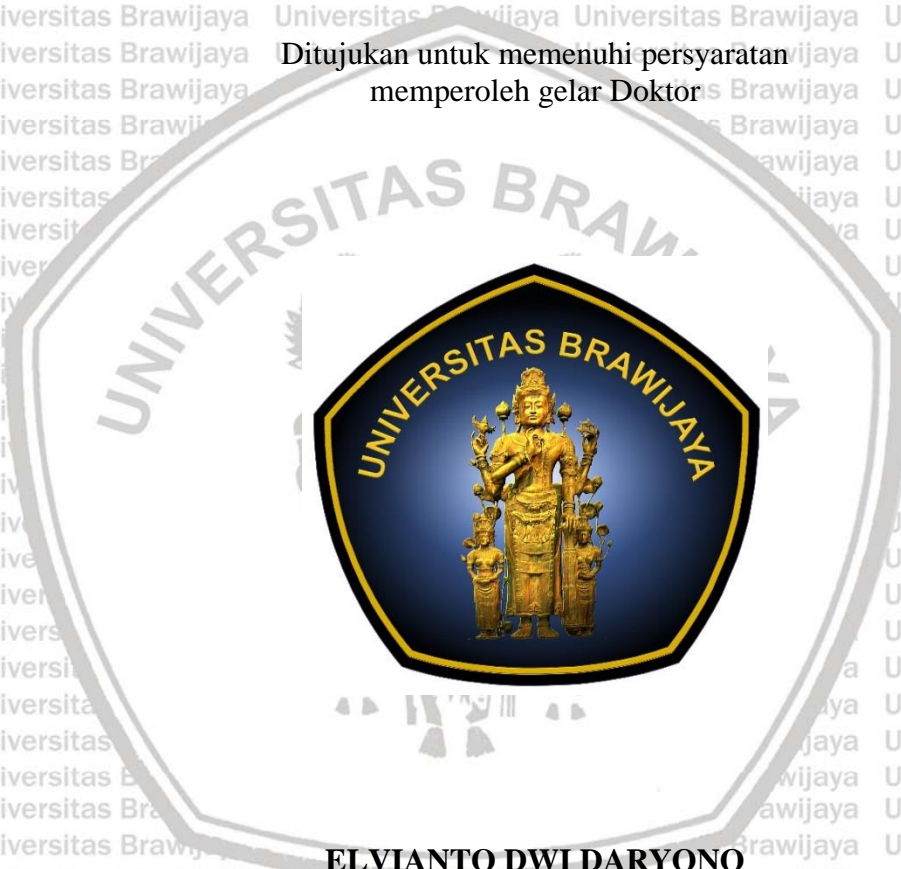


**PROSES INTERESTERIFIKASI MINYAK KELAPA SAWIT
MENJADI BIODIESEL (*FATTY ACID METHYL ESTERS*)
DENGAN BIO-KATALIS SENYAWA AROMATIK**

DISERTASI

**PROGRAM DOKTOR TEKNIK MESIN
MINAT KONVERSI ENERGI**

Ditujukan untuk memenuhi persyaratan
memperoleh gelar Doktor



ELVIANTO DWIDARYONO
NIM. 177060200111003

**UNIVERSITAS BRAWIJAYA
FAKULTAS TEKNIK
MALANG
2021**



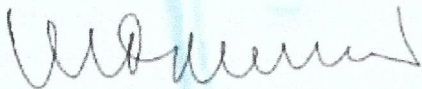
DISERTASI

**PROSES INTERESTERIFIKASI MINYAK KELAPA SAWIT
MENJADI BIODIESEL (FATTY ACID METHYL ESTERS)
DENGAN BIO-KATALIS SENYAWA AROMATIK**

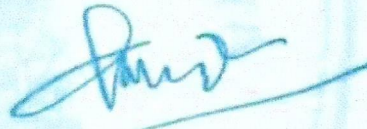
**ELVIANTO DWI DARYONO
177060200111003**

**Telah dipertahankan di depan komisi penguji
pada tanggal 22 Juli 2021
memenuhi syarat
untuk memperoleh gelar Doktor Teknik**

Komisi Pembimbing
Pembimbing Utama **Pembimbing Pendamping I**

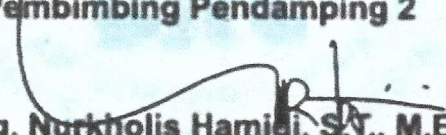


Prof. Ir. ING Wardana, M.Eng., Ph.D.



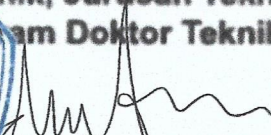
Prof. Dr. Ir. Chandrawati Cahyani, MS.

Pembimbing Pendamping 2



Dr. Eng. Nurkholis Hamidi, S.T., M.Eng.

**Malang,
Universitas Brawijaya
Fakultas Teknik, Jurusan Teknik Mesin
Kelas Program Doktor Teknik Mesin**



**Prof. D. G. Anindito Purnowidodo, S.T., M.Eng.
NIP. 197103101998021001**

**PERNYATAAN
ORIGINALITAS DISERTASI**

Saya menyatakan dengan sebenar-benarnya bahwa sepanjang pengetahuan saya dan berdasarkan hasil penelusuran berbagai karya ilmiah, gagasan dan masalah ilmiah yang diteliti dan diulas di dalam Naskah DISERTASI ini adalah asli dari pemikiran saya, tidak terdapat karya ilmiah yang pernah diajukan oleh orang lain untuk memperoleh gelar akademik di suatu Perguruan Tinggi, dan tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis dikutip dalam naskah ini dan disebutkan dalam sumber kutipan dan daftar pustaka.

Apabila ternyata di dalam naskah DISERTASI ini dapat dibuktikan terdapat unsur-unsur jiplakan, saya bersedia DISERTASI dibatalkan, serta diproses sesuai dengan peraturan perundang-undangan yang berlaku. (UU No. 20 Tahun 2003, Pasal 25 ayat 2 dan pasal 70)

Malang , 22 Juli 2021
Mahasiswa,



Elvianto Dwi Daryono
177060200111003

RINGKASAN

Elvianto Dwi Daryono, Jurusan Teknik Mesin, Fakultas Teknik Universitas Brawijaya, September 2021, *Proses Interesterifikasi Minyak Kelapa Sawit Menjadi Biodiesel (Fatty Acid Methyl Esters) dengan Bio-katalis Senyawa Aromatik*, Dosen Pembimbing : Prof. Ir. I.N.G. Wardana, M. Eng., Ph.D, Dosen Pembimbing 1 : Prof. Dr. Ir. Chandrawati Cahyani, MS dan Dosen Pembimbing 2 : Dr. Eng. Nurkholis Hamidi, ST., M. Eng.

