.3.1.0(1, 5)]
dodecane-2, 9-diol)



**Kompleks Triterpenoid-asetat
berwarna kuning kehijauan**



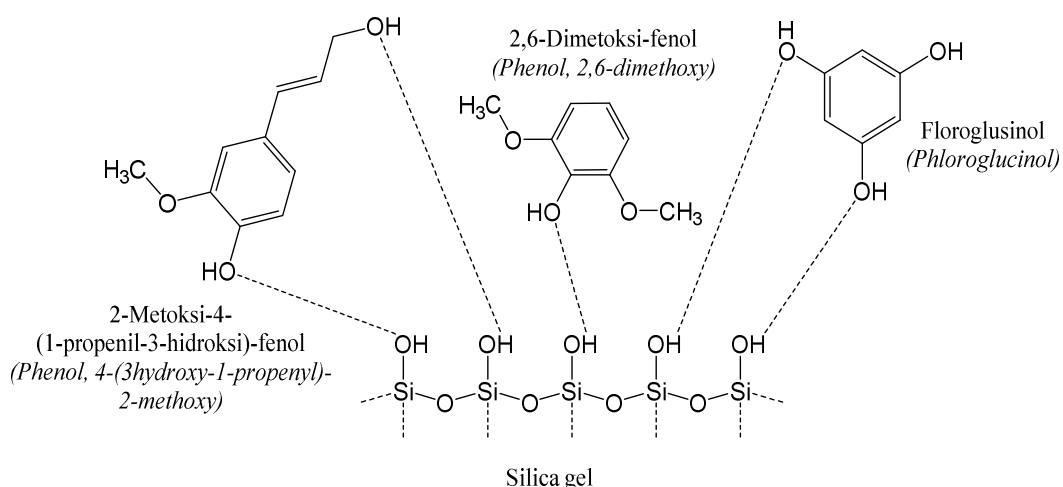
Gambar 5.10 Reaksi reagen Liebermann-Burchard dengan kelompok senyawa Steroid atau Triterpenoid

Asam Asetat (H_2SO_4) mampu mereduksi ikatan antara C dan O pada anhidrat asam asetat maupun ikatan antara O dan H pada senyawa 4, 4, 8,- Trimetrilsiklo [6.3.1.0(1,5)] dodekana-2,9-diol (4, 4,8-Trimethyltricyclo [6.3.1.0(1,5)] dodecane-2,9-diol dan senyawa 4, 4, 7a-trimetil-5, 6, 7, 7a-tetrahidro -6-hidroksi,- (6S-cis) -2- (4H)- Benzofuranon (2(4H)-Benzofuranone,5,6,7,7a-tetrahydro-6-hydroxy-4,4,7a-trimetil-, (6S-cis) menjadi C^+ dan O^- serta H^+ dan O^- . Ion CH_3CO^+ dari anhidrat asam asetat akan berinteraksi dengan O^- menghasilkan kompleks steroid/triterpenoid-asetat berwarna kuning kehijauan, sedangkan ion CH_3COO^- akan berinteraksi dengan H^+ membentuk CH_3COOH sebagai hasil samping. Warna kuning dominan dari hijau menunjukkan jumlah Steroid lebih banyak dibandingkan Triterpenoid, hal ini didukung dengan data GC-MS.

5.5 Analisis Komponen Senyawa Kimia Ekstrak Kombinasi DLB, DJB, dan RK

5.5.1 Kromatografi Lapis Tipis (KLT)

Analisis kromatografi lapis tipis (KLT) dilakukan untuk menegaskan hasil yang didapat pada skrining fitokimia. Analisis kromatografi lapis tipis (KLT) dilakukan untuk kelompok senyawa yang menunjukkan hasil positif seperti uji alkaloid, flavonoid, saponin, tanin, triterpenoid dan steroid. Pelarut pengembang yang digunakan pada kromatografi lapis tipis (KLT) adalah metanol:air (8:2). Hasil analisis tersebut menunjukkan timbulnya noda berwarna kuning dengan lampu UV 254 nm dengan nilai Rf 0,89, Rf 0,91, Rf 0,86. Hasil analisis menunjukkan ekstrak kombinasi DLB, DJB, dan RK mengandung golongan senyawa flavonoid. Timbulnya noda dengan berbagai nilai Rf menunjukkan adanya interaksi molekuler gugus -OH pada flavonoid dengan gugus polar pada fase diam (silica gel). Secara umum interaksi molekuler pada analisis kromatografi lapis tipis (KLT) digambarkan sebagai berikut:



Gambar 5.11 Interaksi molekuler kelompok senyawa flavonoid dengan silica gel

Interaksi molekular gugus –OH flavonoid diperkuat dari pita serapan pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} yang menunjukkan spektra gugus –OH aromatik dan –OH alifatik.

5.5.2 Infra Merah (IR)

Analisis Spektrum infra merah (IR) ekstrak kombinasi DLB, DJB, dan RK memperlihatkan adanya pita serapan pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} dengan bentuk pita melebar merupakan pita serapan dari gugus –NH yang mengindikasikan bahwa gugus-gugus tersebut terdapat dalam bentuk alifatik maupun aromatik. Pita serapan tajam pada bilangan gelombang 1053,29 cm^{-1} merupakan pita serapan gugus $\equiv\text{NH}$ memperkuat adanya senyawa yang mengandung unsur N dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB, dan RK. Adanya unsur N dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB, dan RK diperkuat oleh pita serapan tajam pada bilangan gelombang 2344,53-2364,55 cm^{-1} yang merupakan pita serapan dari ulur –C=N alifatik maupun aromatik, serta pita serapan tajam pada bilangan gelombang 1454,34 cm^{-1} yang merupakan pita serapan dari ulur –C \equiv N dan ulur –C-N.

Pita serapan pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} dengan bentuk pita melebar juga merupakan pita serapan dari gugus –OH alifatik dan –OH aromatik. Adanya senyawa alifatik diperkuat dengan munculnya ulur –C=C- alifatik pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} . Sedangkan senyawa aromatik diperkuat dengan munculnya ulur –C=C- aromatik pada

bilangan gelombang 1454,34 cm^{-1} . Baik senyawa alifatik maupun aromatik ditemukan ulur $\text{-C}\equiv\text{C-}$ pada bilangan gelombang 2078,41 cm^{-1} , keberadaan ulur $\text{-C}\equiv\text{C-}$ akan dibuktikan dengan data fragmen GC-MS.

Pita serapan pada bilangan gelombang 2364,55 cm^{-1} menunjukkan ulur -C=O mengindikasikan senyawa dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB, dan RK terdapat senyawa keton dan asam karboksilat serta senyawa eter (C-O-C) pada bilangan gelombang 1053,29 cm^{-1} . Pita serapan pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} menunjukkan renggang -C=O amida.

Selain senyawa aromatik, analisis spektrum infra merah (IR) ekstrak kombinasi DLB, DJB, dan RK menunjukkan pita serapan dari renggang -Si-H (2078,41 cm^{-1}), -Si-CH_3 dan Si-O-C (1053,29 cm^{-1}), Si-O-Si (1032,26 cm^{-1}) dan Si-C (587,10 cm^{-1}). Hal ini mengindikasikan senyawa dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB, dan RK terdapat senyawa eter silikon dan metil silikon alifatik. Dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB, dan RK juga terdapat senyawa alkil halida (R-X) dengan adanya pita serapan pada bilangan gelombang 578,10 cm^{-1} yang merupakan pita serapan gugus -C-Br dan gugus -C-Cl .

Hasil vibrasi spektra IR dapat menjelaskan adanya ikatan antara molekul ekstrak kombinasi DLB, DJB, dan RK yang menentukan sifat fisikokimia seperti titik didih dan kelarutan. Adanya ikatan antara molekul dalam ekstrak kombinasi DLB, DJB, dan RK diperkuat dari data gugus fungsi pada pita serapan bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} yang

menunjukkan serapan regang gugus -NH aromatik, -NH alifatik, -OH alifatik dan -OH aromatik.

5.5.3 Gas Chromatography dan Mass Spectrometry (GC-MS)

5.5.3.1 Identifikasi senyawa 3-karboksi-N, N, N-trimetil-klorida-2-hidroksi-1-Propanaminium, (.+-.). (*1-Propanaminium, 3-carboxy-2-hidroxy-N, N, N-trimethyl-, chloride, (.+-.)*)

Spekta fragmen senyawa 3-karboksi-N, N, N-trimetil-klorida-2-hidroksi-1-Propanaminium, (.+-.). (*1-Propanaminium, 3-carboxy-2-hidroxy-N, N, N-trimethyl-, chloride, (.+-.)*) ($m/z = 197$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z = 197$. Ion molekul (M^+) $m/z = 197$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-N(CH_3)_3Cl$ ($m/z = 95$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z = 102$. Fragmentasi gugus $-N(CH_3)_3Cl$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -C-N- alifatik, $587,10\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -C-Cl dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z = 197$ juga memperlihatkan adanya substitusi gugus -OH ($m/z = 17$) menjadi $-CH_3$ ($m/z = 15$), fragmentasi gugus -OH ($m/z = 17$), dan pembentukan ikatan rangkap C=N dan C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z = 96$. Substitusi gugus -OH menjadi $-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik menjadi $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$, fragmentasi gugus -OH bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik, pembentukan ikatan rangkap C=N dan C=C

bilangan gelombang $2364,55 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=N dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 96$ memperlihatkan adanya reduksi rangkap -C=N menjadi -C-N, substitusi gugus C=O ($m/z= 28$) menjadi -OH ($m/z= 17$), reduksi rangkap C=C dan fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 88$. Reduksi rangkap -C=N menjadi -C-N didukung data IR pada bilangan gelombang $2364,55 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=N menjadi $1384,33 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -C-N- alifatik, substitusi gugus C=O menjadi -OH bilangan gelombang $2344,53 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=O menjadi $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik, reduksi rangkap C=C dan fragmentasi gugus $-CH_3$ bilangan gelombang $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik dan $1384,33 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 88$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -C-N menjadi -C=N, substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi C=O ($m/z= 28$) dan pembentukan rangkap -C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 84$. Substitusi gugus -C-N menjadi -C=N dan substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi C=O didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -C-N- alifatik menjadi $2364,55 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=N alifatik dan $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik menjadi $2344,53 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=O, pembentukan rangkap -C=C bilangan gelombang $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 84$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom H ($m/z= 1$) dan pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 81$. Fragmentasi atom H dan pembentukan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 81$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -O- ($m/z= 16$), reduksi 2 rangkap C=C dan 1 rangkap C=N menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 74$. Sedangkan fragmentasi gugus HN-CCCC- ($m/z= 63$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 18$. Fragmentasi atom -O- didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=O, reduksi rangkap C=C bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=C alifatik, reduksi C=N bilangan gelombang $2364,55\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=N alifatik sedangkan fragmentasi gugus HN-CCCC- bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=C alifatik, $2364,55\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=N alifatik dan $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -NH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 74$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -C-N- menjadi -C=N dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 71$. substitusi gugus -C-N- menjadi -C=N didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -C-N- alifatik menjadi $2364,55\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=N alifatik, fragmentasi atom H bilangan gelombang $1844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=71$ memperlihatkan fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z=13$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=58$. Sedangkan substitusi gugus $-NH_2$ ($m/z=16$) menjadi $-CH$ ($m/z=13$) dan pembentukan siklik menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=66$. Fragmentasi gugus $-CH$ terlihat pada data IR bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-CH$ alifatik, substitusi gugus $-NH$ menjadi $-CH$ bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-NH$ alifatik menjadi $1844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-CH$ alifatik, pembentukan siklik bilangan gelombang $1844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-C=C-$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=58$ memperlihatkan adanya reduksi rangkap $C=N$ dan pembentukan rangkap $C=C$ serta substitusi gugus $-CH_3$ menjadi CH_2 menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=55$. Reduksi rangkap $C=N$ dan pembentukan rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2364,55\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $C=N$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-C=C-$ alifatik, substitusi gugus $-CH_3$ menjadi CH_2 bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$ menjadi $1844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=55$ memperlihatkan adanya substitusi rangkap $C=C$ menjadi $C\equiv C$ dan substitusi gugus $-C-N$ menjadi $-C\equiv N$ dan reduksi rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=52$. Substitusi rangkap $C=C$ menjadi $C\equiv C$ dan reduksi rangkap $C=C$ terlihat pada data IR bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-C=C-$ alifatik

menjadi $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $\text{-C}\equiv\text{C}$, substitusi rangkap -C-N menjadi -C=N bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $\text{-C}\equiv\text{C}$ menjadi $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $\text{-C}\equiv\text{N}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 52$ memperlihatkan adanya reduksi rangkap $\text{-C}\equiv\text{N}$ menjadi -C=N dan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 44$. Sedangkan reduksi rangkap $\text{-C}\equiv\text{N}$ dan $\text{-C}\equiv\text{C}$ menjadi -C=C- dan pembentukan siklik menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 36$. Reduksi rangkap $\text{-C}\equiv\text{N}$ menjadi -C=N dan Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $\text{-C}\equiv\text{N}$ menjadi $2364,55\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -C=N dan $1844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -CH alifatik, reduksi rangkap $\text{-C}\equiv\text{N}$ dan $\text{-C}\equiv\text{C}$ menjadi -C=C- dan pembentukan siklik, bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $\text{-C}\equiv\text{N}$ dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $\text{-C}\equiv\text{C}$ menjadi $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 44$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 41$. Pembentukan siklik dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $1844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 41$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -C=N ($m/z= 27$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 15$.

Fragmentasi gugus -C=N didukung data IR pada bilangan gelombang $2364,55\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan alur -C=N alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 36$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 30$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 30$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 27$. Pembentukan rangkap C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=C alifatik dan $1844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 15$ memperlihatkan adanya fragmentasi 3 atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 12$. Fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $1844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -CH alifatik.

5.5.3.2 Identifikasi senyawa Asam Format (*Formic acid*)

Spektra fragmen senyawa Asam Format (*Formic acid*) ($m/z= 46$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 46$. Ion molekul (M^+) $m/z= 46$ memperlihatkan adanya substitusi gugus C=O ($m/z= 28$) menjadi C=C ($m/z= 24$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 41$. Sedangkan substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi C=O ($m/z= 28$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 32$. Substitusi gugus C=O menjadi

C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2344,53 cm^{-1} spektra serapan gugus -C=O alifatik menjadi 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik, substitusi gugus -OH menjadi C=O bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik menjadi 2344,53 cm^{-1} spektra serapan gugus -C=O alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 41$ memperlihatkan substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi C=C ($m/z= 24$), pembentukan siklik dan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 36$. Substitusi gugus -OH menjadi C=C dan rangkap C=C serta pembentukan siklik didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik menjadi 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 36$ memperlihatkan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan pembentukan rangkap $\text{C}\equiv\text{C}$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 26$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang 1844,43 cm^{-1} spektra serapan -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik, pembentukan rangkap $\text{C}\equiv\text{C}$ bilangan gelombang 1384,33 cm^{-1} spektra serapan gugus $\text{C}\equiv\text{C}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 29$ memperlihatkan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 18$. Sedangkan fragmentasi atom -O- ($m/z= 16$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 15$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang 1844,43 cm^{-1} spektra serapan -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra

serapan ulur C=C alifatik, fragmentasi atom -O- bilangan gelombang 2344,53 cm^{-1} spektra serapan gugus C=O alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 15$ memperlihatkan adanya fragmentasi 3 atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 12$. Fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik.

5.5.3.3 Identifikasi senyawa 1-Hidroksi-2-propanon (*2-Propanone, 1-hidroxy*)

Spektra fragmen senyawa 1-Hidroksi-2-propanon (*2-Propanone, 1-hidroxy*) ($m/z= 74$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 74$. Ion molekul (M^+) $m/z= 74$ memperlihatkan substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi -C=C ($m/z= 12$), pembentukan siklik dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 67$. Substitusi gugus -OH menjadi -C=C sesuai data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan C=C alifatik, pembentukan siklik dan fragmentasi atom H bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 74$ juga memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₃ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 60$. Fragmentasi gugus -CH₃ sesuai data IR pada bilangan gelombang 1384,33 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH₃.

Ion molekul (M^+) $m/z= 67$ memperlihatkan fragmentasi gugus –CCCC- ($m/z= 48$) dan pembentukan 2 ikatan hidrogen pada molekul air menghasilkan puncak ion (M^+) pada $m/z= 20$. Fragmentasi gugus –CCCC- didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -C=C- alifatik, sedangkan pembentukan ikatan hidrogen didukung data titik didih (90^0C).

