

FMIPA

596

12/92
(2)

KARYA ILMIAH

SPEKTROSKOPI MASSA DAN POLA FRAGMENTASI DARI ALKALOID
APORPHIN YANG TEROKSIGENASI PADA POSISI 1,2,9, DAN 10

oleh

A F R I Z A L



FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
1992

PENDAHULUAN

Penggunaan spektrometer massa secara luas dalam penentuan struktur molekul senyawa organik dimulai sekitar tahun 1960. Spektrometer massa merupakan salah satu dari alat yang digunakan untuk penentuan struktur molekul senyawa organik disamping menggunakan spektrometer infra-merah, resonansi magnet inti dan spektrometer ultraviolet.

Dari analisis spektrometri massa akan diperoleh berat molekul dari senyawa organik tersebut dan berat molekul dari ion-ion fragmentasinya. Setiap senyawa organik itu mempunyai berat molekul dan pola-pola fragmentasinya tersendiri, tetapi di dalam suatu kelompok senyawa organik akan mempunyai pola-pola fragmentasi yang sama. Misalnya kelompok senyawa alkaloid aporphin. Kelompok senyawa aporphin ini akan mempunyai pola-pola fragmentasi yang sama, sehingga pada spektrumnya akan diperoleh ion-ion fragmen dengan harga m/e yang sama atau ion-ion fragmennya yang hilang akan sama.

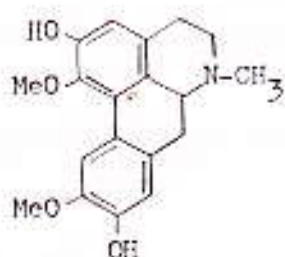
Dengan mempelajari spektrum-spektrum massa dari suatu kelompok senyawa, akan diperoleh ciri-ciri khas pola fragmentasi dari senyawa tersebut, sehingga akan lebih memudahkan untuk menginterpretasikan suatu spektrum massa dari senyawa yang dianalisis.

SPEKTRUM MASSA DAN FRAGMENTASI DARI BEBERAPA ALKALOID APORPHIN

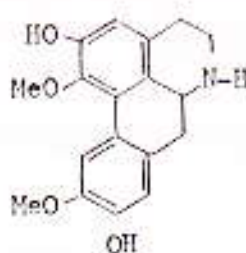
Data spektrum massa dari beberapa alkaloid aporphin ditunjukkan pada Tabel.2.

Tabel.2. Data spektrum massa dari beberapa alkaloid aporphin

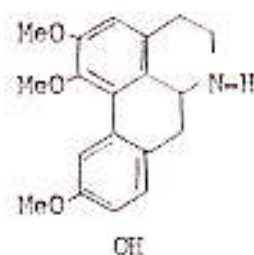
No :	Alkaloid :	m/e								
1	Boldin $C_{19}H_{21}O_4N$	327	326	312	310	296	284	269	253	
2	Norboldin $C_{18}H_{19}O_4N$	313	312	298	296	284	282	255	239	
3	Laurotetanin $C_{19}H_{21}O_4N$	327	326	312	310	298	296	269	253	
4	N-metillaurotetanin $C_{20}H_{23}O_4N$	341	340	326	324	310	298	283	267	
5	Aktinodafnin $C_{18}H_{17}O_4N$	311	310	296	294	281	253	237		
6	N-metilaktinodafnin $C_{19}H_{19}O_4N$	325	324	310	308	295	282	267	251	



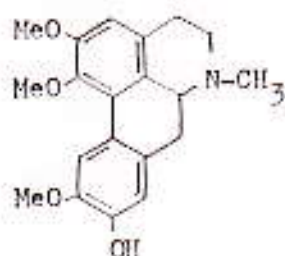
Boldin (I)



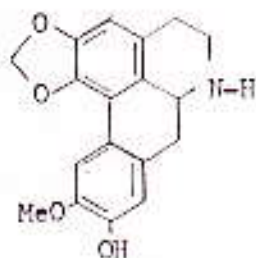
Norboldin (II)