Proses pembuatan biodiesel yang selama ini dilakukan adalah proses transesterifikasi dengan produk sampingnya adalah gliserol. Gliserol sebagai produk samping harus dipisahkan dari biodiesel, karena merupakan *impurities* yang mengganggu pemakaian biodiesel. Proses yang lebih efektif untuk pembuatan biodiesel adalah proses interesterifikasi, dimana produk samping yang dihasilkan adalah triasetin yang tidak memerlukan proses pemisahan karena berfungsi sebagai bio-aditif untuk biodiesel. Proses interesterifikasi yang telah dilakukan menggunakan katalis homogen maupun heterogen yang perlu proses pemisahan di akhir reaksi. Senyawa aromatic organik merupakan alternatif pilihan katalis yang lebih efisien sebab tidak perlu proses pemisahan di akhir reaksi karena berfungsi sebagai antioksidan untuk biodiesel dan lebih ramah lingkungan. Tujuan penelitian adalah untuk mendapatkan proses pembuatan biodiesel yang lebih efektif dan efisien yaitu dengan tahapan proses yang lebih sedikit sehingga akan mengurangi biaya produksi.

Pada penelitian ini reaksi interesterifikasi minyak kelapa sawit dengan metil asetat untuk menghasilkan metil ester dan triasetin, dilakukan dengan bio-katalis senyawa aromatic yaitu eugenol dan minyak kayu putih serta dengan katalis NaOH sebagai pembanding. Kondisi operasi penelitian adalah massa minyak kelapa sawit 250 gram, rasio molar minyak kelapa sawit:metil asetat adalah 1:6, suhu reaksi 60°C, kecepatan pengadukan 300 rpm, massa katalis 0,75% massa minyak kelapa sawit dan waktu reaksi (15, 30, 45, 60, dan 75 menit). Minyak kelapa sawit, metil asetat dan katalis direaksikan dalam labu leher tiga sebagai reaktor sesuai dengan kondisi operasi penelitian. Setelah waktu reaksi tercapai, sample sebanyak 50 gram diambil untuk dilakukan proses pemisahan. Untuk interesterifikasi dengan katalis NaOH, proses pemisahan hasil dan sisa reaksi dilakukan dengan *water washing* dan dilanjutkan dengan destilasi pada suhu 105°C. Untuk interesterifikasi dengan bio-katalis senyawa aromatic, proses pemisahan produk dan sisa reaksi dilakukan dengan proses destilasi pada suhu 105°C untuk memisahkan metil asetat dan air. Setelah sample dipisahkan dilakukan analisa densitas, angka asam dan GC serta GC-MS untuk melihat komposisi produk yang terbentuk. Selain itu juga dilakukan simulasi dengan ChemDraw Professional 15.0 untuk menganalisa perilaku molecular dari senyawa yang bereaksi.

Hasil penelitian mendapatkan kondisi optimum proses interesterifikasi minyak kelapa sawit dengan bio-katalis eugenol 0,75% massa minyak, waktu reaksi 15 menit, rasio molar minyak kelapa sawit:metil asetat adalah 1:6, suhu reaksi 60°C dan kecepatan pengadukan 300 rpm. Didapatkan *crude yield* 83,16%, konversi reaksi trigliserida 39,4771%, konsentrasi FAME 55.695,4 mg/L, densitas 0,892 gr/mL (SNI 7182:2015 yaitu 0,85-0,89 gr/mL) dan angka asam 0,3 mg KOH/gr sample (SNI 7182:2015 yaitu maks. 0,5 KOH/gr sample). Hasil simulasi ChemDraw Professional 15.0 menunjukkan bahwa penggunaan bio-katalis eugenol menghasilkan perubahan jarak atom O pada trigliserida dan metil asetat dengan atom C pada eugenol paling besar dibanding

bio-katalis minyak kayu putih, perubahan panjang ikatan rata-rata C-C trigliserida dan metil asetat paling besar yaitu 1,664Å dan energy kinetic yaitu 3445,6577 kJ/mol. Fungsi eugenol selain sebagai bio-katalis juga berfungsi sebagai pelarut reaktan. Hal ini diketahui dari hasil simulasi dimana terjadi perubahan moment dipole sebelum dan sesudah ditambahkan bio-katalis yaitu dari 3,9504 debye menjadi 4,7175 debye.

Kata kunci : *biodiesel, interesterifikasi, triasetin, eugenol, crude yield*



SUMMARY

Elvianto Dwi Daryono, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering Universitas Brawijaya, September 2021, *Interesterification Process of Palm Oil into Biodiesel (Fatty Acid Methyl Esters) with Aromatic Compound Bio-catalysts*. Promotor: Ir. I.N.G. Wardana, M. Eng., Ph.D, Co-promotor 1: Prof. Dr. Ir. Chandrawati Cahyani, MS and Co-promotor 2: Dr. Eng. Nurkholis Hamidi, ST., M. Eng.

The process of making biodiesel that has been carried out so far is the transesterification process with glycerol as a by-product. Glycerol is a by-product must be separated from biodiesel because it is an impurity that interferes with the use of biodiesel. A more effective process for making biodiesel is the interesterification process, where the by-product produced is triacetin which does not require a separation process because it functions as a bio-additive for biodiesel. The interesterification process that has been carried out uses homogeneous or heterogeneous catalysts that need a separation process at the end of the reaction. Organic aromatic compounds are a choice for more efficient catalysts because there is no need for a separation process at the end of the reaction because they function as antioxidants for biodiesel and are more environmentally friendly. The research aim of the research is to obtain a more effective and efficient biodiesel production process, with fewer process steps so that it will reduce production costs.

In this study, the reaction of interesterification of palm oil with methyl acetate to produce methyl ester and triacetin was carried out with bio-catalysts of aromatic compounds, namely eugenol and eucalyptus oil as well as with NaOH catalyst as a comparison. The operating conditions of the study were 250 grams of palm oil mass, palm oil: methyl acetate molar ratio was 1:6, reaction temperature 60oC, stirring speed 300 rpm, catalyst mass 0.75% palm oil mass and reaction time (15,30,45,60, and 75 minutes). Palm oil, methyl acetate and catalyst were reacted in a three-neck flask as a reactor according to the operating conditions of the study. After the reaction time is reached, a sample of 50 grams is taken for the separation process. For interesterification with NaOH catalyst, the process of separating the product and the rest of the reaction was carried out by water washing and followed by distillation at a temperature of 105oC. For interesterification with bio-catalysts of aromatic compounds, the process of separating the product and the rest of the reaction was carried out by a distillation process at a temperature of 105oC to separate methyl acetate and water. After the samples were separated, analysis of the density, acid number and GC and GC-MS was carried out to see the composition of the products formed. In addition, simulations were also carried out with ChemDraw Professional 15.0 to analyze the molecular behaviour of the reacting compounds.