Ion molekul (M^+) $m/z= 60$ memperlihatkan substitusi gugus –C=O ($m/z= 28$) menjadi C=C ($m/z= 24$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 55$. Substitusi gugus –C=O menjadi C=C didukung dengan data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O alifatik menjadi $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik, fragmentasi atom H bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 55$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom –C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 43$. Fragmentasi atom –C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) dengan $m/z= 43$ memperlihatkan substitusi gugus gugus –OH ($m/z= 17$) menjadi –CH ($m/z= 13$) dan pembentukan siklik menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 37$. Fragmentasi atom –C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 31$. Sedangkan fragmentasi gugus –OH ($m/z= 17$) dan pembentukan rangkap $\text{C}\equiv\text{C}$ menghasilkan

puncak ion (M^+) $m/z= 26$. Substitusi gugus $-OH$ menjadi $-CH$ dan pembentukan siklik didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik, fragmentasi atom $-C-$ dan $-OH$ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik, pembentukan rangkap $C=C$ bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) dengan $m/z= 26$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) pada $m/z= 15$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR dengan bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

5.5.3.4 Identifikasi Senyawa Asam-2-hidroksietil-2-propenoat ester (2-Propenoic acid, 2-hidroxyethyl ester)

Spektra fragmen senyawa Asam-2-hidroksietil-2-propenoat ester (*2-Propenoic acid, 2-hidroxyethyl ester*) ($m/z= 116$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 116$. Ion molekul (M^+) $m/z= 116$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH-OH$ ($m/z= 30$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 86$. Fragmentasi gugus $-CH-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 86$ memperlihatkan fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 73$. Fragmentasi atom $-$

O- ($m/z= 16$), pembentukan siklik dan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 68$. Sedangkan substitusi gugus C=O ($m/z= 28$) menjadi -OH ($m/z= 17$), fragmentasi gugus -CCH₂ ($m/z= 26$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 61$. Fragmentasi gugus -CH, atom H dan fragmentasi gugus -CCH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan -CH alifatik, fragmentasi atom -O- bilangan gelombang 2344,53 cm⁻¹ spektra serapan gugus C=O, pembentukan siklik dan rangkap C=C bilangan gelombang 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik, substitusi gugus C=O menjadi -OH bilangan gelombang 2344,53 cm⁻¹ spektra serapan gugus C=O menjadi 3419,5 cm⁻¹ spektra serapan gugus -OH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 68$ memperlihatkan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) pada $m/z= 58$. Sedangkan fragmentasi gugus H₃C-O- ($m/z= 31$) dan reduksi rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) pada $m/z= 40$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan -CH alifatik, fragmentasi gugus H₃C-O- bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan O-CH₃, reduksi rangkap C=C bilangan gelombang 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 58$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom H ($m/z= 1$) dan pembentukan rangkap C≡C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 55$. Pembentukan rangkap C≡C didukung data IR bilangan

gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $\text{C}\equiv\text{C}$ dan fragmentasi atom H $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-\text{CH}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 55$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-\text{C}-$ ($m/z= 12$) dan pembentukan siklik menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 44$. Fragmentasi atom $-\text{C}-$ dan siklisasi didukung dengan data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 44$ dan 40 memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}$ ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 31$ dan 27 . Fragmentasi gugus $-\text{CH}$ didukung dengan data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 31$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-\text{C}-$ ($m/z=12$) dan atom H ($m/z= 1$) serta pembentukan 1 ikatan hidrogen pada air menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 19$. Fragmentasi atom $-\text{C}-$ dan atom H didukung dengan data IR bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-\text{CH}$ alifatik, sedangkan pembentukan ikatan hidrogen didukung data titik didih (90^0C).

Ion molekul (M^+) $m/z= 27$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-\text{C}-$ ($m/z=12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 15$. Fragmentasi atom $-\text{C}-$ dan atom H didukung dengan data IR bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-\text{CH}$ alifatik.

5.5.3.5 Identifikasi senyawa 2,3-Butanadiol (2,3-Butanediol)

Spektra fragmen senyawa 2,3-Butanadiol (2,3-Butanediol) ($m/z=90$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z=90$. Ion molekul (M^+) $m/z=90$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z=15$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=75$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ sesuai data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z=75$ memperlihatkan substitusi gugus $-OH$ menjadi $-CH_2$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=72$. Substitusi gugus $-OH$ menjadi $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=72$ memperlihatkan fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) dan fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=57$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=57$ memperlihatkan fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z=13$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=45$. Fragmentasi gugus $-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) dengan $m/z=45$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap $C\equiv C$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=41$.

Fragmentasi gugus -OH ($m/z= 17$) serta pembentukan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) pada $m/z= 27$. Pembentukan rangkap $\text{C}\equiv\text{C}$ dan C=C masing-masing didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=C alifatik dan $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $\text{C}\equiv\text{C}$, fragmentasi gugus -OH bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 41$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 31$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

5.5.3.6 Identifikasi senyawa 1,2-Siklopentanadion (*1,2-Cyclopentanedione*)

Spektra fragmen senyawa 1,2-Siklopentanadion (*1,2-Cyclopentanedione*) ($m/z= 101$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 101$ dengan 3 ikatan hidrogen pada gugus C=O . Ion molekul (M^+) $m/z= 101$ memperlihatkan adanya fragmentasi 3 atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 98$. Pembentukan ikatan hidrogen didukung data titik didih (90°C).

Ion molekul (M^+) $m/z= 98$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 95$. Pembentukan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=C alifatik,

fragmentasi atom H bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 95$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 82$. Sedangkan fragmentasi atom -O- ($m/z= 16$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 79$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik, fragmentasi atom -O- pada bilangan gelombang 2344,53 cm^{-1} spektra serapan gugus C=O alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 79$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 69$. Fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) dan pembentukan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 66$. Fragmentasi gugus C=C ($m/z= 24$) dan pemutusan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 58$. Fragmentasi atom -C- dan -CH didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik, pemutusan dan pembentukan rangkap C=C bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 75$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi C=O ($m/z= 28$) dan pembentukan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 72$. Substitusi gugus -OH menjadi C=O didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra

serapan gugus -OH alifatik menjadi $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O alifatik, pembentukan C=C bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 69$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 55$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 66$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-O-$ ($m/z= 16$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 52$. Fragmentasi atom $-O-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 55$ memperlihatkan adanya substitusi gugus C=O ($m/z= 28$) menjadi -OH ($m/z= 17$) dan fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 45$. Substitusi gugus C=O menjadi -OH didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O alifatik menjadi $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik, fragmentasi atom $-C-$ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 52$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 49$. Pembentukan rangkap C=C dan fragmentasi atom H

didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 49$ memperlihatkan adanya substitusi rangkap C=C menjadi C≡C dan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 39$. Substitusi rangkap C=C menjadi C≡C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik menjadi $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C≡C alifatik, fragmentasi atom -C- bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 45$ memperlihatkan pembentukan rangkap C≡C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 42$. pembentukan C≡C didukung data IR pada bilangan gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C≡C alifatik.

Ion molekul (M^+) dengan $m/z= 42$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan pembentukan 3 ikatan hidrogen pada gugus -OH menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 35$. Sedangkan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan 1 atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 31$. Fragmentasi atom -C- dan H didukung data IR bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik, sedangkan pembentukan ikatan hidrogen didukung data titik didih (90°C).

Ion molekul (M^+) $m/z= 39$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan pembentukan rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 27$. fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik, pembentukan $C=C$ bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 27$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $C=C$ menjadi $C\equiv C$ dan fragmentasi 2 atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 24$. Substitusi gugus $C=C$ menjadi $C\equiv C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik menjadi $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $C\equiv C$ alifatik, fragmentasi atom H bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

5.5.3.7 Identifikasi senyawa Fenol (*Phenol*)

Spektra fragmen senyawa Fenol (*Phenol*) ($m/z= 94$) memperlihatkan adanya puncak ion (M^+) $m/z= 94$ dengan 3 ikatan hidrogen pada gugus $-OH$. Ion molekul (M^+) $m/z= 126$ memperlihatkan adanya fragmentasi 3 atom H ($m/z= 3$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 123$. Pembentukan ikatan hidrogen didukung data titik didih ($90^{\circ}C$).

Ion molekul (M^+) $m/z= 94$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) dan reduksi rangkap $C=C$ menghasilkan puncak

ion (M^+) $m/z= 80$. Sedangkan fragmentasi gugus $-CH-CH-CH$ ($m/z = 48$) dan reduksi rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 47$. Fragmentasi gugus $-OH$ dan $-CH-CH-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ aromatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik, reduksi rangkap $C=C$ bilangan gelombang $1454,4\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 80$ memperlihatkan adanya resonansi, pembentukan 1 rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H ($m/z = 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 77$. Peristiwa resonansi dan pembentukan rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-C=C-$ aromatik, fragmentasi atom H bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 77$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 74$ kemudian memperlihatkan reduksi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 66$. Kemudian memperlihatkan pembentukan siklik dan fragmentasi atom H ($m/z = 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 63$. Pembentukan $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-C=C-$ aromatik, reduksi atom $-C-$ dan fragmentasi atom H bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik dan alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 63$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 3 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 55$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion (M^+) $m/z= 55$ memperlihatkan pembentukan 3 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 50$. Pembentukan $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 50$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 39$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

5.5.3.8 Identifikasi Trans 1,2-Siklopentadiol (*1,2-Ciclopentenediol, trans*)

Spektra fragmen senyawa Trans 1,2-Siklopentadiol (*1,2-Ciclopentenediol, trans*) memperlihatkan adanya puncak ion (M^+) pada $m/z= 100$. Ion molekul (M^+) $m/z= 100$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) dan pembentukan rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 84$. Sedangkan fragmentasi gugus $-C-CH-CH-CH-$ ($m/z= 38$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) pada $m/z= 61$. Fragmentasi gugus $-OH$

didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik, pembentukan C=C bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik, fragmentasi gugus -C-CH-CH-CH- dan atom H bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) dengan $m/z = 84$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z = 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) pada $m/z = 81$. pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik dan fragmentasi atom H bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) dengan $m/z = 81$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z = 12$) dan reduksi rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z = 72$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z = 72$ memperlihatkan adanya resonansi, pembentukan siklik dan fragmentasi atom H ($m/z = 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z = 69$. Sedangkan fragmentasi gugus -OH ($m/z = 17$) pembentukan siklik dan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z = 51$. Peristiwa resonansi dan pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik

dan $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik, fragmentasi gugus -OH bilangan gelombang $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik, pembentukan siklik dan fragmentasi atom H bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 69$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi C=O ($m/z= 28$) dan pembentukan rangkap menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 66$. Substitusi gugus -OH menjadi C=O didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik menjadi $2364,55 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O .

Ion molekul (M^+) $m/z= 66$ memperlihatkan adanya substitusi gugus C=O ($m/z= 28$) menjadi -OH ($m/z= 17$) dan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 58$. Sedangkan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 55$. Substitusi gugus C=O menjadi -OH didukung data IR pada bilangan gelombang antara lain $2344,53 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O alifatik menjadi $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik, fragmentasi atom -C- bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 58$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH_2 ($m/z= 14$) dan pembentukan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) pada $m/z= 44$. Fragmentasi gugus -CH_2 didukung data

IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 55$ memperlihatkan adanya substitusi gugus C=O ($m/z= 28$) menjadi H_2O ($m/z= 18$) dan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) pada $m/z= 47$. Substitusi gugus C=O menjadi H_2O didukung data IR pada bilangan gelombang 2344,53 cm^{-1} spektra serapan gugus C=O alifatik menjadi 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik, fragmentasi atom -C- bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 44$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi -CH₂ ($m/z= 14$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 41$. Substitusi gugus -OH menjadi -CH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik menjadi 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik.

5.5.3.9 Identifikasi senyawa N-Asetil-4(H)-piridin (*4(H)-Pyridine, N-acetyl*)

Spektra fragmen senyawa N-Asetil-4(H)-piridin (*4(H)-Pyridine, N-acetyl*) ($m/z= 126$) memperlihatkan adanya puncak ion (M^+) $m/z= 126$ dengan 3 ikatan hidrogen pada gugus C=O. Ion molekul (M^+) $m/z= 126$ memperlihatkan adanya fragmentasi 3 atom H ($m/z= 3$) menghasilkan

puncak ion (M^+) $m/z= 123$. Pembentukan ikatan hidrogen didukung data titik didih (90^0C).

Ion molekul (M^+) $m/z= 123$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-NH$ ($m/z= 15$) dan pembentukan rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion (M^+) dengan $m/z= 119$, sedangkan fragmentasi gugus H_3C-CO ($m/z= 43$) dan pembentukan rangkap $C=N$ dan $C\equiv C$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 77$. Fragmentasi gugus $-NH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-NH$ aromatik, pembentukan $C=C$, $C=N$ dan $C\equiv C$ bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $C=C$ aromatik, $2364,55\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $C=N$ alifatik dan $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $C\equiv C$ alifatik, fragmentasi gugus H_3C-CO bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$ alifatik dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 119$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) dengan $m/z= 110$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 110$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 107$. Pembentukan siklik dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 107$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 104$. Pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 104$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 4 rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 99$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 99$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 93$. Pembentukan siklik dan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 93$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 86$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 83$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $-CH_3$ ($m/z= 15$) menjadi $-CH$ ($m/z= 13$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 80$. Substitusi gugus $-CH_3$ menjadi $-CH$ dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan

gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}_3$ menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 80$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $\text{C}=\text{O}$ ($m/z= 28$) menjadi $-\text{OH}$ ($m/z= 17$) dan fragmentasi gugus $-\text{CH}$ ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion (M^+) dengan $m/z= 73$. Sedangkan fragmentasi atom $-\text{O}-$ ($m/z= 16$), atom H ($m/z= 1$) serta pembentukan rangkap $\text{C}=\text{C}$ menghasilkan puncak ion (M^+) dengan $m/z= 63$. Substitusi gugus $\text{C}=\text{O}$ menjadi $-\text{OH}$ terlihat pada data IR dengan bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $\text{C}=\text{O}$ alifatik menjadi $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{OH}$ alifatik, fragmentasi gugus $-\text{CH}$ dan atom H bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik, fragmentasi atom $-\text{O}-$ bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $\text{C}=\text{O}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 73$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap $\text{C}=\text{C}$ menghasilkan puncak ion (M^+) dengan $m/z= 70$. Pembentukan $\text{C}=\text{C}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $\text{C}=\text{C}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 70$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap $\text{C}\equiv\text{C}$ ($m/z= 24$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 66$. Pembentukan $\text{C}\equiv\text{C}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $\text{C}\equiv\text{C}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 66$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z= 13$) dan reduksi rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 60$. Fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) dan pembentukan rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 50$. Fragmentasi gugus $-CH$ dan gugus $-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik, reduksi dan dan pembentukan $C=C$ bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 60$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 56$. Pembentukan siklik dan rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 56$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) menjadi $C=O$ ($m/z= 28$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 53$. Fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan substitusi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) menjadi H_2O ($m/z= 18$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 47$. Sedangkan fragmentasi gugus $-CH-OH$ ($m/z= 30$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 43$. Substitusi gugus $-OH$ menjadi gugus $C=O$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik menjadi $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$

alifatik, fragmentasi atom -C- dan fragmentasi atom H bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik, fragmentasi gugus -CH-OH bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik.

5.5.3.10 Identifikasi senyawa Metanolbenzena (*Benzenemethanol*)

Spektra fragmen senyawa Metanolbenzena (*Benzenemethanol*) memperlihatkan adanya puncak ion (M^+) $m/z= 108$ diperoleh dari puncak ion molekul (M^+) $m/z= 136$ terfragmentasi menjadi puncak ion molekul (M^+) $m/z= 119$ dan menjadi puncak ion molekul (M^+) $m/z= 111$. Ion molekul (M^+) $m/z= 136$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $\text{H}_3\text{C-O-}$ ($m/z= 31$) menjadi gugus $-\text{CH}_2$ ($m/z= 14$) dan fragmentasi atom H menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 119$. Adisi gugus $\text{H}_3\text{C-O-}$ menjadi gugus $-\text{CH}_2$ dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus O- CH_3 menjadi 1384,33 cm^{-1} spektra serapan gugus $-\text{CH}_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 119$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 111$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 111$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $-\text{C=O}$ ($m/z= 28$) menjadi gugus $-\text{OH}$ ($m/z= 17$) dan reduksi 3

rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 108$. Substitusi gugus $-C=O$ menjadi gugus $-OH$ reduksi 3 ikatan rangkap C=C terlihat pada data IR, terutama pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O alifatik menjadi $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 108$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) menjadi C=O ($m/z= 28$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 105$. Juga memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 91$. Substitusi gugus $-OH$ menjadi C=O didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik menjadi $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 105$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-O-$ keton ($m/z= 16$) dan atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 94$. Fragmentasi atom $-O-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 94$ memperlihatkan adanya substitusi gugus C=O ($m/z= 28$) menjadi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) dan fragmentasi gugus $-CH-CH$ ($m/z= 26$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 86$. Sedangkan fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 82$. Fragmentasi gugus $-CH-CH$ dan $-CH$ didukung data IR

pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 91$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ ($m/z= 14$), fragmentasi atom H ($m/z= 1$) dan pembentukan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 79$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH aromatik, pembentukan C=C bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 86$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}-\text{CH}-\text{CH}_3$ ($m/z= 41$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 46$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}-\text{CH}-\text{CH}_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik, 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik, dan 1384,33 cm^{-1} spektra serapan gugus $-\text{CH}_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 79$ memperlihatkan adanya pembentukan 3 rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 74$. Sedangkan fragmentasi atom $-\text{C}-$ ($m/z= 12$) dan menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 68$. pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik, fragmentasi atom $-\text{C}-$ bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=68$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=65$. Pembentukan siklik dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=65$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=62$. Fragmentasi gugus -CH ($m/z=13$) dan pembentukan rangkap C≡C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=51$. Sedangkan reduksi rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=54$. Pembentukan rangkap C=C dan C≡C didukung data IR pada bilangan gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C≡C alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik, fragmentasi gugus -CH bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=54$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=43$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=51$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) dan pembentukan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=39$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C≡C alifatik,

pembentukan C=C bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z = 39$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z = 36$. Pembentukan siklik dan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

5.5.3.11 Identifikasi senyawa 2-Metoksi-fenol (*Phenol, 2-methoxy*)

Spektra fragmen senyawa 2-Metoksi-fenol (*Phenol, 2-methoxy*) memperlihatkan adanya puncak ion (M^+) $m/z = 124$ diperoleh dari puncak ion molekul (M^+) $m/z = 281$ terfragmen menjadi puncak ion molekul (M^+) $m/z = 179$ menjadi puncak ion molekul (M^+) $m/z = 168$ dan kemudian menjadi puncak ion molekul (M^+) $m/z = 141$. Pembentukan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 281$ didukung data kandungan senyawa kimia maupun kelompok senyawa kimia ekstrak kombinasi DLB, DJB dan RK.

Ion molekul (M^+) $m/z = 281$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_2$ ($m/z = 116$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z = 179$. Fragmentasi gugus $-\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik, 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus $-\text{OH}$ alifatik, 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus $\text{O}-\text{CH}_3$ dan 1015,20 cm^{-1} spektra serapan gugus $\text{C}-\text{O}-\text{C}$ (eter).