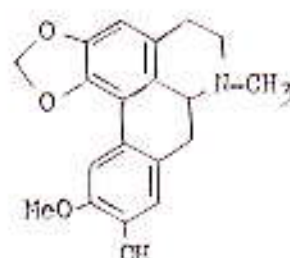
Laurotetanin (III)



N-metillaurotetanin (IV)



Aktinodafnin (V)



N-metilaktinodafnin (VI)

KESIMPULAN

1. Pola fragmentasi dari alkaloid aporphin adalah menghasilkan ion fragmen dengan harga m/e $M-1$ (H), $M-15$ (CH_3), $M-17$ (OH), $M-29$ ($\text{CH}_2=\text{NH}$), $M-31$ (OCH_3), $M-43$ ($\text{CH}_2=\text{N}-\text{CH}_3$), $M-58$ ($\text{CH}_2=\text{N}-\text{CH}_3$ dan CH_3), dan $M-74$ ($\text{CH}_2=\text{N}-\text{CH}_3$ dan OCH_3). Kecuali pada senyawa aporphin yang mempunyai gugus metilen dioksida ($\text{H}_2\text{C} \begin{array}{c} \diagup \text{O} \\ \diagdown \text{O} \end{array}$) pada atom karbon 1 dan 2 tidak terjadi fragmentasi yang menghasilkan ion fragmen dengan harga m/e $M-31$ melainkan ion fragmen dengan harga m/e $M-30$.
2. Fragmentasi yang menghasilkan ion fragmen dengan harga m/e $M-29$ dan $M-43$ merupakan fragmentasi retro-Diels-Alder. Fragmentasi yang menghasilkan ion fragmen dengan harga m/e $M-29$ terjadi pada senyawa aporphin yang pada atom nitrogennya terikat atom hidrogen (H), dan fragmentasi yang menghasilkan ion fragmen dengan harga m/e $M-43$ terjadi pada senyawa aporphin yang pada atom nitrogennya terikat gugus metil (CH_3) atau senyawa N-metil.

DAFTAR PUSTAKA

- Achmad, S.A, (1986), Kimia Organik Bahan Alam, Cetakan Kedua, Departemen Pendidikan dan Kebudayaan Universitas Terbuka, Jakarta.
- Budzikiewicz, H., C. Djerassi, D. H. Williams (1964), Structure Elucidation of Natural Products by Mass Spectrometry, vol. 1, Holden-Day Inc., San-Francisco, London, Amsterdam, 173 - 183.
- Jackson, A.H and J.A. Martin (1966), Steric Effects in the Mass Spectra of Aporphine Alkaloids, J. Chem. Soc. (C), 2181 - 283.
- Ohashi, M., J.M. Wilson, H. Budzikiewicz, M. Shamma, W.A. Slusarchyk and C. Djerassi (1963), Mass Spectrometry in Structural and Stereochemical Problems. XXXI. Aporphine and Related Alkaloids, J. Am. Chem. Soc., 85, 2807 - 2810.
- Patnaik, P.C. and K. W. Gopinath (1975), Litsea Alkaloid : Characterization and Structure of a New Aporphine Alkaloid, Indian J. Chem., 13, 197 - 198.
- Tewari, S., D. S. Bhakuni and M. M. Dhar (1972), The Aporphine Alkaloid of Litsea glutenosa, Phytochemistry, 11, 1149 - 1152.
- Uprety, H., D. S. Bhakuni and M. N Dhar (1972), The Aporphine Alkaloid of Litsea sebifera, Litsea wightiana and Actinodaphne obovata, Phytochemistry, 11, 3057 - 3059.
- William, D. H. and I. Fleming (1973), Spectroscopic Methods in Organic Chemistry, 2nd ed., Mc. Graw-Hill Book Co. (UK) Ltd., London.