The results obtained the optimum conditions for the palm oil interesterification process with eugenol bio-catalyst 0.75% oil mass, reaction time 15 minutes, palm oil: methyl acetate molar ratio was 1:6, reaction temperature 60oC and stirring speed 300 rpm. The crude yield is 83.16%, the conversion of triglyceride reactions is 39.4771%, the FAME concentration is 55.695.4 mg/L, the density is 0.892 gr/mL (SNI 7182:2015 is 0.85-0.89 gr/mL) and the acid number is 0.85-0.89 gr/mL. 0.3 mg KOH/gr sample (SNI 7182:2015 that is max. 0.5 KOH/gr sample). The simulation results of ChemDraw Professional 15.0 show that the use of eugenol bio-catalyst resulted in the largest change in O atomic distance in triglycerides and methyl acetate with C atoms in eugenol

compared to eugenol bio-catalyst, changes in the average bond length of CC triglycerides and methyl acetate were greatest, which is 1.664\AA and kinetic energy is 3445.6577 kJ/mol . The function of eugenol other than as a bio-catalyst also functions as a reactant solvent. This is known from the simulation results where there is a change in the dipole moment before and after the addition of bio-catalyst, from 3.9504 debyes to 4.7175 debyes.

Keywords: biodiesel, interesterification, triacetin, eugenol, crude yield





DAFTAR ISI

Halaman Sampul	i
Lembar Pengesahan	ii
Pernyataan Orisinalitas Disertasi	iii
Riwayat Hidup	iv
Ucapan Terima Kasih	v
Ringkasan	vi
Summary	viii
Kata Pengantar	x
Daftar Isi	xi
Daftar Tabel	xiv
Daftar Gambar	xvi
Daftar Lampiran	xx
Bab I Pendahuluan	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Identifikasi Masalah	4
1.3 Rumusan Masalah	4
1.4 Pembatasan Masalah	4
1.5 Tujuan Penelitian	5
1.6 Manfaat Penelitian	5
Bab II Tinjauan Pustaka	6
2.1 Minyak Kelapa Sawit	7
2.2 Metil Asetat	8
2.3 <i>Cajuput Oil</i>	9
2.4 Eugenol	10
2.5 Reaksi Interesterifikasi Trigliserida dan Alkil Asetat	13
2.6 Triasetin	22
2.7 Bio-katalis Senyawa Aromatik	27

2.8 Proses Pembuatan Biodiesel	31
dengan Katalis Basa	
2.9 Proses Pembuatan Biodiesel	33
dengan Katalis Magnet	
2.10 Teori Orbital Molekul	35
2.11 Energi Potensial dan Energi Kinetik	38
2.12 <i>Entalphy of Reaction</i>	40
Bab III Kerangka Konsep	42
Penelitian	
3.1 Bio-katalis Senyawa Aromatik	42
3.2 Pengaruh Medan Magnet Senyawa Aromatik	43
3.3 Hipotesa	47
3.4 Kebaruan Penelitian	47
Bab IV Metode Penelitian	49
4.1 Metode yang Dilakukan	49
4.2 Rancangan Penelitian	49
4.3 Peralatan dan Material	50
4.4 Tahapan Penelitian	50
4.5 Diagram Alir Penelitian	55
4.6 Deskripsi Peralatan	57
4.7 Simulasi Perilaku Molekuler dengan Software ChemDraw Professional 15.0	60
Bab V Hasil dan Pembahasan	63
5.1 Persiapan Bahan	63
5.2 Reaksi Interesterifikasi dengan Katalis KOH	63



5.3 Reaksi Interesterifikasi dengan Katalis NaOH dan Bio-katalis Senyawa Aromatik	64
5.4 Hasil Analisa Densitas dan Angka Asam	66
5.5 Hasil Analisa GC (<i>Gas Chromatography</i>) dan GC-MS (<i>Gas Chromatography-Mass Spectrum</i>)	68
5.6 Simulasi Perilaku Molekuler dengan Software ChemDraw Professional 15.0	86
5.7 Perhitungan Energi Kinetik dan Energi Potensial dengan Software ChemDraw Professional 15.0	92
5.8 Perhitungan $\Delta H^0_{\text{reaksi}}$ untuk Menentukan Reaksi Eksotermis atau Endotermis	95
5.8 Konversi Reaksi Trigliserida	98
Bab VI Kesimpulan dan Saran	103
6.1 Kesimpulan	103
6.2 Saran-saran	103
Daftar Pustaka	105
Lampiran	113

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Standard Kualitas Biodiesel Indonesia	6
Tabel 2.2 Susunan Trigliserida pada CPO	7
Tabel 2.3 Susunan <i>Fatty Acid</i> pada CPO	7
Tabel 2.4 Sifat Fisika Metil Asetat	8
Tabel 2.5 Karakterisasi Campuran Solar dan Minyak Kayu Putih	9
Tabel 2.6 Sifat Fisika Bahan Bakar Diesel dengan Penambahan Bio-aditif	12
Tabel 2.7 Karakteristik Triasetin	22
Tabel 2.8 Standard Kualitas Biodiesel Berdasarkan ASTM D6751-12 dan EN 14214:2012	22
Tabel 2.9 Kandungan Triasetin Maksimum pada Biodiesel Berdasarkan Standard Mutu ASTM D6751 dan EN 14214	27
Tabel 2.10 Perubahan Panjang Ikatan C – O	33
Tabel 2.11 Sifat Magnet Katalis dan Yield Biodiesel yang Dihasilkan	35
Tabel 3.1 Data Energi Ikatan Molekul	44
Tabel 5.1 Hasil Analisa Densitas dan Angka Asam	66
Tabel 5.2 Komposisi Metil Ester Hasil Analisa GC pada Reaksi Interesterifikasi Minyak Kelapa Sawit dengan Katalis NaOH pada Waktu Reaksi 60 Menit	68
Tabel 5.3 Komposisi Metil Ester Hasil Analisa GC pada Reaksi Interesterifikasi Minyak Kelapa Sawit dengan Bio-katalis Minyak Kayu Putih pada Waktu Reaksi 75 Menit	69