Ion molekul (M^+) $m/z= 179$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 168$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 168$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH-CH_3$ ($m/z= 28$) dan reduksi rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 141$. Fragmentasi gugus $-CH-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$, reduksi $C=C$ bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-C=C-$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 141$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) dan pembentukan rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 124$. fragmentasi gugus $-CH_2$ dan pembentukan $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-C=C-$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 124$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 124$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 109$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-O-$ ($m/z= 16$), atom H ($m/z= 1$) dan pembentukan rangkap $C=C$

menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=96$. Fragmentasi atom $-O-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$ alifatik, fragmentasi atom H dan pembentukan rangkap $C=C$ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-C=C-$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=96$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $-OH$ ($m/z=17$) menjadi $C=O$ ($m/z=28$) dan fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=81$. Substitusi gugus $-OH$ menjadi $C=O$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik menjadi $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$ alifatik, fragmentasi gugus $-CH_2$ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=81$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $C=O$ ($m/z=28$) menjadi gugus $-OH$ ($m/z=17$), fragmentasi gugus $-CH_2$ dan fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z=74$. Substitusi gugus $C=O$ menjadi gugus $-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$ alifatik menjadi $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik, fragmentasi gugus $-CH_2$ dan atom H bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=74$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $-OH$ ($m/z=17$) menjadi gugus $C=O$ ($m/z=28$), pembentukan siklik dan 2

rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 65$. Substitusi gugus –OH menjadi gugus C=O didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus –OH alifatik menjadi 2344,53 cm^{-1} spektra serapan gugus C=O alifatik, pembentukan siklik dan rangkap C=C bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan -C=C- alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 65$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus –CH ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 53$. Fragmentasi gugus –CH didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 53$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus C=O ($m/z= 28$) dan reduksi rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 43$. Fragmentasi gugus C=O didukung data IR pada bilangan gelombang 2344,53 cm^{-1} spektra serapan gugus C=O alifatik dan reduksi rangkap C=C bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan -C=C- alifatik.

5.5.3.12 Identifikasi senyawa Asam monometil ester, butanadioat (*Butanedioic acid, monomethyl ester*)

Spektra fragmen senyawa Asam monometil ester, butanadioat (*Butanedioic acid, monomethyl ester*) ($m/z= 133$) memperlihatkan adanya puncak ion (M^+) $m/z=133$ dengan 1 ikatan hidrogen pada gugus C=O. Pembentukan ikatan hidrogen didukung data titik didih (90⁰C). Ion molekul (M^+) $m/z= 133$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus CH₄ ($m/z= 16$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 118$, sedangkan substitusi

gugus -O-CH₃ ($m/z= 31$) menjadi -CH-CH₂ ($m/z= 27$) dan fragmentasi 1 atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M⁺) $m/z= 128$. Fragmentasi gugus -CH₃ didukung data IR pada bilangan gelombang 1384,33 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH₃, substitusi gugus -O-CH₃ menjadi -CH-CH₂ bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus O-CH₃, 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 118$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus C=O ($m/z= 28$) menghasilkan puncak ion (M⁺) $m/z= 104$, substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi gugus -CH₃ ($m/z= 15$) dan pembentukan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M⁺) $m/z= 114$, fragmentasi gugus -OH ($m/z= 17$) menghasilkan puncak ion (M⁺) $m/z= 101$. Hal ini didukung data IR pada bilangan gelombang berturut-turut 2344,53 cm⁻¹ spektra serapan gugus C=O alifatik, 3419,5 cm⁻¹ spektra serapan gugus -OH alifatik menjadi 1384,33 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH₃, 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik dan 3419,5 cm⁻¹ spektra serapan gugus -OH alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 114$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus C=O ($m/z= 28$), pembentukan siklik dan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M⁺) $m/z= 107$. Fragmentasi gugus C=O didukung data IR pada bilangan gelombang 2344,53 cm⁻¹ spektra serapan

gugus C=O alifatik, pembentukan siklik dan C=C bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 107$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$), reduksi rangkap dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 97$. Fragmentasi gugus -CH dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 97$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 94$. Pembentukan C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik dan 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 94$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi -CH₂ ($m/z= 14$), fragmentasi gugus -OH ($m/z= 17$), fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) dan substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi C=O ($m/z= 28$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 91$, 87 dan 83.

Ion molekul (M^+) $m/z= 87$ memperlihatkan adanya fragmentasi -CH₂ ($m/z= 14$), menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 69$. Fragmentasi -CH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 77$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus C=C ($m/z= 25$), fragmentasi atom H ($m/z= 1$) dan substitusi gugus C=O menjadi -OH menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 59$. Sedangkan fragmentasi gugus C=O ($m/z= 28$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 63$. Fragmentasi gugus C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O alifatik dan $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik, substitusi gugus C=O menjadi -OH bilangan gelombang $2344,53 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O alifatik menjadi $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 69$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -C=O ($m/z= 28$), fragmentasi 2 atom -O- ($m/z= 16$) dan pembentukan siklik, serta fragmentasi gugus -CH-CO- ($m/z= 41$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 45, 39$ dan 32 . Fragmentasi gugus -C=O dan fragmentasi atom -O- didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O alifatik, pembentukan siklik bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik, fragmentasi gugus -CH-CO- bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $2344,53 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 63$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) dan atom H ($m/z= 1$), fragmentasi gugus -CH₂

($m/z = 14$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z = 55$ dan 51 . Hal ini didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z = 45$ memperlihatkan adanya fragmentasi 2 atom H ($m/z = 1$), substitusi gugus -OH ($m/z = 17$) menjadi C=O ($m/z = 28$) dan pembentukan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z = 42$. Substitusi gugus -OH menjadi C=O didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik menjadi $2344,53 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O alifatik, fragmentasi atom H bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik, pembentukan rangkap C=C bilangan gelombang $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z = 39$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z = 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z = 36$. Pembentukan C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z = 36$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z = 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z = 26$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 32$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $-OH$ menjadi $C=O$ menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 29$. Substitusi gugus $-OH$ menjadi $C=O$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik menjadi $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 29$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 18$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 26$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 15$ dan ion molekul (M^+) $m/z= 15$ memperlihatkan adanya fragmentasi 3 atom H ($m/z= 1$). Fragmentasi atom $-C-$ dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

5.5.3.13 Identifikasi senyawa 2,3-Dihidro-3,5-dihidroksi-6-metil-4H-4-piranon (4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl)

senyawa 2,3-Dihidro-3,5-dihidroksi-6-metil-4H-4-piranon (*4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl*) memperlihatkan adanya puncak ion (M^+) $m/z= 144$. Ion molekul (M^+) $m/z= 144$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) dan reduksi rangkap menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 134$ sedangkan fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) dan pembentukan rangkap $C=C$

menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 126$. Fragmentasi gugus $-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ aromatik, reduksi dan pembentukan $C=C$ bilangan gelombang $C=C$ $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-C=C-$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 134$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 119$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ sesuai data IR dengan bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 126$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $C=O$ ($m/z= 28$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 97$. Fragmentasi gugus $C=O$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 119$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom H ($m/z= 1$), pembentukan rangkap $C=C$ dan siklik menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 115$. Fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik, pembentukan $C=C$ dan siklik bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-C=C-$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 115$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 105$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang

2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 105$ memperlihatkan adanya adisi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi C=O ($m/z= 28$) dan reduksi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 101$. Hal ini didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik menjadi 2344,53 cm^{-1} spektra serapan gugus C=O alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 97$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -OH ($m/z= 17$), fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan substitusi gugus gugus -CH₃ ($m/z= 15$) menjadi -CH ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 69$. Fragmentasi gugus -OH, fragmentasi atom -C- dan substitusi gugus gugus -CH₃ menjadi -CH didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik, 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik, 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik, 1384,33 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH₃.

Ion molekul (M^+) $m/z= 87$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi atom -C- ($m/z= 12$) pembentukan siklik dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 83$. Substitusi gugus -OH menjadi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik menjadi 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik, pembentukan siklik dan

fragmentasi atom H bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 83$ memperlihatkan adanya pertukaran posisi gugus -OH ($m/z= 17$) dengan C=O ($m/z= 28$) dan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 73$. Pertukaran posisi gugus -OH dengan C=O didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik menjadi 2344,53 cm^{-1} spektra serapan gugus C=O alifatik, fragmentasi atom -C- bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 69$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 58$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 58$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap C \equiv C ($m/z= 24$) dan reduksi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 55$. Pembentukan ikatan rangkap C \equiv C didukung data IR pada bilangan gelombang 2078,41 cm^{-1} spektra serapan C \equiv C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 55$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 46$.

Fragmentasi atom –C- didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z = 46$ memperlihatkan adanya fragmentasi 2 atom H ($m/z = 1$) dan siklisasi menghasilkan puncak ion (M⁺) $m/z = 43$. Fragmentasi atom H dan siklisasi didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z = 43$ memperlihatkan adanya substitusi atom –O- ($m/z = 16$) menjadi –CH ($m/z = 13$) dan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M⁺) $m/z = 39$. Substitusi atom –O- menjadi –CH didukung data IR pada bilangan gelombang 1015,20 cm⁻¹ spektra serapan ulur C-O-C (eter) menjadi 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z = 39$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M⁺) $m/z = 36$. Pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik.

5.5.3.14 Identifikasi senyawa Asam benzoat (*Benzoic acid*)

Spektra fragmen senyawa Asam benzoat (*Benzoic acid*) ($m/z = 122$) memperlihatkan fragmentasi gugus –OH ($m/z = 17$) menghasilkan puncak ion (M⁺) $m/z = 105$. Hal ini didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm⁻¹ spektra serapan gugus –OH alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z = 105$ memperlihatkan fragmentasi atom –C- ($m/z = 12$) menghasilkan puncak ion (M⁺) $m/z = 94$. Fragmentasi atom –

C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 105$ juga memperlihatkan substitusi gugus C=O ($m/z= 28$) menjadi -OH ($m/z= 17$) dan fragmentasi gugus -CH-CH-CH ($m/z= 39$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 73$. Hal ini sesuai data IR pada bilangan gelombang $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik, $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik, dan $2344,53 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 94$ memperlihatkan fragmentasi gugus -CH₃ ($m/z= 15$), reduksi atom H ($m/z= 1$) dan ikatan C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 77$. Fragmentasi gugus -CH₃ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH₃.

Ion molekul (M^+) $m/z= 73$ memperlihatkan fragmentasi gugus -CH₂-CH₂ ($m/z= 28$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 45$. Fragmentasi gugus -CH₂-CH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 65$ memperlihatkan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 58$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada

bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 58$ memperlihatkan pembentukan siklik dan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 51$. Pembentukan siklik dan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 45$ memperlihatkan fragmentasi gugus -CH-CH₂ ($m/z= 27$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 18$. Fragmentasi gugus -CH-CH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 51$ dan 39 memperlihatkan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 39$ dan 28. Fragmentasi atom -C- dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 28$ memperlihatkan fragmentasi gugus -CH₂ ($m/z= 14$) dan fragmentasi 2 atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 12$. Fragmentasi gugus -CH₂ dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik.

5.5.3.15 Identifikasi senyawa 1-Isopropil-4-metil-1,4-sikloheksadiena (*1-Isopropyl-4-methyl-cyclohexa-1,4-diene*)

Spektra fragmen senyawa 1-Isopropil-4-metil-1,4-sikloheksadiena (*1-isopropyl-4-methyl-cyclohexa-1,4-diene*) ($m/z= 136$) memperlihatkan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap C=C

menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 128$. Hal ini sesuai data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 128$ memperlihatkan pembentukan 3 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 121$. Pembentukan C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 121$ memperlihatkan pembentukan aromatik, pembentukan 2 rangkap C=C serta fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 115$. Pembentukan aromatik, C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 115$ memperlihatkan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$), fragmentasi atom H ($m/z= 1$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 109$. Fragmentasi atom -C-, fragmentasi atom H dan reduksi rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 109$ memperlihatkan fragmentasi 3 atom H ($m/z= 1$) dan pembentukan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 105$. Ion molekul (M^+) $m/z= 105$ juga memperlihatkan hal yang

sama untuk menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 101, 93, 89, 85, 81, 77$ dst.. sampai pada ion (M^+) $m/z= 39$. Fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik, pembentukan rangkap C=C bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

5.5.3.16 Identifikasi senyawa 1,2-Benzenadiol (*1,2-Benzenediol*)

Spektra fragmen senyawa 1,2-Benzenadiol (*1,2-Benzenediol*) ($m/z= 110$) memperlihatkan substitusi 2 gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi 2 gugus C=O ($m/z= 28$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 105$. Substitusi gugus -OH menjadi gugus C=O didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH aromatik menjadi $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=O aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 110$ juga memperlihatkan fragmentasi gugus -OH ($m/z= 17$) dan pembentukan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 92$. Pembentukan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=105$ memperlihatkan substitusi gugus C=O ($m/z= 28$) menjadi gugus -OH ($m/z= 17$), fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 3 rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 101$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 101$ memperlihatkan fragmentasi 3 atom H ($m/z= 1$) dan pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 96$. Fragmentasi atom H dan pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 96$ memperlihatkan fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) dan pemutusan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 87$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 92$ memperlihatkan fragmentasi gugus -OH ($m/z= 17$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 77$. Fragmentasi gugus -OH didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 87$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik, fragmentasi atom H ($m/z= 1$) dan pembentukan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 81$. Pembentukan siklik, fragmentasi atom H dan pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 81$ memperlihatkan fragmentasi gugus C=C ($m/z= 24$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 59$. Fragmentasi

gugus C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 77$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap C=C, fragmentasi 2 atom H ($m/z= 1$) dan siklisasi menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 73$. Pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 1454,34 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C aromatik, fragmentasi atom H dan siklisasi bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 73$ memperlihatkan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$), fragmentasi atom H ($m/z= 1$) dan reduksi 4 ikatan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 69$. Fragmentasi atom -C-, atom H dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 69$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap C=C, fragmentasi 2 atom H ($m/z= 1$) dan siklisasi menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 64$. Pembentukan C=C, fragmentasi atom H dan siklisasi didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 64$ dan 53 memperlihatkan fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) dan siklisasi menghasilkan masing-masing puncak

ion (M^+) $m/z= 53$ dan 39 . Fragmentasi gugus $-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 59$ memperlihatkan fragmentasi atom $-O-$ ($m/z= 16$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 46$. Fragmentasi atom $-O-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 46$ memperlihatkan fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) dan $-CH-CH_3$ ($m/z= 25$) menghasilkan masing-masing puncak ion (M^+) $m/z= 32$ dan 18 . Fragmentasi gugus $-CH_2$ dan $-CH-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus dan ulur $-CH$ alifatik serta $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 39$ memperlihatkan fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan $-CCH$ ($m/z= 25$) menghasilkan masing-masing puncak ion (M^+) $m/z= 27$ dan 14 . Fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan $-CCH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus dan ulur $-CH$ alifatik.

5.5.3.17 Identifikasi senyawa 2,3-Dihidro-benzofuran (2,3-Dihydro-benzofuran)

Spektra fragmen senyawa 2,3-Dihidro-benzofuran (*2,3-Dihydro-benzofuran*) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) ($m/z= 123$) dengan 3 ikatan hidrogen pada atom O eter. Ion molekul (M^+) $m/z=$

123 memperlihatkan adanya fragmentasi 3 atom H ($m/z= 3$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 120$. Pembentukan ikatan hidrogen didukung data titik didih (90^0C).

Ion molekul (M^+) $m/z= 120$ memperlihatkan fragmentasi gugus -O- eter ($m/z= 16$) dan atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 105$. Sedangkan fragmentasi gugus -CH-CH-CH-CH ($m/z= 65$) dan substitusi atom -O- ($m/z= 16$) menjadi -OH ($m/z= 17$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 59$. Fragmentasi atom -O- didukung data IR pada bilangan gelombang $1015,20\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C-O-C (eter), fragmentasi gugus -CH-CH-CH-CH bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH aromatik, fragmentasi atom H bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH aromatik, substitusi atom -O- menjadi -OH bilangan gelombang $1015,20\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C-O-C (eter) menjadi $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 105$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap -C \equiv C ($m/z= 25$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 102$. Pembentukan -C \equiv C didukung data IR pada bilangan gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C \equiv C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 102$ memperlihatkan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 94$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi rangkap C=C ini sesuai data

IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 94, 91$ dan 81 memperlihatkan adanya fragmentasi atom H ($m/z= 1$) dan pembentukan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 91, 81$ dan 74 . Fragmentasi atom H dan pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 74$ memperlihatkan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 65$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 65$ memperlihatkan pembentukan siklik dan rangkap C=C menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 62$. Pembentukan siklik dan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 62$ dan 51 memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan atom H ($m/z= 1$). Sedangkan ion molekul (M^+) $m/z= 55$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) dan reduksi ikatan rangkap C=C. Fragmentasi gugus -CH, atom H dan atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang

2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik, sedangkan reduksi C=C bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

5.5.3.18 Identifikasi senyawa Asam benzenasetat (*Benzeneacetic acid*)

Spektra fragmen senyawa Asam benzenasetat (*Benzeneacetic acid*) ($m/z= 139$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 139$ dengan 3 ikatan hidrogen pada gugus C=O. Ion molekul (M^+) $m/z= 139$ memperlihatkan adanya fragmentasi 3 atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 136$. Pembentukan ikatan hidrogen didukung data titik didih (90°C).

Ion molekul (M^+) $m/z= 136$ memperlihatkan fragmentasi gugus -COOH ($m/z= 45$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 91$. Fragmentasi gugus -COOH didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik dan 2344,53 cm^{-1} spektra serapan gugus C=O alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 131$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -OH ($m/z= 17$) dan reduksi rangkap C=C ($m/z= 24$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 118$. Sedangkan fragmentasi gugus $(-C)_6$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 59$. Fragmentasi gugus -OH didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik, fragmentasi gugus $(-C)_6$ dan reduksi C=C bilangan gelombang 1454,34 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 118$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2-COH$ ($m/z= 43$), reduksi 1 rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 77$. Fragmentasi gugus $-CH_2-COH$ dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$ alifatik, reduksi $C=C$ bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 77$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 70$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 70$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik, 1 rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 65$. Pembentukan siklik dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik, pembentukan $C=C$ bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 65$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 62$.

Pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 62$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-\text{C}-$ ($m/z= 12$), reduksi 1 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 51$. Fragmentasi atom $-\text{C}-$, fragmentasi atom H dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 51$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-\text{C}-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 44$. Fragmentasi atom $-\text{C}-$ dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

5.5.3.19 Identifikasi senyawa 1,4-Benzenadiol (*1,4-Benzenediol*)

Spektra fragmen senyawa 1,4-Benzenadiol (*1,4-Benzenediol*) ($m/z= 110$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 110$. Ion molekul (M^+) $m/z= 110$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{OH}$ ($m/z= 17$), fragmentasi atom $-\text{C}-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 81$. Fragmentasi gugus $-\text{OH}$ didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus $-\text{OH}$ aromatik, fragmentasi atom $-\text{C}-$ dan reduksi C=C bilangan gelombang 1454,34 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C aromatik dan 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus $-\text{CH}$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 81$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 1 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 69$. Sedangkan fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) dan pembentukan 1 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 63$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi atau pembentukan $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik, fragmentasi gugus $-OH$ bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 63$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 53$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

5.5.3.20 Identifikasi senyawa 2-Metoksi-4-vinil-fenol (*2-Methoxy-4-vinylphenol*)

Spektra fragmen senyawa 2-Metoksi-4-vinil-fenol (*2-Methoxy-4-vinylphenol*) ($m/z= 153$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 153$ dengan 3 ikatan hidrogen terbentuk pada gugus $-OH$. Ion molekul (M^+) $m/z= 153$ memperlihatkan adanya fragmentasi 3 atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z= 150$. Pembentukan ikatan hidrogen didukung data titik didih (90^0C).

Ion molekul (M^+) $m/z= 150$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 138$. Fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z= 17$), reduksi 1 rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 135$. Sedangkan fragmentasi gugus $-CH-CCCC-$ ($m/z= 61$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) dengan $m/z= 89$. Fragmentasi atom $-C-$, atom H , reduksi $C=C$ dan fragmentasi gugus $-CH-CCCC-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik, fragmentasi gugus $-OH$ bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 138$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CCH-CH_3$ ($m/z= 40$) dan reduksi 2 rangkap $C=C$ ($m/z= 24$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) dengan $m/z= 103$. Fragmentasi gugus $-CCH-CH_3$ dan reduksi $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik, $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 135$, 121 dan 77 memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 121$, 107 dan 66 . Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 107$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$), substitusi gugus $-O-CH_3$ ($m/z= 31$) menjadi $-OH$ ($m/z= 17$) dan pembentukan 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 80$. Sedangkan fragmentasi gugus $-O-CH_3$ ($m/z= 31$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 77$. Fragmentasi atom $-C-$ dan pembentukan $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik, substitusi gugus $-O-CH_3$ menjadi $-OH$ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $O-CH_3$ menjadi $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik, fragmentasi gugus $-O-CH_3$ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $O-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 80$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 3 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 74$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 74$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CHCH_2-CH_3$ ($m/z=42$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) dengan $m/z= 32$. Fragmentasi gugus $-CCH-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 66$ memperlihatkan adanya pembentukan 1 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 63$. Pembentukan C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 63$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 55$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 55$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 51$. Pembentukan siklik dan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 51$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 44$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 44$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik, 1 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 39$. Pembentukan siklik, rangkap C=C

dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 32$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi C=O ($m/z= 28$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) dengan $m/z= 29$. Substitusi gugus -OH menjadi C=O didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik menjadi 2344,53 cm^{-1} spektra serapan gugus C=O alifatik, fragmentasi atom H bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik.

5.5.3.21 Identifikasi senyawa 1-metil-4-(1-etil-metil)-1,2-Sikloheksanadiol (1,2-Cyclohexanediol, 1-methyl-4-(1-methylethyl))

Spektra fragmen senyawa 1-metil-4-(1-etil-metil)-1,2-Sikloheksanadiol (*1,2-Cyclohexanediol, 1-methyl-4-(1-methylethyl)*) ($m/z= 172$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 172$. Ion molekul (M^+) $m/z= 172$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -CH₃ ($m/z= 15$) menjadi -CH₂ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 170$. Substitusi gugus -CH₃ menjadi -CH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang 1384,33 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH₃ dan 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus dan ulur -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 170$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₂ ($m/z= 14$) dan pembentukan 3 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 152$. Fragmentasi gugus -CH₂ dan

pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 152$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$), reduksi 3 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 141$. Sedangkan fragmentasi gugus -OH ($m/z= 17$), -CH₃ ($m/z= 15$), pembentukan 1 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 119$. Fragmentasi atom -C- dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik, reduksi dan pembentukan C=C bilangan gelombang 1454,34 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C aromatik, fragmentasi gugus -OH bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH aromatik, dan fragmentasi gugus -CH₃ bilangan gelombang 1384,33 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH₃.

Ion molekul (M^+) $m/z= 141$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 137$. Pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 137$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 126$.

Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 119$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 112$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 112$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 108$. Fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z= 13$), reduksi 2 rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 101$. Sedangkan substitusi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) menjadi $C=O$ ($m/z= 28$), fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z= 13$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 97$. Pembentukan dan reduksi $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik, fragmentasi gugus $-CH$ dan atom H bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik, substitusi gugus $-OH$ menjadi $C=O$ bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik menjadi $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 97$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 1 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=$

93. Pembentukan siklik dan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 93$ memperlihatkan adanya substitusi gugus C=O ($m/z= 28$) menjadi -OH ($m/z= 17$) dan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 88$. Substitusi gugus C=O menjadi -OH didukung data IR pada bilangan gelombang 2344,53 cm^{-1} spektra serapan gugus C=O alifatik menjadi 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik, fragmentasi atom -C- bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 88$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi C=O ($m/z= 28$), fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) dengan $m/z= 82$. Substitusi gugus -OH menjadi C=O didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik menjadi 2344,53 cm^{-1} spektra serapan gugus C=O alifatik, fragmentasi atom -C- dan pembentukan C=C bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 82$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 77$. Pembentukan C=C dan fragmentasi atom H

didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 77$ memperlihatkan adanya substitusi gugus C=O ($m/z= 28$) menjadi -OH ($m/z= 17$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 71$. Substitusi gugus C=O menjadi -OH didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O alifatik menjadi $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik, reduksi C=C bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 71$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan pembentukan 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 67$. Pembentukan siklik dan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 67$ memperlihatkan 5x fragmentasi antara lain fragmentasi gugus -CC-O- (alkohol) ($m/z= 40$), fragmentasi gugus -CCC- ($m/z= 36$), fragmentasi gugus -C-O- (alkohol) ($m/z= 28$), fragmentasi gugus -C-OH ($m/z= 29$), dan gugus -CC- ($m/z= 24$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) dengan $m/z= 27, 31, 39, 43$ dan 47. Fragmentasi gugus -CC-O- didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik dan $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik, fragmentasi gugus -C-O- dan -C-

OH bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik, fragmentasi gugus -CCC- dan -CC- bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 63$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 58$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 58$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik, 1 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 53$. Pembentukan siklik, fragmentasi atom H dan pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

5.5.3.22 Identifikasi senyawa 2,6-Dimetoksi-fenol (*Phenol, 2,6-dimethoxy*)

Spektra fragmen senyawa 2,6-Dimetoksi-fenol (*Phenol, 2,6-dimethoxy*) ($m/z= 154$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 154$. Ion molekul (M^+) $m/z= 154$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -OH ($m/z= 17$), reduksi C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 139$. Sedangkan pembentukan 2 rangkap C=C ($m/z= 24$), fragmentasi gugus -O-CH₃ ($m/z= 21$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) dengan $m/z= 120$.

Fragmentasi gugus -OH dan -O-CH_3 didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH aromatik dan $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -O-CH_3 , fragmentasi atom H dan pembentukan C=C bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1454,34 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 139$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 135$. Pembentukan 2 rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1454,34 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 135$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 125$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH aromatik dan $1454,34 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 120$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -OH ($m/z= 17$), reduksi 2 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 107$. Fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 111$. Fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan gugus -O-CH_3 ($m/z=31$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 79$. Fragmentasi gugus -C_4 ($m/z= 48$), reduksi 1 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 75$. Fragmentasi gugus -

OH ($m/z= 17$), gugus $-O-CH_3$ ($m/z=31$) dan reduksi 1 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 65$. Fragmentasi gugus $-OH$ dan gugus $-O-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ aromatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $O-CH_3$, fragmentasi atom $-C-$, atom H, pembentukan atau reduksi $C=C$ dan fragmentasi gugus $-C_4$ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 107$ dan 39 memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 97$ dan 29 . Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 97, 65, 55$ dan 43 memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 1 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 93, 61, 51$ dan 39 . Pembentukan siklik dan $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 93$ dan 83 memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 83$ dan 71 . Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan

gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 61$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 55$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 51$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 43$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 29$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap C≡C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 25$. Pembentukan C≡C didukung data IR pada bilangan gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C≡C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 25$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 51$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik.

5.5.3.23 Identifikasi senyawa 3-Metoksi-4-hidroksi-benzaldehid (Benzaldehyde, 4-hydroxy-3-methoxy)

Spektra fragmen senyawa 3-Metoksi-4-hidroksi-benzaldehid (*Benzaldehyde, 4-hydroxy-3-methoxy*) ($m/z = 152$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z = 152$. Ion molekul (M^+) dengan $m/z = 152$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z = 17$), substitusi gugus $-O-CH_3$ ($m/z = 21$) menjadi $C=O$ ($m/z = 28$), resonansi dan fragmentasi atom H ($m/z = 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 137$. Fragmentasi gugus $-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ aromatik, substitusi gugus $-O-CH_3$ menjadi $C=O$ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $O-CH_3$ menjadi $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $C=O$ aromatik, sedangkan resonansi dan fragmentasi atom H pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik, $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) dengan $m/z = 152$ juga memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CCH-CHO-CH_3-O-$ ($m/z = 87$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 65$. Fragmentasi gugus $-CCH-CHO-CH_3-O-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $O-CH_3$, $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik, $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $C=O$ alifatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) dengan $m/z = 137$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z = 12$) dan pembentukan siklik menghasilkan

puncak ion molekul (M^+) $m/z= 123$. Sedangkan fragmentasi gugus C=O ($m/z= 28$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 109$. Fragmentasi atom -C- dan pembentukan siklik didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik, fragmentasi gugus C=O bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=O alifatik.

Ion molekul (M^+) dengan $m/z= 93$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan substitusi gugus -O-CH₃ ($m/z= 21$) menjadi CH₂-CH₃ ($m/z= 29$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 81$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik, substitusi gugus -O-CH₃ menjadi CH₂-CH₃ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus O-CH₃ menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH₃.

Ion molekul (M^+) $m/z= 65$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -O- alkohol ($m/z= 16$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 51$. Sedangkan fragmentasi gugus -CC- ($m/z= 24$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) dengan $m/z= 45$. Fragmentasi atom -O- didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik, sedangkan fragmentasi

gugus -CC- dan reduksi C=C bilangan gelombang $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 51$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$), pembentukan siklik dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) dengan $m/z= 39$. Fragmentasi atom -C- , pembentukan siklik dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 39$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) dengan $m/z= 39$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

5.5.3.24 Identifikasi senyawa Asam,- metil-ester-3-metoksi-4-hidroksi-benzenasetat (*Benzeneacetic acid, 4-hydroxy-3-methoxy-, methyl ester*)

Spektra fragmen senyawa Asam,- metil-ester-3-metoksi-4-hidroksi-benzenasetat,- (*Benzeneacetic acid, 4-hydroxy-3-methoxy-, methyl ester*) ($m/z= 196$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 196$. Ion molekul (M^+) $m/z= 196$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -O-CH_3 ($m/z= 21$) menjadi -OH ($m/z= 17$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 182$. Fragmentasi gugus $\text{-O-CH}_3\text{-O-}$ ($m/z= 47$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 151$. fragmentasi gugus $\text{-CO-CH}_3\text{-O-}$ ($m/z= 56$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+)

$m/z=137$. Fragmentasi gugus $-\text{CHCO}-\text{CH}_3-\text{O}-$ ($m/z=72$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=122$. Substitusi gugus $-\text{O}-\text{CH}_3$ ($m/z=21$) menjadi $-\text{C}-\text{CH}_2$ ($m/z=26$), fragmentasi gugus $-\text{CO}-\text{CCH}-\text{O}-\text{CH}_3$ ($m/z=84$) dan fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=107$. Substitusi gugus $-\text{O}-\text{CH}_3$ menjadi $-\text{OH}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $\text{O}-\text{CH}_3$ menjadi $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{OH}$ aromatik, substitusi gugus $-\text{O}-\text{CH}_3$ menjadi $-\text{C}-\text{CH}_2$ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $\text{O}-\text{CH}_3$ menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-\text{CH}$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $\text{C}=\text{C}$ alifatik, fragmentasi gugus $-\text{CHCO}-\text{CH}_3-\text{O}-$ dan $-\text{CO}-\text{CCH}-\text{O}-\text{CH}_3$ bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $\text{C}=\text{O}$ alifatik, $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $\text{C}=\text{C}$ aromatik, $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-\text{CH}$ aromatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $\text{O}-\text{CH}_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z=137$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CCH}_2-\text{CC}-$ ($m/z=50$) dan reduksi rangkap $\text{C}=\text{C}$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=89$. Fragmentasi gugus $-\text{CCH}_2-\text{CC}-$ dan reduksi $\text{C}=\text{C}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-\text{CH}$ aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $\text{C}=\text{C}$ aromatik.

Ion molekul (M^+) dengan $m/z=122$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}-\text{CH}_3$ ($m/z=28$) menghasilkan puncak ion

molekul (M^+) $m/z= 94$. Fragmentasi gugus $-CH-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) dengan $m/z= 94$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 77$. Fragmentasi gugus $-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ aromatik dan fragmentasi atom H bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 89$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH-OH$ ($m/z= 30$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 59$. Fragmentasi gugus $-CH-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 77$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 65$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 65$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 51$.

Fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-\text{CH}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 51$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-\text{C}-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap $\text{C}=\text{C}$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 44$. Fragmentasi atom $-\text{C}-$ dan reduksi $\text{C}=\text{C}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-\text{CH}$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $\text{C}=\text{C}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 44$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 1 rangkap $\text{C}=\text{C}$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 39$. Pembentukan siklik dan $\text{C}=\text{C}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-\text{CH}$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $\text{C}=\text{C}$ alifatik.

5.5.3.25 Identifikasi senyawa 4-(3-Metoksi-fenil-4-hidroksi)-2-butanon (2-Butanone, 4-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl))

Spektra fragmen senyawa 4-(3-Metoksi-fenil-4-hidroksi)-2-butanon (2-Butanone, 4-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)) ($m/z= 194$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 194$. Ion molekul (M^+) $m/z= 194$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}_3$ ($m/z= 15$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 179$. Sedangkan fragmentasi gugus $-\text{OH}$ ($m/z= 17$), fragmentasi gugus $\text{CH}_3\text{-O-}$ ($m/z= 31$), fragmentasi atom $-\text{C}-$ ($m/z= 12$), dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 133$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}_3$ didukung data IR pada bilangan

gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}_3$, fragmentasi gugus $-\text{OH}$ bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{OH}$ aromatik, fragmentasi gugus $\text{CH}_3\text{-O-}$ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus O-CH_3 , fragmentasi atom $-\text{C-}$ dan fragmentasi atom H bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 179$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-\text{O-}$ ($m/z= 16$) dan pembentukan rangkap $\text{C}\equiv\text{C}$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 161$. Fragmentasi atom $-\text{O-}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=O alifatik dan pembentukan rangkap $\text{C}\equiv\text{C}$ bilangan gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $\text{C}\equiv\text{C}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 151$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $-\text{CH}_2\text{-CH}_2$ ($m/z= 28$) menjadi $\text{C}\equiv\text{C}$ ($m/z= 24$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 147$. Substitusi gugus $-\text{CH}_2\text{-CH}_2$ menjadi $\text{C}\equiv\text{C}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik menjadi $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $\text{C}\equiv\text{C}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 147$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-\text{C-}$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 137$. Fragmentasi atom $-\text{C-}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $\text{C}\equiv\text{C}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 133$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 124$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 124$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik, 1 rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 119$. Pembentukan siklik, rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 119$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 115$. Pembentukan $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 115$ dan 103 memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 1 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 107$ dan 95 . fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 107$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 103$. Pembentukan siklik dan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 103$ dan 81 memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 91$ dan 77 . Pembentukan siklik dan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 91$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 81$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 77$ dan 65 memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 69$ dan 55 . Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 69$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 65$. Pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 55$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan rangkap C \equiv C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 51$. Pembentukan siklik dan C \equiv C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik dan 2078,41 cm^{-1} spektra serapan C \equiv C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 51$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 43$. Sedangkan fragmentasi atom -O- keton ($m/z= 16$), substitusi ulur C \equiv C menjadi ulur C=C dan dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 39$. Fragmentasi atom -C- dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik, fragmentasi atom -O- bilangan gelombang 2344,53 cm^{-1} spektra serapan C=O alifatik, substitusi ulur C \equiv C menjadi ulur C=C bilangan gelombang 2078,41 cm^{-1} spektra serapan C \equiv C alifatik menjadi 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

5.5.3.26 Identifikasi senyawa 1-Metil-4-(2-metiloksiranil)-7-oksabisiklo [4.1.0] heptana (7-Oxabicyclo [4.1.0] heptane, 1-methyl-4-(2-methyloxiranyl)

Spektra fragmen senyawa 1-Metil-4-(2-metiloksiranil)-7-oksabisiklo [4.1.0] heptana (7-Oxabicyclo [4.1.0] heptane, 1-methyl-4-(2-methyloxiranyl) ($m/z = 168$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z = 168$. Ion molekul (M^+) $m/z = 168$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z = 15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 153$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z = 153$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $HC-O-$ (eter) ($m/z = 29$) menjadi $-OH$ ($m/z = 17$), fragmentasi atom H ($m/z = 1$) dan pembentukan 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 137$. Substitusi gugus $HC-O-$ (eter) menjadi $-OH$ dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1015,20\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C-O-C$ (eter) menjadi $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik, pembentukan $C=C$ pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z = 137$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $C=O$ ($m/z = 28$) menjadi $-OH$ ($m/z = 17$), substitusi rangkap $C=C$ menjadi $C\equiv C$ dan pembentukan 1 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 132$. Substitusi gugus $C=O$ menjadi $-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan

C=O alifatik menjadi $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik, substitusi rangkap C=C menjadi C=C pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik menjadi $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=C alifatik, penambahan rangkap C=C bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 132$ memperlihatkan adanya reduksi 2 rangkap C=C dan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 128$. Fragmentasi atom -C-dan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 128$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -CH₃ ($m/z= 15$) menjadi -CH ($m/z= 13$) dan pembentukan rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 123$. Substitusi gugus -CH₃ menjadi -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH₃ menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 123$ memperlihatkan adanya fragmentasi 2 atom H ($m/z= 1$), pembentukan aromatik dan 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 119$. Fragmentasi atom H, pembentukan aromatik dan C=C didukung data IR pada bilangan

gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1654,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 119$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 111$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 111$ memperlihatkan adanya fragmentasi 2 atom H ($m/z= 1$), pembentukan siklik dan rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 107$. Fragmentasi atom H, pembentukan siklik dan penambahan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1654,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 107$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 97$. fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 97$ memperlihatkan adanya fragmentasi pembentukan siklik dan 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 93$. Pembentukan siklik dan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1654,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 93$ memperlihatkan adanya substitusi gugus C=O ($m/z= 28$) menjadi $-CH_3$ ($m/z= 15$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 83$. Substitusi gugus C=O menjadi $-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=O alifatik menjadi $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$, reduksi C=C bilangan gelombang $1654,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 83$ memperlihatkan adanya fragmentasi pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 79$. Pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1654,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 79$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z= 13$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 71$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik, reduksi C=C bilangan gelombang $1654,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 67$ memperlihatkan adanya substitusi atom $-O-$ ($m/z= 16$) menjadi $-OH$ ($m/z= 17$) dan fragmentasi gugus $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 59$. Sedangkan substitusi atom $-O-$ ($m/z= 16$) menjadi $-CH$ ($m/z= 13$) dan pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 50$.