Tabel 5.4 Komposisi Metil Ester Hasil Analisa GC pada Reaksi Intersterifikasi Minyak Kelapa Sawit dengan Bio-katalis Eugenol pada Waktu Reaksi 15 menit	70
Tabel 5.5 Komposisi Produk Reaksi Hasil Analisa GC-MS pada Reaksi Interesterifikasi Minyak Kelapa Sawit dengan Bio-katalis Eugenol pada Waktu Reaksi 15 Menit	71
Tabel 5.6 Komposisi Produk Reaksi Hasil Analisa GC-MS pada Reaksi Interesterifikasi Minyak Kelapa Sawit dengan Bio-katalis Minyak Kayu Putih pada Waktu Reaksi 75 Menit	77
Tabel 5.7 Panjang ikatan C-C sebelum dan sesudah penambahan bio-katalis eugenol	87
Tabel 5.8 Panjang ikatan C-C sebelum dan sesudah penambahan sineol (minyak kayu putih)	89
Tabel 5.9 Panjang ikatan C-C sebelum dan sesudah penambahan katalis NaOH	89
Tabel 5.10 Perhitungan energy total komponen dengan software ChemDraw	92
Tabel 5.11 Perhitungan energy kinetik dan moment dipole pada komponen dengan ChemDraw	93
Tabel 5.12 Energi Gap untuk trigliserida dan metil asetat	94

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Hubungan Komposisi Bio-aditif <i>Cajuput Oil</i> dengan Kecepatan Konsumsi <i>Fuel Solar</i>	10
Gambar 2.2 Molekul Sineol	10
Gambar 2.3 Model Struktur Kimia <i>Diesel Fuel</i> dengan Penambahan Bio-aditif	11
Gambar 2.4 Molekul Eugenol	12
Gambar 2.5 <i>Overall Reaction Transesterification</i> antara TG serta Metil Alkohol (Metanolisis) dimana R = Rantai Asam Lemak	13
Gambar 2.6 Reaksi Interesterifikasi Trigliserida dan Metil Asetat	14
Gambar 2.7 Hubungan Rasio Molar Minyak Jarak Pagar: Etil Asetat dengan Yield Biodiesel	15
Gambar 2.8 Hubungan Konsentrasi Katalis KOH dalam % Massa Minyak dengan Yield Biodiesel	16
Gambar 2.9 Hubungan antara Waktu Reaksi dan Yield Biodiesel dengan Variasi Suhu Reaksi	17
Gambar 2.10 Hubungan antara Waktu Reaksi dan Yield Metil Oleat dengan Variasi Suhu Reaksi	19
Gambar 2.11 Hubungan antara Waktu Pengadukan dengan Rendemen Biodiesel dengan Variasi Kecepatan Pengadukan	20
Gambar 2.12 Reaksi Penyabunan FFA dengan Katalis KOH	21
Gambar 2.13 Reaksi Hidrolisa Trigliserida dan Air	21
Gambar 2.14 Molekul Triasetin	22





Gambar 2.15 Hubungan antara Massa Triasetin dan Densitas Biodiesel dengan variasi Bahan Baku Biodiesel	23
Gambar 2.16 Hubungan antara Massa Triasetin dan Viskositas Biodiesel dengan variasi Bahan Baku Biodiesel	24
Gambar 2.17 Hubungan antara Massa Triasetin dan Angka Setana Biodiesel dari Minyak <i>Rapiseed</i>	25
Gambar 2.18 Hubungan antara Waktu dan Konduktivitas dengan Variasi Perbandingan Massa Metil Oleat:Triasetin	26
Gambar 2.19 Hubungan antara Temperatur dengan Konsentrasi Hidrogen dengan Variasi Perbandingan Massa Katalis	28
Gambar 2.20 Hubungan antara Konsentrasi Katalis dengan Waktu <i>Ignition Delay</i>	29
Gambar 2.21 Hubungan antara Waktu Reaksi dengan Volume Hidrogen yang Terbentuk dengan Variasi Jenis Katalis	30
Gambar 2.22 Hubungan antara Waktu Reaksi dengan Konsentrasi Hidrogen yang Terbentuk dengan Variasi Perbandingan Massa Katalis	30
Gambar 2.23 Hubungan antara Waktu Reaksi dengan Konsentrasi Hidrogen yang Terbentuk dengan Variasi Jenis Katalis	31
Gambar 2.24 <i>Transesterification Reaction Mechanism with Base Catalyst</i>	32
Gambar 2.25 <i>Transesterification Reaction Mechanism menggunakan Katalis Magnet CuFe₂O₄</i>	34



Gambar 2.26 Hubungan antara Waktu Reaksi dan Yield	35
Biodiesel dengan katalis $K_2CO_3/\gamma-Al_2O_3/(0,3)Fe_3O_4$	
Gambar 2.27 Ikatan Valensi Molekul Oksigen (O_2)	36
Gambar 2.28 Orbital Molekul Oksigen (O_2)	36
Gambar 2.29 Molekul Karbon Monoksida	37
Gambar 2.30 Orbital Molekul CO	37
Gambar 2.31 Hubungan Jarak Atom dengan Energi Interaksi/Energi Potensial	39
Gambar 3.1 Reaksi Interesterifikasi 3 Tahap Trigliserida dan Metil Asetat	42
Gambar 3.2 Struktur geometri eugenol ($C_{10}H_{12}O_2$)	42
Gambar 3.2 Struktur geometri sineol ($C_{10}H_{18}O$)	43
Gambar 3.4 Struktur molekul trigliserida	43
Gambar 3.5 Orbital Molekul C=O	45
Gambar 3.6 Spin elektron pada medan magnet	45
Gambar 3.7 Struktur delokalisasi senyawa aromatic (benzene)	45
Gambar 3.8 Mekanisme Reaksi Interesterifikasi Trigliserida dan Metil Asetat dengan Bio-katalis Eugenol Membentuk Monoasetin dan Metil Ester	46
Gambar 3.9 Kerangka Konsep Penelitian	47
Gambar 4.1 Diagram Alir Proses Interesterifikasi Minyak Kelapa Sawit dengan Katalis KOH	55
Gambar 4.2 Diagram alir proses dengan katalis NaOH	56
Gambar 4.3 Diagram Alir Proses Interesterifikasi Minyak Kelapa Sawit dengan Bio-katalis	56
Gambar 4.4 Gambar Reaktor Interesterifikasi	57
Gambar 4.5 Gambar alat destilasi	58
Gambar 4.6 Corong pemisah	59



Gambar 4.7 Struktur Molekul Trigliserida, Metil Asetat dan Eugenol dalam 2 Dimensi	60
Gambar 4.8 Struktur Molekul Trigliserida, Metil Asetat dan Eugenol dalam 3 Dimensi	61
Gambar 5.1 Hubungan kecepatan pengaduk (rpm) dengan yield (%) pada proses interesterifikasi dengan variasi % massa katalis KOH	63
Gambar 5.2 Hubungan waktu reaksi (menit) dan yield (%) untuk variasi jenis katalis	64
Gambar 5.3 Hubungan waktu reaksi (menit) terhadap konsentrasi FAME (ppm dengan variasi jenis katalis	65
Gambar 5.4 Kromatogram FAME hasil analisa GC untuk penambahan katalis NaOH pada waktu reaksi 60 menit	68
Gambar 5.5 Kromatogram GC metil ester dengan penambahan bio-katalis minyak kayu putih pada waktu reaksi 75 menit	69
Gambar 5.6 Kromatogram GC metil ester dengan penambahan bio-katalis eugenol pada waktu reaksi 15 menit	70
Gambar 5.7 Reaksi pemecahan metil oleat oleh bio-katalis germacrene-D menjadi metil nonanoat dan 3,3-(ethylenedioxy) decanal	76
Gambar 5.8 Reaksi pemecahan metil linoleate oleh bio-katalis germacrene-D menjadi metil heksanoat dan 2,4-decadienal	76
Gambar 5.9 Reaksi pemecahan metil linoleat oleh alpha pinene menjadi metil heksanoat dan 2,4-decadienal	85



Gambar 5.10 Reaksi pemecahan metil oleat oleh phenol menjadi metil nonanoat dan 11-dodecen-1-al	85
Gambar 5.11 Jarak atom O pada trigliserida dan metil asetat terhadap atom C pada eugenol	86
Gambar 5.12 Jarak atom O pada trigliserida dan metil asetat terhadap atom C pada sineol (minyak kayu putih)	88
Gambar 5.13 Molekular dinamik trigliserida dan metil asetat dengan penambahan sineol (minyak kayu putih)	91
Gambar 5.14 Reaksi Interesterifikasi <i>Overall</i> Trigliserida dan Metil Asetat	92
Gambar 5.15 <i>Overall Reaction Interesterification</i>	95
Gambar 5.16 Hubungan waktu reaksi (menit) terhadap konsentrasi FAME (%) dengan variasi jenis katalis	98
Gambar 5.17 Hubungan waktu reaksi (menit) terhadap konversi reaksi trigliserida (%) dengan variasi jenis katalis	101

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1: Menghitung % FFA pada minyak kelapa sawit	113
Lampiran 2: Menghitung kadar air minyak kelapa sawit	114
Lampiran 3: Menghitung kebutuhan reaktan dan katalis	115
untuk reaksi interesterifikasi	
Lampiran 4: Menghitung crude yield pada reaksi	116
interesterifikasi dengan massa katalis KOH 0,25% pada	
kecepatan pengaduk 200 rpm	
Lampiran 5: Menghitung crude yield pada reaksi	117
interesterifikasi dengan bio-katalis KOH 0,75% massa	
minyak pada waktu reaksi 15 menit	
Lampiran 6: Menghitung densitas sample pada	118
interesterifikasi minyak kelapa sawit dengan bio-katalis	
minyak kayu putih pada waktu reaksi 15 menit	
Lampiran 7: Menghitung angka asam sample pada	117
interesterifikasi minyak kelapa sawit dengan bio-katalis	
minyak kayu putih pada waktu reaksi 15 menit	
Lampiran 8: Menghitung konsentrasi FAME dari mg/L atau	118
ppm menjadi % massa pada interesterifikasi minyak kelapa	
sawit dengan bio-katalis eugenol putih pada waktu reaksi 15	
menit	
Lampiran 9: Menghitung konversi reaksi trigliserida pada	121
interesterifikasi dengan bio-katalis eugenol pada waktu	
reaksi 15 menit	
Lampiran 10: Simulasi perilaku molecular dengan	124
ChemDraw Professional 15.0	
Lampiran 11: Hasil analisa GC (<i>Gas Chromatography</i>) dan	128
GC-MS (<i>Gas Chromatography – Mass Spectrum</i>)	



BAB I PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Simpanan minyak Indonesia menipis, sehingga produksi akan semakin menurun hingga tahun 2025. Untuk mengatasi hal tersebut pemerintah melakukan import minyak bumi dimulai pada 2007 serta semakin berkembang sampai pada 2025. Energi terbarukan sangat dibutuhkan untuk mengatasi masalah tersebut. Biodiesel merupakan bioenergi yang telah dikembangkan dan telah mulai dibuat sebagai bahan bakar berkelanjutan dengan berbagai manfaat dibanding dengan bahan bakar yang ada dipasaran saat ini. Keunggulan biodiesel antara lain adalah tidak akan pernah habis, tidak berbahaya bagi ekosistem dan dapat digunakan sebagai bahan bakar tanpa perubahan motor.

Potensi minyak kelapa sawit untuk *raw material* biodiesel sangat besar karena harga paling murah, mudah diproduksi dan berlimpah persediannya. Pada tahun 2013-2015, area penanaman sawit meningkat dari $10,5 \cdot 10^{10}$ m² menjadi $11,3 \cdot 10^{10}$ m² dan hasilnya meningkat dari $27,8 \cdot 10^6$ ton menjadi $31,1 \cdot 10^6$ ton (Ditjenbun 2015). Tahun 2016, $3,4 \cdot 10^6$ ton *palm oil* dipakai sebagai bahan baku biodiesel (McDonald dan Rahmanulloh, 2018). Rencana Umum Energi Nasional (RUEN) pada program jangka pendek dan jangka panjang menargetkan produksi BBN $15,6 \cdot 10^6$ KL untuk 2015 serta $54,2 \cdot 10^6$ KL untuk 2050, juga pencampuran 30% biodiesel (Perpres No. 22 tahun 2017). Pemerintah Indonesia terus merubah prioritas awal yang mengeksplor hanya bahan baku minyak sawit mentah menjadi eksportir hasil pengolahan komoditi yang lainnya contohnya biodiesel.

Proses yang umum digunakan untuk proses produksi biodiesel yaitu reaksi transesterifikasi. Kekurangan dari reaksi ini adalah bahwa *by-product* gliserol/gliserin yang dihasilkan perlu penanganan lebih lanjut. Adanya gliserol dalam biodiesel akan mengganggu kerja motor. Alternatif lain untuk pembuatan biodiesel adalah mengubah jenis reaktan yaitu dari alkohol menjadi non alkohol (interesterifikasi). Pada sintesa biodiesel rute alkohol, metanol digunakan untuk menyuplai gugus alkil sedangkan jalur tanpa alkohol peran metil alkohol disubstitusi oleh alkil asetat untuk penyedia gugus alkil. Dari persamaan reaksi yang terjadi, *by-product* adalah triasetin sedangkan reaksi alkohol dengan hasil samping gliserol (Casas *et al.*, 2011). Triasetin merupakan bahan aditif pada makanan seperti permen, minuman olahan susu, permen karet dan minuman berperisa. Bahkan sebagai solvent didalam industri minyak wangi, tinta cetak, plastisizer untuk resin selulosa, polimer dan co-polimer,

juga sebagai bio-aditif pada mesin mobil sehingga menaikkan nilai ekonomi biofuel dan gliserol itu sendiri. Fungsi triasetin sebagai bio-aditif bahan bakar adalah untuk mencegah knocking pada mesin mobil dan mengurangi polusi udara (Calero *et al.*, 2015; Melero *et al.*, 2010). Blending 10% triasetin dengan biodiesel masih didapatkan biodiesel yang memenuhi kualitas (Casas *et al.*, 2010).