Substitusi atom -O- menjadi -OH didukung data IR pada bilangan gelombang 1015,20 cm^{-1} spektra serapan gugus C-O-C (eter) menjadi 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik, sedangkan substitusi atom -O- menjadi -CH bilangan gelombang 1015,20 cm^{-1} spektra serapan gugus C-O-C (eter) menjadi 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik, pembentukan C=C bilangan gelombang 1654,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 59$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi C=O ($m/z= 28$) dan pembentukan 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 55$. Substitusi gugus -OH menjadi C=O didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik menjadi 2344,53 cm^{-1} spektra serapan C=O alifatik, pembentukan C=C bilangan gelombang 1654,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 50$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 43$. Fragmentasi gugus -CH dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 43$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 38$. Pembentukan siklik dan rangkap C=C didukung data IR pada

bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 38$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 29$. Fragmentasi gugus -C- dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 29$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₂ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 15$. Fragmentasi gugus -CH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

5.5.3.27 Identifikasi senyawa 3, 3, 4-Trimetil-4-(4-metil-fenil)-siklopentanon (*Cyclopentanone, 3, 3, 4-trimethyl-4-(4-methylphenyl)*)

Spektra fragmen senyawa 3, 3, 4-Trimetil-4-(4-metil-fenil)-siklopentanon (*Cyclopentanone, 3, 3, 4-trimethyl-4-(4-methylphenyl)*) ($m/z= 216$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 216$. Ion molekul (M^+) $m/z= 216$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₃ dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 201$. Fragmentasi gugus -CH₃ didukung data IR pada bilangan gelombang 1384,33 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH₃, fragmentasi atom H bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 201$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 188$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 188$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 173$. Fragmentasi 2 gugus $-CH_3$ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 159$. Fragmentasi gugus $-CH-CH-CH$ ($m/z= 42$) dan reduksi rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 153$. Fragmentasi gugus $-C(CH_3)_2$ ($m/z= 41$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 146$. Fragmentasi gugus $(-CH_3)_3$ ($m/z= 45$) dan pembentukan 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 141$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi serta pembentukan $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik, fragmentasi gugus $-CH_3$, $-CH-CH-CH$ dan $-C(CH_3)_2$ pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 141$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 132$. Sedangkan ion molekul (M^+) $m/z= 132$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 3 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 127$. Fragmentasi atom $-C-$

an reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH aromatik dan 1454,34 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 127$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 4 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 117$. Pembentukan siklik dan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH aromatik dan 1454,34 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 117$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 110$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH aromatik dan alifatik, 1454,34 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C aromatik dan 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 110$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik, fragmentasi atom H ($m/z= 1$) dan pembentukan rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 105$. Sedangkan fragmentasi gugus -COCH₃ ($m/z= 43$) dan pembentukan 3 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 77$. Pembentukan siklik, fragmentasi atom H dan pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik dan 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH alifatik, sedangkan fragmentasi

gugus -COCH_3 pada bilangan gelombang $2344,53 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=O alifatik dan $1384,33 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH_3 .

Ion molekul (M^+) $m/z= 105$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$), reduksi 2 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 99$. Fragmentasi atom -C- , reduksi C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 99$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom H ($m/z= 1$), pembentukan siklik dan pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 83$. Fragmentasi atom H, pembentukan siklik dan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 71$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom H ($m/z= 1$), pembentukan siklik dan pembentukan 3 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 65$. Fragmentasi atom H, pembentukan siklik dan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 65$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=$

60. Pembentukan siklik dan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 60$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$), fragmentasi atom H ($m/z= 1$), dan reduksi 3 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 55$. Fragmentasi atom -C-, fragmentasi atom H, dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 55$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 50$. Pembentukan siklik dan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 50$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$), fragmentasi atom H ($m/z= 1$), dan reduksi rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 41$. Fragmentasi atom -C-, atom H, dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 41$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 29$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

5.5.3.28 Identifikasi senyawa 2-Metoksi-4-(1-propenil-3-hidroksi)-, fenol (*Phenol, 4-(3-hydroxy-1-propenyl)-2-methoxy*)

Spektra fragmen senyawa 2-Metoksi-4-(1-propenil-3-hidroksi)-, fenol (*Phenol, 4-(3-hydroxy-1-propenyl)-2-methoxy*) ($m/z = 184$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z = 184$ dengan 2 ikatan hidrogen pada gugus $-OH$ dan 2 di gugus $O-CH_3$. Ion molekul (M^+) $m/z = 184$ memperlihatkan adanya fragmentasi 4 atom H ($m/z = 4$) menghasilkan puncak ion (M^+) $m/z = 180$. Pembentukan ikatan hidrogen didukung data titik didih (90^0C).

Ion molekul (M^+) $m/z = 180$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z = 17$), reduksi 2 rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H ($m/z = 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 167$. Fragmentasi gugus $-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ aromatik, fragmentasi atom H dan reduksi $C=C$ pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z = 167$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 163$. Pembentukan $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z = 163$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z = 12$) dan reduksi rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 155$. Fragmentasi gugus $-C-$ dan reduksi $C=C$

didukung data IR pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 155$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 151$. Pembentukan siklik dan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 151$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi C=O ($m/z= 28$) dan pembentukan 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 147$. Substitusi gugus -OH menjadi C=O didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik menjadi $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=O alifatik, pembentukan C=C pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 147$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan pembentukan 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 137$. Fragmentasi atom -C- dan pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 137$ memperlihatkan adanya substitusi gugus C=O ($m/z= 28$) menjadi -OH ($m/z= 17$), fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul

(M⁺) $m/z= 131$. Substitusi gugus C=O menjadi –OH didukung data IR pada bilangan gelombang 2344,53 cm⁻¹ spektra serapan C=O alifatik menjadi 3419,5 cm⁻¹ spektra serapan gugus –OH alifatik, fragmentasi gugus –CH bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH alifatik dan reduksi C=C bilangan gelombang 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 131$ memperlihatkan adanya substitusi gugus –OH ($m/z= 17$) menjadi C=O ($m/z= 28$) dan pembentukan 3 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 124$. Substitusi gugus –OH menjadi C=O didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm⁻¹ spektra serapan gugus –OH alifatik menjadi 2344,53 cm⁻¹ spektra serapan C=O alifatik sedangkan reduksi C=C bilangan gelombang 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 124$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 119$. Pembentukan C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik dan 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 119$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -O-CH₃ ($m/z= 31$) menjadi –OH ($m/z= 17$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 109$. Substitusi gugus -O-CH₃ menjadi –OH didukung data IR pada bilangan gelombang

2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus O-CH₃ menjadi 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik sedangkan reduksi C=C bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 109$ memperlihatkan adanya substitusi gugus C=O ($m/z= 28$) menjadi -OH ($m/z= 17$), reduksi 1 rangkap C=C dan substitusi gugus -OH ($m/z= 17$) menjadi -CH₂ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 103$. Substitusi gugus C=O menjadi -OH didukung data IR pada bilangan gelombang 2344,53 cm^{-1} spektra serapan C=O alifatik menjadi 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik, substitusi gugus -OH menjadi -CH₂ bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH alifatik menjadi 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik, sedangkan reduksi C=C bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 103$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 95$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 95, 81$ dan 55 memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 91, 77$ dan 43 . Pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 91$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) menjadi $C=O$ ($m/z= 28$), fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 81$. Substitusi gugus $-OH$ menjadi $C=O$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik menjadi $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $C=O$ alifatik, sedangkan fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi $C=C$ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 77$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 65$. Sedangkan substitusi gugus $C=O$ ($m/z= 28$) menjadi $-CH$ ($m/z= 13$) dan pembentukan siklik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 61$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik sedangkan substitusi gugus $C=O$ menjadi $-CH$ bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $C=O$ alifatik menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 61$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 55$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi $C=C$

didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 43$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 39$. Pembentukan siklik dan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 39$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 55$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

5.5.3.29 Identifikasi senyawa Asam-2-Propanoat, 3-(3-metoksi-4-hidroksi-fenil)-, metil ester (2-Propenoic acid, 3-(4-hydroxyphenyl)-, methyl ester)

Spektra fragmen senyawa Asam-2-Propanoat, 3-(3-metoksi-4-hidroksi-fenil)-, metil ester (2-Propenoic acid, 3-(4-hydroxyphenyl)-, methyl ester) ($m/z= 208$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 208$. Ion molekul (M^+) $m/z= 208$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -O-CH₃ ($m/z= 31$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 178$. Fragmentasi gugus -O-CH₃ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan O-CH₃.

Ion molekul (M^+) $m/z= 178$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus C=O ($m/z= 28$), pembentukan rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 147$. Fragmentasi gugus C=O didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O, pembentukan C=C bilangan gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C dan fragmentasi atom H bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 147$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CC- ($m/z= 24$), reduksi 2 rangkap C=C dan 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 131$. Fragmentasi gugus -CC- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik sedangkan reduksi C=C bilangan gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C.

Ion molekul (M^+) $m/z= 131$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -O-CH₃ ($m/z= 31$) menjadi -CH-CH₂ ($m/z= 27$), pembentukan aromatik dan 1 rangkap C=C alifatik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 119$. Substitusi gugus -O-CH₃ menjadi -CH-CH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan O-CH₃ menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik, pembentukan aromatik $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik dan $1454,34$

cm^{-1} spektra serapan ulur C=C aromatik, pembentukan C=C alifatik pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 119$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -OH ($m/z= 17$) dan pembentukan rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 101$. Fragmentasi gugus -OH didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH aromatik, sedangkan pembentukan C=C bilangan gelombang 2078,41 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 101$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan substitusi ulur C=C menjadi C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 91$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik, substitusi ulur C=C menjadi C=C bilangan gelombang 2078,41 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C aromatik menjadi 1454,34 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 91$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₂ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 77$. Fragmentasi gugus -CH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 77$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 65$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 65$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 51$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 51$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 40$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 40$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 28$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

5.5.3.30 Identifikasi senyawa 1-(4-Metil-fenil)-2-bromo-etanon (*Ethanone, 2-bromo-1-(4-methylphenyl)*)

Spektra fragmen senyawa 1-(4-Metil-fenil)-2-bromo-etanon (*Ethanone, 2-bromo-1-(4-methylphenyl)*) ($m/z= 214$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 214$ dengan 3 ikatan hidrogen pada gugus $C=O$. Pembentukan ikatan hidrogen didukung data titik didih

(90°C). Ion molekul (M^+) $m/z= 214$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus H_3C-CH_3 ($m/z= 30$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 183$. Fragmentasi gugus H_3Br-CH ($m/z= 96$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 119$. Sedangkan fragmentasi gugus $H_3Br-C-O-$ ($m/z= 111$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 105$. Fragmentasi gugus H_3C-CH_3 didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$, fragmentasi gugus H_3Br-CH bilangan gelombang $587,10\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-C-Br$, sedangkan fragmentasi gugus $H_3Br-C-O-$ bilangan gelombang $587,10\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-C-Br$ dan $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$ alifatik, .

Ion molekul (M^+) $m/z= 183$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$), reduksi 1 rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 172$. Fragmentasi atom $-C-$, atom H dan reduksi $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 172$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CCH-CH$ ($m/z= 38$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 134$. Fragmentasi gugus $-CCH-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 119$ memperlihatkan adanya substitusi gugus C=O ($m/z= 28$) menjadi -OH ($m/z= 17$) fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 114$. Fragmentasi gugus C=O ($m/z= 28$) dan reduksi 3 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 98$. Sedangkan substitusi gugus C=O ($m/z= 28$) menjadi -OH ($m/z= 17$) dan fragmentasi gugus -CH-CH-CH-C-CH₃ ($m/z= 56$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 59$. Substitusi gugus C=O menjadi -OH didukung data IR pada bilangan gelombang 2344,53 cm⁻¹ spektra serapan gugus C=O alifatik menjadi 3419,5 cm⁻¹ spektra serapan gugus -OH alifatik, fragmentasi gugus C=O bilangan gelombang 2344,53 cm⁻¹ spektra serapan gugus C=O alifatik, sedangkan fragmentasi atom -C- dan gugus -CH-CH-CH-C-CH₃ bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1384,33 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH₃, dan reduksi atau pembentukan C=C bilangan gelombang 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 98$ memperlihatkan adanya pembentukan 3 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 91$. Pembentukan C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik dan 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 91$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 3 rangkap C=C menghasilkan puncak

ion molekul (M^+) $m/z= 86$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 86$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik, 3 rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 77$. Pembentukan siklik, rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 77$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 65$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 65$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 1 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 51$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 51$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 42$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

5.5.3.31 Identifikasi senyawa (6S-cis),- 4, 4, 7a-Trimetil-5, 6, 7, 7a-tetrahidro-6-hidroksi-2(4H)-benzofuranon (2(4H)-Benzofuranone, 5, 6, 7, 7a-tetrahydro-6-hydroxy-4, 4, 7a-trimethyl-, (6S-cis)

Spektra fragmen senyawa (6S-cis),- 4, 4, 7a-Trimetil-5, 6, 7, 7a-tetrahidro-6-hidroksi-2(4H)-benzofuranon (2(4H)-Benzofuranone, 5, 6, 7, 7a-tetrahydro-6-hydroxy-4, 4, 7a-trimethyl-, (6S-cis) ($m/z= 196$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 196$. Ion molekul (M^+) $m/z= 196$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) dan pembentukan 1 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 178$. Fragmentasi gugus $-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ aromatik, sedangkan pembentukan $C=C$ bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 178$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 163$. Fragmentasi atom $-C-$ dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan

gugus -CH aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 163$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 153$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 153$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₂ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 140$. Fragmentasi gugus -CH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 140$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -O- ($m/z= 16$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 125$. Fragmentasi atom -O- ($m/z= 16$) dan substitusi atom -O- ($m/z= 16$) menjadi gugus -CH ($m/z= 13$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 119$. Fragmentasi atom -O- ($m/z= 16$), dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 111$. Sedangkan fragmentasi atom -O- ($m/z= 16$), pembentukan 2 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 105$. Fragmentasi atom -O- didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O alifatik dan

bilangan gelombang $1015,20\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C-O-C eter, substitusi atom -O- menjadi -CH bilangan gelombang $1015,20\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C-O-C eter menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik, sedangkan pembentukan C=C dan fragmentasi atom H bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 105$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 95$. Fragmentasi gugus -CH dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 95$ dan 79 memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 85$ dan 67 . Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 85$ dan 57 memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 79$ dan 51 . Pembentukan siklik dan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 67$ dan 51 memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 1 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 57$ dan 43 . Fragmentasi $-C-$ dan reduksi $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 43$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z= 15$) dan pembentukan rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 27$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$, sedangkan pembentukan $C=C$ bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 27$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 15$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

5.5.3.32 Identifikasi senyawa Adamantana (*Adamantane*)

Spektra fragmen Adamantana (*Adamantane*) ($m/z= 136$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 136$. Ion molekul (M^+) $m/z= 136$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul

(M⁺) $m/z= 121$. Fragmentasi gugus -CH₂ dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 121$ memperlihatkan adanya pembentukan 3 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 115$. Pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 115$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 107$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 107$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 102$. Pembentukan siklik dan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 102$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$), reduksi 2 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 93$. Fragmentasi atom -C- dan H serta reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 93$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 1 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 86$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 86$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik, 2 rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 79$. Pembentukan siklik, rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 79$ dan 67 memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 74$ dan 62 . Pembentukan siklik dan rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 79$ dan 53 memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$), reduksi 1 rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 79$ dan 41 . Fragmentasi atom $-C-$, reduksi $C=C$ dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 41$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 27$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

5.5.3.33 Identifikasi senyawa 1,7-Dihidro-6H-6-purinon (*6H-purin-6-one, 1,7-dihydro*)

Spektra fragmen 1,7-Dihidro-6H-6-purinon (*6H-purin-6-one, 1,7-dihydro*) ($m/z= 136$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 136$. Ion molekul (M^+) $m/z= 136$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-O-$ ($m/z= 16$), pembentukan rangkap C=N dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 119$. Sedangkan fragmentasi gugus $-CN-CH-CN-C-HN-CN-$ ($m/z= 118$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 18$. Fragmentasi atom $-O-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra fragmen gugus C=O, pembentukan C=N dan fragmentasi atom H bilangan gelombang $2364,55\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -C=N-, fragmentasi atom H bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik, sedangkan fragmentasi gugus $-CN-CH-CN-C-HN-CN-$ bilangan gelombang $2364,55\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -C=N-, $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik, dan $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -NH.