Beberapa penelitian pembuatan biodiesel dengan proses interesterifikasi telah dilakukan. Interesterifikasi dengan katalis heterogen (Ribeiro *et al.*, 2017; Interrante *et al.*, 2018; Ribeiro *et al.*, 2020; Galia *et al.*, 2014; Nunes dan Castilhos, 2020; Tian *et al.*, 2018). Interesterifikasi dengan katalis homogen (Casas *et al.*, 2011; Chuepeng dan Komintarachat, 2020). Interesterifikasi dengan katalis enzim lipase (Xu *et al.*, 2005; Du *et al.*, 2004; Usai *et al.*, 2010; Nguyen *et al.*, 2018) dan dengan gelombang ultrasonic (Tavares *et al.*, 2017). Interesterifikasi juga dilakukan dengan kondisi superkritis (Saka dan Isayama, 2009; Tan *et al.*, 2010; Goembira *et al.*, 2012), dengan gelombang ultrasonik (Maddikeri *et al.*, 2013), dengan kavitasi hidrodinamik (Maddikeri *et al.*, 2014). Penelitian proses interesterifikasi umumnya selalu menggunakan katalis untuk mempercepat reaksi, kecuali pada kondisi superkritis, menggunakan suhu dan tekanan tinggi. Pada proses dengan katalis homogen harus ada tahap reaksi netralisasi dan dilanjutkan pemisahan hasil reaksi, sedangkan dengan katalis heterogen harus ada tahap aktivasi dan pemisahan katalis sehingga memperpanjang tahapan proses yang tentunya akan menambah biaya produksi. Interesterifikasi minyak kelapa sawit pada kondisi superkritis tanpa katalis dilakukan pada suhu tinggi (340-420°C) dan tekanan tinggi (15-25 MPa) dengan rasio molar minyak:metil asetat yaitu 20-60 (Tan *et al.*, 2010 ; Tan *et al.*, 2011). Kondisi operasi dan alat pada proses interesterifikasi superkritis tersebut sudah barang tentu membutuhkan biaya yang mahal dan standar keamanan proses yang tinggi.

Penelitian proses interesterifikasi yang telah dilakukan menggunakan katalis yang harganya relatif mahal dengan efisiensi yang relatif rendah. Dari kekurangan proses interesterifikasi yang telah dilakukan selama ini, maka untuk mengatasi masalah tersebut digunakan katalis senyawa aromatik organik yang bisa berfungsi untuk mempercepat reaksi interesterifikasi. Senyawa aromatik seperti benzene (C₆H₆) mengandung gugus aromatik yang mempunyai orbital molekul terdelokalisasi. Delokalisasi elektron menyebabkan senyawa bersifat stabil dan tidak reaktif (inert). Delokalisasi elektron pada senyawa aromatik juga menyebabkan terbentuknya medan magnet yang akan mempengaruhi kestabilan senyawa-senyawa yang bersifat polar. Proses pembuatan biodiesel dengan memanfaatkan sifat magnet dari katalis heterogen memberikan hasil yang cukup memuaskan. Pada penelitian

transesterifikasi minyak goreng bekas dengan memanfaatkan sifat magnet katalis CuFe_2O_4 mendapatkan yield 93% pada waktu reaksi 90 menit (Ali *et al.*, 2020). Penelitian simultan transesterifikasi dan esterifikasi menggunakan katalis magnet $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{SiO}_2$, mendapatkan konversi 93% pada waktu reaksi 6 jam (Xie dan Wang, 2020). Produksi biodiesel dari transesterifikasi minyak biji *Pistacia chinensis* dengan katalis magnet selulosa, mendapatkan yield 93,1% pada temperature 60°C serta lama reaksi 80 menit (Han *et al.*, 2016). Junior *et al.*, (2018) mendapatkan yield 65,73% pada transesterifikasi minyak bunga matahari dengan katalis magnet $\text{K}_2\text{CO}_3/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ pada waktu reaksi 240 menit.

Penelitian proses produksi biodiesel dengan memanfaatkan bio-katalis senyawa aromatik belum pernah dilakukan. Selain bersifat ramah lingkungan dan harganya yang relatif murah, penggunaan bio-katalis senyawa aromatik tidak memerlukan pretreatment rumit dan panjang seperti katalis heterogen. Senyawa aromatik organik yang terikut di dalam biodiesel tetap aman, sebab justru akan bersifat antioksidan yang akan menaikkan bilangan oksidasi. Jika ingin dipisahkan juga cukup mudah yaitu bersama dengan sisa metil asetat pada akhir reaksi dengan co-distilasi. Penggunaan bio-katalis senyawa aromatik juga untuk mengatasi keterbatasan perpindahan massa karena kelarutan kedua reaktan yang berbeda. Berdasarkan uraian diatas peneliti mengusulkan proses produksi biodiesel dengan reaksi interesterifikasi menggunakan bio-katalis senyawa aromatic. Metode yang dilakukan yaitu dengan metode eksperimen skala laboratorium dan simulasi dengan software untuk mengetahui perilaku molecular senyawa-senyawa yang terlibat dalam reaksi interesterifikasi.

Novelty dari penelitian ini adalah penggunaan senyawa aromatic organik sebagai pelarut reaktan dan bio-katalis untuk proses interesterifikasi minyak kelapa sawit menghasilkan FAME, dimana hal ini belum pernah dilakukan. Penelitian yang pernah dilakukan adalah penambahan senyawa aromatic organik yang bersifat antioksidan seperti eugenol, kurkumin, β -karoten dll langsung pada biodiesel sebagai bio-aditif dan bukan sebagai bio-katalis pada proses pembuatan biodiesel (Varatharajan dan Pushparani, 2020). Penggunaan eugenol sebagai bio-katalis mempunyai banyak kelebihan yaitu bersifat ramah lingkungan, mudah didapatkan, bersifat antioksidan dan tanpa proses pemisahan, sehingga bisa mempersingkat tahapan proses pembuatan biodiesel dan akhirnya bisa mengurangi biaya produksi. Dengan proses interesterifikasi minyak kelapa sawit menjadi biodiesel, maka produk samping reaksi yaitu triasetin dan katalis yaitu senyawa aromatic akan bersinergi memperbaiki kualitas biodiesel yang dihasilkan.

1.2. Identifikasi Masalah

Umumnya, pembuatan biodiesel menggunakan metode esterifikasi dan transesterifikasi. Namun metode tersebut memiliki kelemahan yaitu sulit untuk memisahkan antara produk utama yaitu metil ester serta *by-product* gliserol sehingga harus ada tahap pemisahan tersendiri yang menambah biaya produksi. Dari masalah tersebut kemudian dikembangkan pembuatan biodiesel dengan rute non alkohol (interesterifikasi), dimana produk utama dan produk samping saling bersinergi untuk memperbaiki kualitas biodiesel yang dihasilkan. Proses interesterifikasi yang telah dilakukan sebagian besar menggunakan katalis homogen/heterogen untuk mempercepat reaksi. Pada proses tersebut harus ada tahap netralisasi katalis dan pemisahan sisa katalis dari hasil reaksi. Belum lagi jika sisa reaksi pemisahan katalis tersebut dibuang akan menyebabkan pencemaran lingkungan. Penggunaan bio-katalis senyawa aromatik akan mengatasi kekurangan katalis yang digunakan pada proses interesterifikasi yaitu untuk meminimalkan proses pemisahan katalis dan meningkatkan kelarutan dari bahan yang direaksikan.

1.3 Rumusan Masalah

Perumusan masalah pada penelitian yaitu :

1. Bagaimanakah pengaruh jenis katalis yaitu katalis NaOH dan bio-katalis senyawa aromatic pada proses interesterifikasi minyak kelapa sawit menjadi FAME (*Fatty Acid Methyl Esters*) ?
2. Bagaimanakah efek waktu reaksi terhadap yield biodiesel pada proses interesterifikasi?
3. Bagaimanakah perilaku molecular katalis terhadap proses pembentukan biodiesel dan triasetin pada proses interesterifikasi ?

1.4 Pembatasan Masalah

Proses interesterifikasi dilakukan dengan eksperimen dalam skala laboratorium. Peralatan utama yang digunakan yaitu *hot plate* dengan pengaduk magnet serta labu leher tiga sebagai reaktor yang dilengkapi kondensor untuk refluks. Batasan masalah penelitian adalah:

1. Bio-katalis yang digunakan adalah minyak kayu putih dengan konsentrasi sineol 28,84%, tetapi untuk simulasi dengan ChemDraw yang digunakan adalah sineol 100% yang merupakan komponen terbesar minyak kayu putih.

2. Pada proses interesterifikasi tidak dilakukan kontrol suhu, karena selama proses suhu sudah konstan 60°C karena adanya perubahan fase dari metil asetat.
3. Secara stoikiometri rasio molar trigliserida:metil asetat adalah 1:3, tetapi pada proses ini digunakan rasio molar = 1:6. Reaksi bersifat reversible sehingga untuk menggeser kesetimbangan reaksi kearah produk digunakan metil asetat *excess* 100%.
4. Variabel waktu reaksi yaitu 15, 30, 45, 60 dan 75 menit. Tidak dilakukan pengukuran hasil pada waktu reaksi < 15 menit dan > 75 menit. Hal ini didasari dari kondisi optimum penelitian terdahulu yang mendapatkan reaksi kesetimbangan pada waktu reaksi antara 30 – 60 menit.

1.5 Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian adalah :

1. Membandingkan kinerja katalis basa dan bio-katalis senyawa aromatik terhadap yield dan konsentrasi FAME optimal yang didapatkan pada proses interesterifikasi.
2. Mendapatkan kondisi optimum yaitu jenis katalis dan waktu reaksi optimal pada proses interesterifikasi.
3. Mendapatkan konsep perilaku molecular katalis pada reaksi interesterifikasi minyak kelapa sawit menjadi biodiesel.

1.6 Manfaat Penelitian

Manfaat penelitian adalah mendapatkan metode pembuatan biodiesel yang lebih mudah, sederhana dan ekonomis yaitu proses interesterifikasi dengan tahapan proses yang lebih sedikit, waktu proses lebih singkat dan yield yang relatif tinggi.

BAB II
TINJAUAN PUSTAKA

Biodiesel sebagai bahan bakar terbarukan memiliki banyak kelebihan. Biodiesel tidak berbahaya bagi lingkungan, dapat diproduksi terus-menerus, dapat terdegradasi, ketersediaan bahan baku terjamin dan dari bahan baku yang tidak beracun (Ali *et al.*, 2020). Dari sifat fisik tersebut, polusi udara yang dihasilkan kecil sehingga bisa meminimalisir suhu udara tinggi yang disebabkan oleh gas CO₂ (Agarwal, 2007). Biodiesel adalah bioenergy yang bisa langsung digunakan maupun diblending dengan solar pada mesin diesel (Leung *et al.*, 2010).

Sebagai bahan baku biodiesel dipilih minyak kelapa sawit, karena harganya paling murah dan jumlahnya sangat berlimpah. Selain itu minyak kelapa sawit yang ada di pasaran memenuhi spesifikasi sebagai bahan baku biodiesel.

Tabel 2.1 Standard Kualitas Biodiesel Indonesia

Parameter	Satuan, min/maks	Persyaratan
Massa jenis pada 40°C	Kg/m ³	850-890
Viskositas kinematik pada 40°C	mm ² /s (cSt)	2,3-6,0
Angka setana	Min	51
Titik nyala (closed cup)	°C, min	100
Titik kabut , °C	°C, min	18
Korosi tembaga (3 jam pada 50°C)		Nomor1
Air dan sedimen	%-volume, maks	0,05
Abu tersulfatkan	%-massa, maks	0,02
Belerang	mg/kg, maks	50
Fosfor	mg/kg, maks	4
Angka asam	Mg-NaOH/g, maks	0,5
Gliserol bebas	%-massa, maks	0,02
Gliserin total	%-massa, maks	0,24
Kadar ester metil	%-massa, min	96,5
Angka iodium	%-massa (g-I ₂ /100 g), maks	115
Kestabilan oksidasi Periode induksi metode rancimat atau Periode induksi metode petro oksidasi	Menit	480
Monogliserida	%-massa, maks	0,8

(Sumber : SNI 7182-2015)

2.1 Minyak Kelapa Sawit

Tanaman kelapa sawit merupakan sumber minyak nabati yang potensial. Indonesia berperan sangat besar dalam industri kelapa sawit dunia. Minyak kelapa sawit memiliki kandungan *fatty acids* antara 50-80% (Departemen Perindustrian, 2007).