Ion molekul (M^+) $m/z= 119$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-N-$ amina ($m/z= 14$) dan reduksi 2 rangkap C=N menghasilkan

puncak ion molekul (M^+) $m/z= 109$. Fragmentasi gugus $-N-$ amina didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-NH$, reduksi $C=N$ bilangan gelombang $2364,55 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-C=N-$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 109$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-C=N$ ($m/z= 26$), pembentukan rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 81$. Fragmentasi gugus $-C=N$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2364,55 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-C=N$, pembentukan rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H bilangan gelombang $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik dan $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 81$ memperlihatkan adanya adisi ulur $-NH$ ($m/z= 15$) menjadi ulur $C=C$ dan reduksi rangkap $C=N$ ($m/z= 26$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 66$. Adisi ulur $-NH$ menjadi ulur $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-NH$ aromatik menjadi $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik, sedangkan reduksi $C=N$ bilangan gelombang $2364,55 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-C=N-$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 66$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 54$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang

2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 54$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 43$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 43$ memperlihatkan adanya substitusi ulur -NH ($m/z= 15$) menjadi C=C ($m/z= 24$) dan pembentukan 3 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 36$. Substitusi ulur -NH menjadi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan ulur -NH menjadi 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik, pembentukan C=C bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 36$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 43$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

5.5.3.34 Identifikasi senyawa 4-(2',6',6'-Trimetil-1-sikloheksa-1'-en-1'-il)-butanal (4-(2',6', 6'-Trimethyl-cyclohex-1'-en-1'-yl)-butanal))

Spektra fragmen 4-(2',6',6'-Trimetil-1-sikloheksa-1'-en-1'-il)-butanal (4-(2',6', 6'-Trimethyl-cyclohex-1'-en-1'-yl)-butanal)) ($m/z=194$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z=194$. Ion molekul (M^+) $m/z=194$ memperlihatkan adanya reduksi 1 rangkap C=C aromatik dan pembentukan rangkap C=C alifatik serta fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=179$. Reduksi C=C aromatik dan pembentukan C=C alifatik didukung data IR pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -C=C- aromatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik, sedangkan fragmentasi atom H bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=179$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) dan pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=161$. Fragmentasi atom -C- dan pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=161$ dan 135 memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=150$ dan 123 . Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 150$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik, reduksi 1 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 135$. Pembentukan siklik, reduksi C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 123$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 15$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 111$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan reduksi C=C bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 111$ memperlihatkan adanya pembentukan 3 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 105$. Pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 105$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 95$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 95$ dan 81 memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 95$ dan 67 . Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 67$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 55$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 67$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan pembentukan 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 41$. Fragmentasi atom $-C-$ dan pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

5.5.3.35 Identifikasi senyawa Asam Krisantemumat-2,4-dimetilbenzil ester (*Chrysanthemumic acid 2,4-dimethylbenzyl ester*)

Spektra fragmen senyawa Asam Krisantemumat-2,4-dimetilbenzil ester (*Chrysanthemumic acid 2,4-dimethylbenzyl ester*) ($m/z= 286$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 286$. Ion molekul (M^+) $m/z= 286$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul

(M⁺) $m/z= 271$. Fragmentasi gugus -CH₂ dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan ulur -CH alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 286$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 262$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan ulur -CH aromatik dan 1454,34 cm⁻¹ spektra serapan ulur -C=C- aromatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 262$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 251$. Fragmentasi gugus -CH, dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan ulur -CH alifatik dan 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 251$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 1 rangkap C=C dan C≡C menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 243$. Pembentukan siklik dan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan ulur -CH alifatik dan 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan ulur C=C alifatik, sedangkan pembentukan C≡C bilangan gelombang 2078,41 cm⁻¹ spektra serapan gugus C≡C.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 243$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi rangkap C=C dan C≡C menghasilkan

puncak ion molekul (M^+) $m/z= 237$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik, sedangkan reduksi $C\equiv C$ bilangan gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C\equiv C$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 243$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 230$. Pembentukan siklik dan rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 230$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 3 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 223$. Sedangkan fragmentasi gugus $-C(CH_3)_2$ ($m/z= 42$) dan reduksi 3 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 197$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik, sedangkan fragmentasi gugus $-C(CH_3)_2$ bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 223$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 3 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 215$. Pembentukan siklik dan rangkap $C=C$ didukung data IR pada

bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 223$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 205$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 223$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 186$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 186$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 180$. Pembentukan siklik dan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 180$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$), reduksi 1 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 173$. Sedangkan fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$)

menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 167$. Fragmentasi atom $-C-$, atom H dan reduksi rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 167$ memperlihatkan adanya reduksi 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 160$. Reduksi $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 160$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik, 4 rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 149$. Sedangkan fragmentasi gugus $-O-(CH_2)_2-CH_3$ ($m/z= 55$), pembentukan 5 rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 91$. Pembentukan siklik, $C=C$ dan dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik, sedangkan fragmentasi gugus $-O-(CH_2)_2-CH_3$ bilangan gelombang $1015,26\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C-O-C$ eter, $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 149$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 1 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 139$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi rangkap

C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 139$ memperlihatkan adanya pembentukan 3 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 133$. Pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 133$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 3 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 125$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 125$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 125$. Pembentukan siklik dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan ulur -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 119$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 111$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra

serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 111$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 3 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 104$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 104$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik, 2 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 97$. Sedangkan fragmentasi gugus -CH-CH₃ ($m/z= 28$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 75$. Pembentukan siklik, rangkap C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik, sedangkan fragmentasi gugus -CH-CH₃ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH₃.

Ion molekul (M^+) $m/z= 91$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 81$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 81$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan pembentukan 1 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 67$. Fragmentasi atom $-C-$ dan pembentukan $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 67$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 55$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 55$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) menjadi $C=O$ ($m/z= 28$) dan fragmentasi gugus $-CCH$ ($m/z= 25$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 41$. Substitusi gugus $-OH$ menjadi $C=O$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus OH alifatik menjadi $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$ alifatik, sedangkan fragmentasi gugus $-CCH$ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

5.5.3.36 Identifikasi senyawa Asam-2-Propanoat, 3-(3-metoksi-4-hidroksi-fenil)-, metil ester (*2-Propenoic acid, 3-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-, methyl ester*)

Spektra fragmen senyawa Asam-2-Propanoat, 3-(3-metoksi-4-hidroksi-fenil)-, metil ester (*2-Propenoic acid, 3-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-, methyl ester*) ($m/z = 208$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z = 208$. Ion molekul (M^+) $m/z = 208$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -OH ($m/z = 17$) reduksi rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z = 1$). Fragmentasi gugus -OH didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus OH aromatik, reduksi rangkap C=C dan fragmentasi atom H bilangan gelombang $1454,34 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -C=C- aromatik dan $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z = 193$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 177$. Pembentukan 2 rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1434,54 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=C aromatik

Ion molekul (M^+) $m/z = 177$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z = 13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 162$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z = 162$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -O-CH₃ ($m/z = 31$) menjadi gugus C≡C ($m/z = 24$) menghasilkan

puncak ion molekul (M^+) $m/z=150$. Substitusi gugus $-O-CH_3$ menjadi gugus $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $O-CH_3$ menjadi $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C\equiv C$.

Ion molekul (M^+) $m/z=150$ memperlihatkan adanya substitusi $O-CH_3$ menjadi $C=C$ ($m/z=15$) dan substitusi atom $-O-$ menjadi gugus $HO-CH_2$ ($m/z=15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=137$ dan (M^+) $m/z=45$. Substitusi $O-CH_3$ menjadi $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $O-CH_3$ menjadi $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=C$ alifatik, sedangkan substitusi atom $-O-$ menjadi gugus $HO-CH_2$ bilangan gelombang $1015,20\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C-O-C$ eter menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-CH$ alifatik dan $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus OH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=131$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z=17$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=117$. Fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z=17$) didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=117$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z=12$) dan pembentukan 1 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=105$. Fragmentasi atom fragmentasi atom $-C-$ dan pembentukan $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang

2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 105$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) dan pembentukan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 89$. Fragmentasi atom fragmentasi atom -C- dan pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 89$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 77$. Fragmentasi gugus -CH dengan data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 77$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 63$. Pembentukan siklik dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 63$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 57$. Fragmentasi atom fragmentasi atom -C- dan pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43

cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 57$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 51$. Pembentukan siklik dan C=C didukung dengan data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 51$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 40$. Fragmentasi atom fragmentasi atom -C- dan pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 40$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) dan fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 29$. Fragmentasi atom -C- dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

5.5.3.37 Identifikasi senyawa (Z)-1-Dimetil (fenil)-1-silipropena ((Z)-1-Dimethyl (phenyl) silylprop-1-ena)

Spektra fragmen senyawa (Z)-1-Dimetil (fenil)-1-silipropena ((Z)-1-Dimethyl (phenyl) silylprop-1-ena) ($m/z = 176$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z = 161$. Ion molekul (M^+) $m/z = 176$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z = 14$) dan fragmentasi atom H ($m/z = 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 161$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z = 176$ juga memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CCH_2-CH_3$ ($m/z = 41$) dan fragmentasi atom H ($m/z = 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 135$. Fragmentasi gugus $-CCH_2-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik, $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=C$ alifatik dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z = 176$ juga memperlihatkan fragmentasi gugus $-CCH-CH_2-CH_3$ ($m/z = 54$) dan fragmentasi atom H ($m/z = 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 121$. Fragmentasi gugus $-CCH-CH_2-CH_3$ dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik, $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra

serapan gugus C=C alifatik dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH₃.

5.5.3.38 Identifikasi senyawa 1-Metilbisiklo [3.3.1]-9-aza-3-nonanon (*9-Aza-1-methylbicyclo [3.3.1] nonanon-3-one*)

Spektra fragmen senyawa 1-Metilbisiklo [3.3.1]-9-aza-3-nonanon (*9-Aza-1-methylbicyclo [3.3.1] nonanon-3-one*) ($m/z= 153$) memperlihatkan adanya puncak ion (M^+) $m/z= 153$. Ion molekul (M^+) $m/z= 153$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₃ ($m/z=15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 138$. Fragmentasi gugus -CH₃ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH₃

Ion molekul (M^+) $m/z= 138$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -O- ($m/z= 16$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 124$. Fragmentasi atom -O- didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -C=O.

Ion molekul (M^+) $m/z= 124$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₂ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 110$. Fragmentasi gugus -CH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 110$ memperlihatkan adanya -CH₂ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 96$. Fragmentasi gugus -CH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 96$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 82$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 82$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z=13$), pembentukan 1 rangkap $C=C$ dan fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 67$. Fragmentasi gugus $-CH$, atom H dan pembentukan $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 67$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z=12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 55$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 55$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 49$. Pembentukan siklik dan rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 49$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z=12$) dan reduksi 2 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 42$. Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi $C=C$ didukung

data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik.

5.5.3.39 Identifikasi senyawa 4, 4, 8-Trimetiltrisiklo [6.3.1.0(1,5)] dodekana-2,9-diol (4, 4, 8-Trimethyltricyclo [6.3.1.0(1,5)] dodecane-2,9-diol)

Senyawa 4, 4, 8-Trimetiltrisiklo [6.3.1.0(1,5)] dodekana-2,9-diol (4, 4, 8-Trimethyltricyclo[6.3.1.0(1,5)]dodecane-2,9-diol) ($m/z= 238$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 238$. Ion molekul (M^+) $m/z= 238$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -OH ($m/z=17$) dan pembentukan 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 220$. Fragmentasi gugus -OH didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH aromatik, pembentukan C=C bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 220$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 210$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 210$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 205$. Pembentukan C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang

1454,34 cm^{-1} spektra serapan gugus C=C aromatik dan 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 205$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 194$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH aromatik dan dan 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 194$ memperlihatkan adanya pembentukan 3 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 187$. Pembentukan siklik dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 187$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) dan reduksi 3 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 182$. Sedangkan fragmentasi 2 gugus -CH₃ ($m/z=30$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 159$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan gugus C=C alifatik, sedangkan fragmentasi gugus -CH₃ bilangan gelombang 1384,33 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH₃.

Ion molekul (M^+) $m/z=182$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik, 1 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=177$. Pembentukan siklik, fragmentasi atom H dan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=177$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=169$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=169$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap C=C dan C \equiv C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=164$. Pembentukan rangkap C=C dan C \equiv C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -C=C- alifatik dan $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur -C \equiv C-.

Ion molekul (M^+) $m/z=159$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=150$. Sedangkan fragmentasi gugus -CH₂ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=145$. Fragmentasi atom -C- dan -CH₂ serta reduksi C=C didukung data IR

pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=145$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=140$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=140$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik, pembentukan 1 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=135$. Pembentukan siklik, rangkap C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=135$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CC- ($m/z=24$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=129$. Fragmentasi gugus -CC- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=129$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik, C=C dan C≡C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=121$. Pembentukan siklik, C=C dan C≡C didukung data IR

pada bilangan gelombang $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik dan $2078,41 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C≡C.

Ion molekul (M^+) $m/z= 121$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$), reduksi C=C dan C≡C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 115$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik, sedangkan reduksi C≡C bilangan gelombang $2078,41 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C≡C.

Ion molekul (M^+) $m/z= 115$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik, C=C dan C≡C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 107$. Pembentukan siklik, C=C dan C≡C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik dan $2078,41 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C≡C.

Ion molekul (M^+) $m/z= 107$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z=13$) dan reduksi gugus C≡C menjadi C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 98$. Fragmentasi -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik, reduksi gugus C≡C menjadi C=C bilangan gelombang $2078,41 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C≡C menjadi $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 98$ memperlihatkan adanya substitusi gugus -OH ($m/z=17$) menjadi C=O ($m/z=28$) dan pembentukan 1

rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 93$. Substitusi gugus -OH menjadi C=O didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH menjadi $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O, sedangkan pembentukan C=C bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 93$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) dan reduksi 2 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 86$. Fragmentasi atom -C- dan reduksi rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 86$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 81$. Pembentukan C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 81$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -O- ($m/z=16$) dan reduksi 2 rangkap C=C) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 72$. Substitusi gugus C=O ($m/z=28$) menjadi -OH ($m/z=17$), fragmentasi gugus -CCH ($m/z=25$) dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 60$. Sedangkan fragmentasi gugus C=O ($m/z=28$), pembentukan siklik dan substitusi

gugus C=C menjadi C≡C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=50$. Fragmentasi atom -O- dan C=O didukung data IR pada bilangan gelombang 2344,53 cm^{-1} spektra serapan gugus C=O, substitusi gugus C=O menjadi -OH bilangan gelombang 2344,53 cm^{-1} spektra serapan gugus C=O menjadi 2344,53 cm^{-1} spektra serapan gugus -OH, fragmentasi gugus -CCH, reduksi rangkap C=C, pembentukan siklik bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan gugus C=C alifatik, sedangkan substitusi gugus C=C menjadi C≡C bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan gugus C=C alifatik menjadi 2078,41 cm^{-1} spektra serapan gugus C≡C.

Ion molekul (M^+) $m/z=72$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik, 1 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=67$. Pembentukan siklik, rangkap C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan gugus C=C alifatik dan 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=60$ memperlihatkan adanya pembentukan 2 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=55$. Sedangkan fragmentasi gugus -CH-OH ($m/z=30$) dan fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=29$. Fragmentasi gugus -CH-OH dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra

serapan gugus -CH alifatik, sedangkan pembentukan C=C bilangan gelombang 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 50$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) dan reduksi rangkap C≡C menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 41$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH alifatik dan 1634,9 cm⁻¹ spektra serapan gugus C=C alifatik, sedangkan reduksi C≡C bilangan gelombang 2078,41 cm⁻¹ spektra serapan gugus C≡C.

5.5.3.40 Identifikasi senyawa (3S*, 5R*, 6R*, 7E, 9. xi.)-3,6-Epoksi-7-megastimena-5,9-diol ((3S*, 5R*, 6R*, 7E, 9. xi.)-3,6-Epoxy-7-megastimene-5,9-diol)

Spektra fragmen senyawa (3S*,5R*,6R*,7E, 9. xi.)-3,6-Epoksi-7-megastimena-5,9-diol ((3S*, 5R*, 6R*, 7E, 9. xi.)-3,6-Epoxy-7-megastimene-5,9-diol) ($m/z=212$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 212$. Ion molekul (M⁺) $m/z= 212$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap -C=C menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 208$. Fragmentasi gugus -C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 2078,41 cm⁻¹ spektra serapan gugus -C=C.

Ion molekul (M⁺) $m/z= 208$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₃ ($m/z= 15$), dengan fragmentasi gugus -OH ($m/z=17$) menghasilkan puncak ion molekul (M⁺) $m/z= 181$. Fragmentasi gugus -CH₃ dan gugus -OH didukung data IR pada bilangan gelombang 1384,33 cm⁻¹ spektra serapan gugus -CH₃ alifatik dan bilangan gelombang 3419,5 cm⁻¹ spektra serapan gugus -OH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=181$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-O-$ eter ($m/z=16$), pembentukan rangkap $-C=C-$ ($m/z=17$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=166$. Fragmentasi atom $-O-$ dan pembentukan rangkap $-C=C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1015,20\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C-O-C$ eter dan bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-C=C-$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=166$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=152$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=152$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z=12$) dan penataan ulang siklo menjadi alifatik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=142$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=142$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z=17$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=125$. Fragmentasi gugus $-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=125$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=$

109. Fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=109$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom H ($m/z=1$), pemutusan rangkap menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=99$. Fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=99$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ ($m/z=14$) dan pembentukan rangkap tiga menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=82$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ dan pembentukan rangkap tiga didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=82$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-\text{C}-$ ($m/z=12$) dan pemutusan rangkap $\text{C}\equiv\text{C}$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=71$. Fragmentasi atom $-\text{C}-$ dan pemutusan rangkap $\text{C}\equiv\text{C}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=71$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ ($m/z=14$) dan pembentukan rangkap menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=55$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ dan pembentukan rangkap didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=71$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}$ ($m/z=13$) dan pembentukan rangkap menghasilkan puncak

ion molekul (M^+) $m/z= 55$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

5.5.3.41 Identifikasi senyawa Asam-2,4,6-Trimetil-7-hidroksi-8-oksazol-2-enoat-5-ilok, metil ester (*7-Hydroxy-2,4,6-trimethyl-8-oxazol-5-yloct-2-enoic, methyl ester*)

Spektra fragmen senyawa asam 2,4,6-trimetil-7-hidroksi-8-oksazol-2-etanoat-5-ilok, metil ester (*7-hydroxy-2,4,6-trimethyl-8-oxazol-5-yloct-2-enoic, methyl ester*) ($m/z=281$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 281$. Ion molekul (M^+) $m/z= 281$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -O- ($m/z=16$), pembentukan rangkap dan substitusi siklo menjadi alifatik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 263$. Fragmentasi atom -O- didukung data IR pada bilangan gelombang $1015,20\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C-O-C eter.

Ion molekul (M^+) $m/z=263$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₂ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 250$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=250$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CN ($m/z= 26$) dan fragmentasi dua atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 222$. Fragmentasi gugus -CN dan fragmentasi dua atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -C-N.

Ion molekul (M^+) $m/z=222$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z= 15$) dan fragmentasi atom O ($m/z= 16$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 199$. Fragmentasi gugus CH_3 dan fragmentasi atom $-O-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus CH_3 dan bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$.

Ion molekul (M^+) $m/z=199$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z= 15$) dan pembentukan rangkap menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 180$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ dan pembentukan rangkap didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z=180$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 167$. Fragmentasi gugus $-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=167$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z= 15$) dan pergantian gugus $-OH$ ($m/z= 17$) menjadi gugus $C=O$ ($m/z= 29$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 152$. Fragmentasi gugus CH_3 dan pergantian gugus $-OH$ menjadi gugus $C=O$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus CH_3 dan bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$.

Ion molekul (M^+) $m/z=152$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 139$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z=139$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z= 15$) dan pembentukan rangkap menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 133$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ dan pembentukan rangkap didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z=133$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z= 13$) dan pemutusan rangkap menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 127$. Fragmentasi gugus $-CH$ dan pembentukan rangkap didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=127$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 121$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ dan pembentukan rangkap didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=C$.

Ion molekul (M^+) $m/z=121$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 111$. Fragmentasi gugus $-CH$ dan pembentukan rangkap didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=111$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z= 15$) dan pergantian gugus $C=O$ ($m/z= 29$) menjadi gugus $-OH$ ($m/z= 17$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 101$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ dan pergantian gugus $C=O$ menjadi gugus $-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$ dan bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=101$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 95$. Fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=95$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 83$. Fragmentasi gugus $-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=121$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-O-$ ($m/z= 16$) dan pembentukan rangkap menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 89$. Fragmentasi atom $-O-$ dan pembentukan rangkap didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$.

Ion molekul (M^+) $m/z=89$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH-CH_2$ ($m/z= 27$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 69$. Fragmentasi gugus $-CH-CH_2$ dan pembentukan rangkap didukung

data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=89$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan substitusi menjadi siklo menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 77$. Fragmentasi atom -C- dan substitusi alifatik menjadi siklo didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=77$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₂ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 61$. Fragmentasi gugus -CH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=61$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan penataan ulang siklo menjadi alifatik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 55$. Fragmentasi atom -C- dan substitusi siklo menjadi alifatik didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=55$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₂ ($m/z= 14$) dan substitusi alifatik menjadi siklo menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 41$. Fragmentasi gugus -CH₂ ($m/z= 14$) dan penataan ulang alifatik menjadi siklo didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=41$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan substitusi alifatik menjadi siklo menghasilkan

puncak ion molekul (M^+) $m/z=29$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

5.5.3.42 Identifikasi senyawa Fenprobamat (*Phenprobamate*)

Spektra fragmen senyawa Fenprobamat (*phenprobamate*) ($m/z=179$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z=179$. Ion molekul (M^+) $m/z=179$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CONH_2$ ($m/z=44$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=136$. Fragmentasi gugus $-CONH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-NH$ dan bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$ amida.

Ion molekul (M^+) $m/z=136$ juga memperlihatkan adanya substitusi atom $-O-$ ($m/z=16$) menjadi $-CH_2$ ($m/z=14$) dan fragmentasi gugus $-C-CH-CH-CH-CH-CH-CH$ ($m/z=90$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=84$. Substitusi atom $-O-$ menjadi $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1015,20\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C-O-C$ eter menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik, sedangkan fragmentasi gugus $-C-CH-CH-CH-CH-CH-CH$ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan uluur $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=118$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=103$.

Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=103$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 91$. Fragmentasi gugus $-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus alifatik $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=91$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 77$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus alifatik $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=77$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 65$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=65$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 51$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus alifatik $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=51$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan penataan ulang siklo menjadi alifatik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 43$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus alifatik $-CH$ aromatik.

Spektra fragmen senyawa Fenprobamat (*phenprobamate*) ($m/z=179$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z=179$. Ion molekul (M^+) $m/z=179$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -O- ($m/z=16$) dan fragmentasi gugus C_6H_6 ($m/z=78$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=84$. Fragmentasi atom -O- dan fragmentasi gugus $-C_6H_6$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O dan bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus alifatik -CH aromatik.

5.5.3.43 Identifikasi senyawa Asam Heksadekanoat (*Hexadecanoic acid*)

Spektra fragmen senyawa asam heksadekanoat (*hexadecanoic acid*) ($m/z=256$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z=256$. Ion molekul (M^+) $m/z=256$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -OH ($m/z=17$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=239$. Fragmentasi gugus -OH didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=239$ memperlihatkan adanya pergantian gugus C=O ($m/z=28$) menjadi gugus -OH ($m/z=17$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=227$. Pergantian gugus C=O menjadi gugus -OH didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=227$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z=15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=213$.

Fragmentasi gugus -CH_3 didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH_3 .

Ion molekul (M^+) $m/z=213$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus CH_2 ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 199$. Fragmentasi gugus -CH_2 didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aliaftik.

Ion molekul (M^+) $m/z=199$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 185$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aliaftik.

Ion molekul (M^+) $m/z=185$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 171$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aliaftik.

Ion molekul (M^+) $m/z=171$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z= 12$) dan pemutusan rangkap menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 157$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aliaftik.

Ion molekul (M^+) $m/z=157$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH_3 ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 143$. Fragmentasi gugus -CH_3 didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH_3 .

Ion molekul (M^+) $m/z=143$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 129$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aliaftik.

Ion molekul (M^+) $m/z=129$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 115$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aliaftik.

Ion molekul (M^+) $m/z=115$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) dan pembentukan rangkap $-C=C-$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 97$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aliaftik.

Ion molekul (M^+) $m/z=97$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 83$. Fragmentasi gugus $-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aliaftik.

Ion molekul (M^+) $m/z=83$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) dan pemutusan rangkap $-C=C-$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 73$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aliaftik.

Ion molekul (M^+) $m/z=73$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 60$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aliaftik.

Ion molekul (M^+) $m/z=60$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) dan pembentukan rangkap $-C=C-$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 43$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aliaftik.

5.5.3.44 Identifikasi senyawa Asam beta.-fenil benzenaproanoat (*Benzenepropenoic acid, .beta.-phenyl*)

Spektra fragmen senyawa Asam Benzenaproanoat, Beta.-Fenil (*Benzenepopenoic acid, .beta.-phenyl*) ($m/z=226$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z=226$. Ion molekul (M^+) $m/z=226$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z=17$) dan fragmentasi gugus $C=O$ ($m/z=28$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 180$. Fragmentasi gugus $-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ aromatik dan bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$.

Ion molekul (M^+) $m/z=180$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 167$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=180$ memperlihatkan adanya fragmentasi tiga gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) dan substitusi siklo menjadi alifatik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 152$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=180$ memperlihatkan adanya fragmentasi lima gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) dan substitusi siklo menjadi alifatik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 139$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=180$ memperlihatkan adanya fragmentasi enam gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) dan substitusi siklo menjadi alifatik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 128$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=180$ memperlihatkan adanya fragmentasi lima gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$), pembentukan rangkap $C=C$ dan penataan ulang siklo menjadi alifatik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 115$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ dan pembentukan rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=115$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 103$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=103$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 89$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=89$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) dan pemutusan rangkap menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 83$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=83$ memperlihatkan adanya pemutusan rangkap C=C ($m/z=24$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 77$. Pemutusan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=77$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z=13$) dan pemutusan rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 69$. Pemutusan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=69$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap C=C ($m/z=24$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 63$. Pembentukan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 63$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) dan pemutusan rangkap menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 51$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=226$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $C_{14}H_{12}$ ($m/z=180$) dan fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 45$. Fragmentasi gugus $C_{14}H_{12}$ dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 51$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 39$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 39$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 27$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=27$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=14$. Fragmentasi gugus $-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

5.5.3.45 Identifikasi senyawa 3-Deken-5-on (*3-Decen-5-one*)

Spektra fragmen senyawa 3-Deken-5-on (*3-decen-5-one*) ($m/z=154$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z=154$. Ion molekul (M^+) $m/z=154$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2-CH_3$ ($m/z=29$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=125$. Fragmentasi gugus $-CH_2-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aliaftik.

Ion molekul (M^+) $m/z=125$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=111$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aliaftik.

. Ion molekul (M^+) $m/z=111$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z=17$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=98$. Fragmentasi gugus $-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ aliaftik.

Ion molekul (M^+) $m/z=98$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $-CH_3$ ($m/z=14$) menjadi gugus $-OH$ ($m/z=17$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=91$. Pergantian gugus $-CH_3$ menjadi gugus $-OH$

didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH aliaftik.

. Ion molekul (M^+) $m/z=91$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -OH ($m/z= 17$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 83$. Fragmentasi gugus -OH didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH aliaftik.

. Ion molekul (M^+) $m/z=83$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap C=C ($m/z= 24$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 77$. Pembentukan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aliaftik.

Ion molekul (M^+) $m/z=77$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₂ ($m/z= 14$) dan pemutusan rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 66$. Fragmentasi gugus -CH₂ dan pemutusan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aliaftik.

Ion molekul (M^+) $m/z=66$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₃ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 55$. Fragmentasi gugus -CH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aliaftik.

Ion molekul (M^+) $m/z=55$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 41$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aliaftik.

5.5.3.46 Identifikasi senyawa Trivinil-silan (*Trivinyl-silane*)

Spektra fragmen senyawa Trivinil-silan (*trivinyl-silane* ($m/z=387$)) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z=387$. Ion molekul (M^+) $m/z=387$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-C-Br_2$ ($m/z=172$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=217$. Fragmentasi gugus $-C-Br_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $587,10\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-C-Br$.

Ion molekul (M^+) $m/z=217$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=203$. Substitusi atom $-Si-$ ($m/z=28$) menjadi $-CH_2$ ($m/z=14$), fragmentasi gugus $(-CH-CH_2)_3$ ($m/z=45$) dan pembentukan siklik. Fragmentasi gugus $-CH_2$ dan $(-CH-CH_2)_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus CH aliaftik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C, sedangkan substitusi atom $-Si-$ menjadi $-CH_2$ bilangan gelombang $587,10\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-Si-C-$ menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus CH aliaftik.

Ion molekul (M^+) $m/z=217$ juga memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CCH-Br$ ($m/z=105$) dan atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=109$. Fragmentasi gugus $-CCH-Br$ dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aliaftik dan $587,10\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-C-Br$.

Ion molekul (M^+) $m/z=203$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan reduksi 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=189$. Pembentukan siklik dan reduksi C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aliaftik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=189$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -CH ($m/z=13$) dan pembentukan rangkap -C≡C- menjadi alifatik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=175$. Fragmentasi atom -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aliaftik, sedangkan pembentukan C≡C bilangan gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C≡C.

Ion molekul (M^+) $m/z=175$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH-CCH ($m/z=38$) dan pembentukan siklik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=135$. Fragmentasi gugus -CH-CCH dan pembentukan siklik didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus CH aliaftik, $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik, dan $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C≡C.

Ion molekul (M^+) $m/z=109$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CCH₂ ($m/z=26$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=83$. Fragmentasi gugus -CCH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aliaftik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=83$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH-CH_2$ ($m/z=26$) dan pembentukan siklik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=55$. Fragmentasi gugus $-CH-CH_2$ dan pembentukan siklik didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=55$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $-SiH_2$ ($m/z=30$) menjadi $-CH_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=39$. Substitusi gugus $-SiH_2$ menjadi $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-Si-H$ menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

5.5.3.47 Identifikasi senyawa 2, 6, 10-Trimetilundekan-2, 9-diena-4-on (2, 6, 10-Trimethylundecan-2,9-dien-4-one)

Spektra fragmen senyawa 2,6,10-trimetilundekan-2,9-diena-4-on (*2,6,10-trimethylundecan-2,9-dien-4-one*) ($m/z=208$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z=208$. Ion molekul (M^+) $m/z=208$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-O-$ ($m/z=16$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=193$. Fragmentasi atom $-O-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=O.

Ion molekul (M^+) $m/z=193$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z=15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=165$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus CH_3 .

Ion molekul (M^+) $m/z=165$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z=13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=150$. Fragmentasi gugus $-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=150$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=137$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=137$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=125$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=125$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z=15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=108$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z=108$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z=15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=95$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z=95$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=83$.

Fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=83$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}_3$ ($m/z=15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=69$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z=69$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=55$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=55$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=41$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik.

5.5.3.48 Identifikasi senyawa 2-ol-4,6,6-trimetil-bisiklo [3.1.1]-3-heptena (*Bicyclo [3.1.1]hept-3-en-2-ol, 4,6,6-trimethyl*)

Spektra fragmen senyawa 2-ol-4,6,6-trimetil-bisiklo [3.1.1]-3-heptena (*bicyclo [3.1.1]hept-3-en-2-ol, 4,6,6-trimethyl*) ($m/z=152$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z=152$. Ion molekul (M^+) $m/z=152$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-\text{C}-$ ($m/z=12$) dan pemutusan rangkap $\text{C}=\text{C}$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=143$. Fragmentasi atom $-\text{C}-$ dan pemutusan rangkap $\text{C}=\text{C}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus

C=C aromatik dan bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=143$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -OH ($m/z= 17$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=125$. Fragmentasi gugus -OH didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=152$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -OH ($m/z=17$) dan pembentukan 1 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 134$. Fragmentasi gugus -OH didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=134$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₃ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=119$. Fragmentasi gugus -CH₃ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH₃.

Ion molekul (M^+) $m/z=119$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₃ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=109$. Fragmentasi gugus -CH₃ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH₃.

Ion molekul (M^+) $m/z=109$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap C=C ($m/z= 24$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=103$. Pembentukan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=134$ memperlihatkan adanya fragmentasi tiga gugus $-CH_3$ ($m/z=15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=94$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z=94$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) dan pembentukan rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=61$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ dan pembentukan rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=C$ aromatik dan bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=61$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z=12$) dan substitusi siklo menjadi alifatik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=55$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=55$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z=15$) dan substitusi alifatik menjadi siklo menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=41$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z=61$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) dan substitusi siklo menjadi alifatik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=55$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung

data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=152$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CCHC-(CH_3)_2$ ($m/z=67$), reduksi 1 rangkap C=C dan fragmentasi atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=87$. Fragmentasi gugus $-CCHC-(CH_3)_2$, reduksi C=C dan fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH₃.

Ion molekul (M^+) $m/z=87$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap C=C ($m/z=24$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=81$. Pembentukan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=81$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₃ ($m/z=15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=69$. Fragmentasi gugus -CH₃ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH₃.

5.5.3.49 Identifikasi senyawa 1-(1-Metiletil)-4-metil-bisiklo[3.1.0]-3-heksanol (*Bicyclo[3.1.0]hexan-3-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)*)

Spektra fragmen senyawa 1-(1-metiletil)-4-metil-bisiklo[3.1.0]-3-heksanol (*Bicyclo[3.1.0]hexan-3-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)*) ($m/z=154$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z=154$. Ion molekul (M^+) $m/z=154$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -OH ($m/z=16$) dan pembentukan rangkap C=C ($m/z=24$) menghasilkan

puncak ion molekul (M^+) $m/z=136$. Fragmentasi gugus $-OH$ dan pembentukan rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ aromatik dan bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=136$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z=15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=121$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z=154$ juga memperlihatkan adanya substitusi gugus $-CH_3$ ($m/z=15$) menjadi $-CH$ ($m/z=13$) dan fragmentasi gugus $-CH-CCOH-CH-CH_3$ ($m/z=82$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=99$. Substitusi gugus $-CH_3$ menjadi $-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$ menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik, sedangkan fragmentasi gugus $-CH-CCOH-CH-CH_3$ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik, $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-OH$ alifatik dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z=121$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=110$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=110$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z=15$) dan pembentukan rangkap $C=C$ menghasilkan

puncak ion molekul (M^+) $m/z=93$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ dan pembentukan rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$ dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=93$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z=13$) dan pembentukan rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=81$. Fragmentasi gugus $-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=81$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=67$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=67$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap $C=C$ ($m/z=24$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=61$. Pembentukan rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=67$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=55$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=55$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z=12$) dan substitusi siklo menjadi alifatik menghasilkan

puncak ion molekul (M^+) $m/z=43$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=43$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap $C=C$ ($m/z=24$) dan substitusi alifatik menjadi siklo menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=37$. Pembentukan rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=37$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z=12$) dan substitusi siklo menjadi alifatik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=29$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus CH alifatik.

5.5.3.50 Identifikasi senyawa 2-Metil-3-(1-metil-etil)-, (1.alpha.,2.alpha.,3.alpha), Sikloheksanol (Cyclohexanol, 2-methyl-3-(1-methyl-ethyl)-, (1.alpha., 2.alpha., 3.alpha))

Spektra fragmen senyawa 2-Metil-3-(1-metil-etil)-, (1.alpha.,2.alpha.,3.alpha), Sikloheksanol (Cyclohexanol, 2-methyl-3-(1-methyl-ethyl)-, (1.alpha., 2.alpha., 3.alpha)) ($m/z=156$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z=156$. Ion molekul (M^+) $m/z=156$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap $C=C$ ($m/z=24$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=154$. Pembentukan rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=154$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -OH ($m/z= 17$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=136$. Fragmentasi gugus -OH didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=136$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₃ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=121$. Fragmentasi gugus -CH₃ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH₃.

Ion molekul (M^+) $m/z=121$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₃ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=107$. Fragmentasi gugus -CH₃ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH₃.

Ion molekul (M^+) $m/z=107$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₂ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=95$. Fragmentasi gugus -CH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=95$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₃ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=83$. Fragmentasi gugus -CH₃ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH₃.

Ion molekul (M^+) $m/z=83$ memperlihatkan adanya pembentukan rangkap C=C ($m/z= 24$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=77$.

Pembentukan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 1454,34 cm^{-1} spektra serapan gugus C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=77$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom -C- ($m/z=12$) dan penataan ulang siklo menjadi alifatik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=67$. Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=67$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z=13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=55$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=55$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₂ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=43$. Fragmentasi gugus -CH₂ didukung data IR pada bilangan gelombang 2844,43 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH alifatik.

5.5.3.51 Identifikasi senyawa 2,5-Dimetil-2,5-dimetoksi-heksana (*Hexane, 2,5-dimethoxy-2,5-dimethyl*)

Spektra fragmen senyawa 2,5-dimetil-heksana-2,5-dimetoksi (*hexane, 2,5-dimethoxy-2,5-dimethyl*) ($m/z=174$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z=174$. Ion molekul (M^+) $m/z=174$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH₃ ($m/z=15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=159$. Fragmentasi gugus -CH₃ didukung data IR pada bilangan gelombang 1384,33 cm^{-1} spektra serapan gugus -CH₃.

Ion molekul (M^+) $m/z= 174$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus CH_3-O- ($m/z= 31$) dan pembentukan rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 127$. Fragmentasi gugus CH_3-O- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $O-CH_3$, sedangkan pembentukan $C=C$ bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 127$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z= 13$) dan atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 111$. Fragmentasi gugus $-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 111$ memperlihatkan adanya fragmentasi dua atom H ($m/z= 1$) dan substitusi atom $-O-$ ($m/z= 16$) menjadi $C\equiv C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 105$. Substitusi gugus $-O-$ eter menjadi $C\equiv C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1015,20\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C-O-C$ eter menjadi $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $C\equiv C$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 111$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom H ($m/z= 1$) dan gugus $-CCH-CH$ ($m/z= 38$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 105$. Fragmentasi atom H dan gugus $-CCH-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 105$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 95$.

Fragmentasi atom -C- didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 95$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom H ($m/z= 1$) dan gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 85$. Fragmentasi atom H dan gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 85$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom H ($m/z= 1$) dan pembentukan ikatan rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 79$. Fragmentasi atom H dan pembentukan ikatan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 79$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom H ($m/z= 1$) dan pembentukan ikatan rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 67$. Fragmentasi atom H dan pembentukan ikatan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 79$ juga memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2-CH_2$ ($m/z= 28$) dan substitusi alifatik menjadi siklobutil menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 49$. Fragmentasi gugus $-CH_2-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33$

cm^{-1} spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik dan $1454,34 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $\text{C}=\text{C}$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 67$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}$ ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 55$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 55$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom H ($m/z= 1$) dan gugus $-\text{CH}$ ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 43$. Fragmentasi atom H dan gugus $-\text{CH}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}_3$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 43$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 3 rangkap $\text{C}=\text{C}$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 36$. Pembentukan siklik dan rangkap $\text{C}=\text{C}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $\text{C}=\text{C}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 36$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-\text{C}-$ ($m/z=12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 28$. Fragmentasi atom $-\text{C}-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,33 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $\text{C}=\text{C}$ alifatik.

5.5.3.52 Identifikasi senyawa Asam oktadekanoat (*Octadecanoic acid*)

Spektra fragmen senyawa asam oktadekanot (*octadecanoic acid*) ($m/z=284$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 284$. Ion molekul (M^+) $m/z= 284$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom 6 H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 278$. Fragmentasi atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 278$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom O ($m/z=16$) dan atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 265$. Fragmentasi atom O dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang 1634 cm^{-1} spektra serapan gugus $-C=O$ amida dan $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 265$ memperlihatkan adanya adanya pembentukan 4 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 255$. Pembentukan $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 255$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z=15$) dann pemutusan ikatan rangkap $C=C$ menjadi ikatan tunggal menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=248$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 248$ memperlihatkan adanya pembentukan ikatan rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=241$. Pembentukan ikatan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 241$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -OH ($m/z=17$) dan atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 227$. Fragmentasi gugus -OH dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -OH alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 227$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom H ($m/z= 1$) dan gugus -CH₃ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 213$. Fragmentasi atom H dan gugus -CH₃ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH₃.

Ion molekul (M^+) $m/z= 213$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 199$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 199$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus -CH ($m/z= 13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 185$. Fragmentasi gugus -CH didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus -CH alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=185$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z=13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=171$. Fragmentasi gugus $-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=171$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z=13$) dan atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=163$. Fragmentasi gugus $-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=163$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom H ($m/z=1$) dan pembentukan ikatan rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=157$. Fragmentasi atom H dan pembentukan ikatan rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=157$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z=15$) dan pemutusan ikatan rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=151$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ dan pemutusan ikatan rangkap $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$ dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=151$ memperlihatkan adanya adanya pembentukan 4 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+)

$m/z = 143$. Pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=143$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}_3$ ($m/z= 15$) dan pemutusan ikatan rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 135$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}_3$ dan pemutusan ikatan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}_3$ dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=135$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom H ($m/z= 1$) dan pembentukan ikatan rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 129$. Fragmentasi atom H dan pembentukan ikatan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-\text{CH}$ alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=129$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-\text{CH}$ ($m/z= 13$) dan pemutusan ikatan rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 123$. Fragmentasi atom $-\text{CH}$ dan pemutusan ikatan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-\text{CH}$ alifatik dan $1634,9 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=123$ memperlihatkan adanya pembentukan 4 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 115$.

Pembentukan C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 1634,9 cm^{-1} spektra serapan C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=115$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ ($m/z= 14$) dan pemutusan ikatan rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 109$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ dan pemutusan ikatan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan $-\text{CH}$ alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=109$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ ($m/z= 14$) dan pemutusan ikatan rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 97$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ dan pemutusan ikatan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan $-\text{CH}$ alifatik dan 1634,9 cm^{-1} spektra serapan C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=97$ memperlihatkan adanya fragmentasi 8 H atom ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 91$. Hal ini didukung data IR pada bilangan gelombang 3419,5 cm^{-1} spektra serapan $-\text{CH}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=91$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}$ ($m/z= 13$) dan pemutusan ikatan rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 83$. Hal ini didukung data IR pada

bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=83$ memperlihatkan adanya penataan ulang alifatik menjadi sikloheksapentena menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=73$. Hal ini didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=73$ memperlihatkan adanya penataan ulang sikloheksapentena menjadi alifatik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=67$. Hal ini didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=67$ memperlihatkan adanya penataan ulang alifatik menjadi siklopentenapentaena menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=60$. Hal ini didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=67$ memperlihatkan adanya pembentukan siklik dan 3 rangkap C=C menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=53$. Pembentukan siklik dan rangkap C=C didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan -CH alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan C=C alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 53$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z= 13$) dan atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 43$. Hal ini didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-CH$ alifatik.

5.5.3.53 Identifikasi senyawa 2,4-Diamin-5-(3', 4',metilen-dioksifenil)-6-etil-pirimidin (6-Ethyl-5-(3', 4', methylenedioxyphenyl) pyrimidine-2, 4-diamine)

Spektra fragmen senyawa 2,4-Diamin-5-(3', 4',metilen-dioksifenil)-6-etil-pirimidin (6-Ethyl-5- (3', 4', methylenedioxyphenyl) pyrimidine-2, 4-diamine) ($m/z=257$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 257$. Ion molekul (M^+) $m/z= 257$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-C-N$ ($m/z=28$) dan substitusi gugus $-C-N$ ($m/z=28$) menjadi $-CH$ ($m/z=13$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 229$. Fragmentasi gugus $-C-N$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-C-N$, sedangkan substitusi gugus $-C-N$ menjadi $-CH$ bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-C-N$ menjadi $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 257$ juga memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $NH-CN-CH_2-CH_3$ ($m/z=70$) dan reduksi 4 rangkap $C=C$ 1 rangkap $C=N$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 199$. Fragmentasi gugus $NH-CN-CH_2-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-NH$ aromatik, $2364,55\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=N$ aromatik dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra

serapan gugus $-\text{CH}_3$, sedangkan reduksi rangkap $\text{C}=\text{C}$ dan $\text{C}=\text{N}$ bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $\text{C}=\text{C}$ aromatik dan $2364,55\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $\text{C}=\text{N}$ aromatik.

5.5.3.54 Identifikasi senyawa Floroglusinol (*Phloroglucinol*)

Spektra fragmen senyawa Floroglusinol (*Phloroglucinol*) ($m/z=126$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z=126$. Ion molekul (M^+) $m/z=126$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{OH}$ ($m/z=17$) dan atom H menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=111$. Fragmentasi gugus $-\text{OH}$ dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-\text{OH}$ aromatik dan $2844,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=111$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ ($m/z=14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=97$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z=97$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $-\text{OH}$ ($m/z=17$) menjadi $\text{C}=\text{O}$ ($m/z=28$) dan fragmentasi atom $-\text{C}$ ($m/z=12$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z=85$. Substitusi gugus $-\text{OH}$ menjadi $\text{C}=\text{O}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-\text{OH}$ alifatik menjadi $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $\text{C}=\text{O}$, sedangkan fragmentasi atom $-\text{C}$ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $\text{C}=\text{C}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 85$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $C=O$ ($m/z=28$) menjadi $-CH$ ($m/z=13$) dan pembentukan siklik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 69$. Substitusi gugus $C=O$ menjadi $-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $C=O$ menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik, sedangkan pembentukan siklik bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 69$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-OH$ ($m/z=17$) dan menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 52$. Fragmentasi gugus $-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-OH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 52$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z=12$) dan atom H ($m/z=1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 43$. Fragmentasi atom $-C-$ dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 43$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z= 15$) dan atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 29$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$ alifatik dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

5.5.3.55 Identifikasi senyawa Asam Metil-3,5-bis(p-metoksi-karbonil-fenoksi)-4-metoksibenzoat (*Methyl 3,5-bis(p-methoxy carbonyl phenoxy)-4-methoxybenzoic acid*)

Spektra fragmen senyawa asam metil-3,5-bis-4-metoksibenzoat (p-metoksi-karbonil-fenoksi)-4- (*methyl 3,5-bis (P-methoxy carbonyl phenoxy)-4- methoxybenzoic acid*) ($m/z= 466$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 466$. Ion molekul (M^+) $m/z= 466$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-O-CH_3$ ($m/z= 31$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 435$. Fragmentasi gugus $-O-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $O-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 466$ juga memperlihatkan adanya substitusi gugus $-O-CH_3$ ($m/z=31$) menjadi $-OH$ ($m/z= 17$) dan fragmentasi gugus $C_{13}H_{16}O_5$ ($m/z=31$) dan reduksi 4 rangkap $C=C$ menghasilkan ion molekul (M^+) $m/z= 202$. Substitusi gugus $-O-CH_3$ menjadi $-OH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $O-CH_3$ menjadi $3419,5\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $-OH$ aromatik, sedangkan fragmentasi gugus $C_{13}H_{16}O_5$ dan reduksi $C=C$ bilangan gelombang dan $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik, $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik, $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan $O-CH_3$, $2344,53\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C=O$ alifatik dan $1015,20\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $C-O-C$ eter.

5.5.3.56 Identifikasi senyawa 5-Metil-2-fenilindolizin (*5-Methyl-2-phenylindolizine*)

Spektra fragmen senyawa 5-metil-2-fenilindolizin (*5-methyl-2-phenylindolizine*) ($m/z = 207$) memperlihatkan adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z = 207$. Ion molekul (M^+) $m/z = 207$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CCH-CH_2-C-$ ($m/z = 51$) dan reduksi 3 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 165$. Fragmentasi gugus $-CCH-CH_2-C-$ dan reduksi $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z = 165$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z = 15$) dan atom H ($m/z = 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 152$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z = 165$ juga memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z = 15$) dan substitusi gugus $-CH-CH_3$ ($m/z = 28$) menjadi gugus $-CCH_2$ ($m/z = 26$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z = 130$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$ alifatik sedangkan substitusi gugus $-CH-CH_3$ menjadi gugus $-CCH_2$ bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 207$ juga memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CCC-$ ($m/z= 36$) dan reduksi 4 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 178$. Fragmentasi gugus $-CCC-$ dan reduksi $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 207$ juga memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CCH_3$ ($m/z= 27$) dan reduksi 5 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 191$. Fragmentasi gugus $-CCH_3$ dan reduksi $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$ aromatik dan $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 207$ juga memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-NCC-CH-CH-CCH_3$ ($m/z= 91$) dan atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 115$. Fragmentasi gugus $-NCC-CH-CH-CCH_3$ dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik, $1454,34\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ aromatik dan $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-C-N$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 115$ memperlihatkan adanya substitusi gugus siklo menjadi alifatik menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 102$. Hal ini didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik, $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 102$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z= 13$) dan atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 89$. Fragmentasi gugus $-CH$ dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 89$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH$ ($m/z= 13$) dan atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 77$. Fragmentasi gugus $-CH$ dan atom H didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ aromatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 77$ dan 63 memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 12$) dan reduksi 1 rangkap $C=C$ menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 63$ dan 51 . Fragmentasi atom $-C-$ dan reduksi $C=C$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 51$ juga memperlihatkan adanya substitusi gugus siklobutadiena menjadi etena menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 28$. Hal ini didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

5.5.3.57 1,1,1,3,5,5,5-Heptametiltrisiloksan (*1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane*)

Spektra fragmen senyawa 1,1,1,3,5,5,5-heptametiltrisiloksan (*1,1,1,3,5,5,5-heptamethyltrisiloxane*) ($m/z= 221$) memperlihatkan

adanya puncak ion molekul (M^+) $m/z= 221$. Ion molekul (M^+) $m/z= 221$ memperlihatkan adanya substitusi atom $-O-$ ($m/z= 16$) menjadi $-CH_2$ ($m/z= 14$) dan fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 207$. Substitusi atom $-O-$ menjadi $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1032,26\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur Si-O-Si menjadi $587,10\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $-Si-C$ alifatik, sedangkan fragmentasi gugus $-CH_3$ bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 207$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_3$ ($m/z= 15$) dan atom H ($m/z= 1$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 207$. Fragmentasi gugus $-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$, sedangkan fragmentasi atom H bilangan gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-Si-H$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 191$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-SiH-CH_3$ ($m/z= 44$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 147$. Fragmentasi gugus $-SiH-CH_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-Si-H$ dan $1053,29\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-Si-CH_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 147$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 133$. Fragmentasi gugus $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 133$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $-SiH-CH_3$ ($m/z= 44$) menjadi $-CH-CH$ ($m/z= 26$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 115$. Substitusi gugus $-SiH-CH_3$ menjadi $-CH-CH$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2078,41\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-Si-H$ dan $1053,29\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-Si-CH_3$ menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 115$ memperlihatkan adanya fragmentasi atom $-C-$ ($m/z= 26$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 103$. Fragmentasi atom $-C-$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik dan $1634,9\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $C=C$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 103$ memperlihatkan adanya substitusi atom $-O-$ ($m/z= 16$) menjadi $-CH_2$ ($m/z= 14$) dan fragmentasi gugus $-CH_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 87$. Sedangkan substitusi atom $-Si-$ ($m/z= 28$) menjadi $-CH_3$ ($m/z= 15$) dan fragmentasi 3 gugus $-CH_3$ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 45$. Substitusi atom $-O-$ menjadi $-CH_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1053,29\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan ulur $Si-O-C$ menjadi $2844,43\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH$ alifatik, substitusi atom $-Si-$ menjadi $-CH_3$ bilangan gelombang $1053,29\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-Si-CH_3$ menjadi $1384,33\text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-CH_3$, sedangkan fragmentasi gugus $-CH_2$ dan gugus $-CH_3$ bilangan gelombang $2844,43$

cm^{-1} spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik dan $1384,33 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 87$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ ($m/z= 14$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 73$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}_2$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik.

Ion molekul (M^+) $m/z= 73$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}_3$ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 59$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}_3$ didukung data IR pada bilangan gelombang $1384,33 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 59$ memperlihatkan adanya substitusi gugus $-\text{Si-H}$ ($m/z= 29$) menjadi $-\text{CH}_2$ ($m/z= 14$) dan fragmentasi gugus $-\text{CH}_3$ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 28$. Substitusi gugus $-\text{Si-H}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2078,41 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{Si-H}$ menjadi $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik, sedangkan fragmentasi gugus $-\text{CH}_3$ bilangan gelombang $1384,33 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}_3$.

Ion molekul (M^+) $m/z= 59$ memperlihatkan adanya fragmentasi gugus $-\text{CH}$ ($m/z= 15$) menghasilkan puncak ion molekul (M^+) $m/z= 28$. Fragmentasi gugus $-\text{CH}$ didukung data IR pada bilangan gelombang $2844,43 \text{ cm}^{-1}$ spektra serapan gugus $-\text{CH}$ alifatik.