Tabel 2.2 Susunan Trigliserida pada CPO

Trigliserida	Jumlah (%)
Tripalmitin	3 – 5
Dipalmito – Stearine	1 – 3
Oleo – Miristopalmitin	0 – 5
Oleo – Dipalmitin	21 – 43
Oleo – Palmitostearine	10 – 11
Palmito – Diolein	32 – 48
Stearo – Diolein	0 – 6
Linoleo – Diolein	3 – 12

(Sumber : Ketaren,1986)

Tabel 2.3 Susunan *Fatty Acid* pada CPO (Marlina *et al.*, 2020)

Asam Lemak	Cn:db	Formula	Jumlah (%)	Berat Molekul (g/mol)
Asam Palmitat	16:0	$C_{16}H_{32}O_2$	40 – 47	256,4241
Asam Palmitoleat	16:1	$C_{16}H_{30}O_2$	0 – 0,6	254,4042
Asam Stearat	18:0	$C_{18}H_{36}O_2$	3 – 6	284,4772
Asam Oleat	18:1	$C_{18}H_{34}O_2$	36 – 44	282,4614
Asam Linoleat	18:2	$C_{18}H_{32}O_2$	6 – 12	280,4455
Asam Linolenat	18:3	$C_{18}H_{30}O_2$	0 – 0,5	278,4296

Pembuatan biodiesel menggunakan minyak kelapa sawit karena kandungan asam lemaknya yang besar serta termasuk *raw material* yang bisa diperbaharui. Penggunaan minyak bekas pakai/minyak jelantah sebagai bahan baku biodiesel membutuhkan *pretreatment* yang cukup panjang sebelum siap digunakan sebagai bahan baku biodiesel.

Minyak jelantah perlu proses netralisasi untuk menurunkan kadar FFA yang tinggi dimana syarat untuk bahan baku biodiesel FFA harus dibawah 3%, karena FFA akan berikatan dengan katalis basa yang akan mengurangi rendemen (Jansri, 2015; Pullen dan Saeed, 2015).

Minyak jelantah perlu proses pemanasan untuk menghilangkan kandungan airnya, dimana

syarat untuk baku biodiesel kadar air harus ≤ 6000 ppm (Pullen dan Saeed, 2015). Minyak jelantah biasanya berwarna keruh karena kandungan pengotor, sehingga perlu proses adsorpsi untuk menghilangkan pengotor dengan menggunakan adsorben seperti karbon aktif. Sedangkan minyak jarak merupakan jenis minyak yang memiliki sifat sangat beracun dalam bentuk *curcin* serta *phorbol esters* (Kumar dan Sharma, 2008).

2.2 Metil Asetat

Metil asetat adalah ester karboksilat dengan formula $\text{CH}_3\text{COOCH}_3$. Metil asetat memiliki sifat polar dan lipofilik yang buruk, sehingga metil asetat larut dalam air dan tidak larut dalam lemak/minyak. Metil asetat memiliki kelarutan sekitar 25% pada air pada suhu kamar, artinya pada suhu kamar 25% massa metil asetat akan larut dalam 100% massa air. Pada suhu air tinggi, kelarutannya jauh lebih tinggi. Metil asetat tidak stabil dengan adanya basa berair yang kuat atau asam berair.

Metil Asetat juga disebut metil ester asam asetat atau metil etanoat, termasuk dalam kelompok ester. Metil asetat adalah cairan berwarna netral dengan bau seperti ester. Untuk industri kimia, metil asetat banyak digunakan sebagai pelarut organik. Selain itu, metil asetat juga digunakan dalam industri farmasi, penghilang cat dan industri kosmetik. Metil asetat adalah senyawa organik (ester) yang biasanya berupa cairan tidak berwarna, berbau khas, larut dalam alkohol, kloroform dan eter serta larut dalam air. Metil asetat dapat dibuat dengan mereaksikan metanol dan asam asetat yang menghasilkan produk reaksi berupa metil asetat dan air.

Persamaan reaksi: $\text{CH}_3\text{OH} + \text{CH}_3\text{COOH} \rightarrow \text{CH}_3\text{COOCH}_3 + \text{H}_2\text{O}$

Tabel 2.4 Sifat Fisika Metil Asetat

Sifat Fisika	Keterangan
Wujud	Cair
Berat molekul	74,08 gr/mol
Densitas	0,92 gr/cm ³
Titik leleh	-98,05 °C
Titik didih	57 °C

(Sumber: www.sincelab.com/metilasetat)

2.3 Cajuput Oil

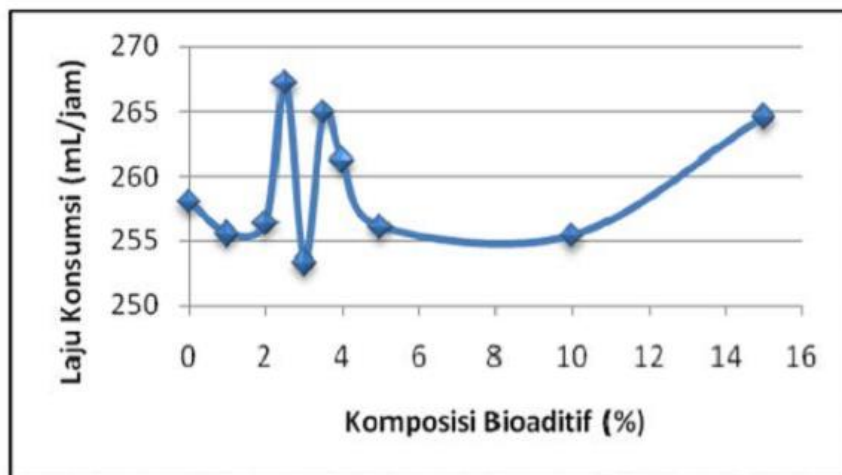
Minyak kayu putih (*cajuput oil*) adalah *essential oil* khas Indonesia. Minyak ini dikenal memiliki banyak khasiat, baik untuk obat luar maupun dalam, sehingga sangat dibutuhkan oleh berbagai kalangan masyarakat. Minyak kayu putih bersifat sebagai anti bakteri, anti jamur, anti serangga dan anti oksidan (Sharif *et al.*, 2019). 1,8-cineole adalah penyusun utama minyak kayu putih dengan rumus molekul $C_{10}H_{18}O$. Jika konsentrasi 1,8-cineole semakin tinggi maka semakin tinggi juga mutu *cajuput oil*. Analisa GC-MS pada *cajuput oil* menunjukkan komponen terbesar adalah sineol sebanyak 28,84%, dan komponen lainnya (Kadarohman, 2015).

Tabel 2.5 Karakterisasi Campuran Solar dan Minyak Kayu Putih (Kadarohman, 2009)

Parameter pengukuran	Persentase bioaditif (%)								Spesifikasi solar sesuai peraturan DIRJEN MIGAS	
	0	1	2	3	4	5	10	15	Min	Max
<i>Specific gravity</i> (25°C)	0,8450	0,8455	0,8456	0,8460	0,8465	0,8476	0,8503	0,8534	-	-
<i>Specific gravity</i> (15,55°C)	0.8502	0.8515	0.8517	0.8523	0.8527	0.8538	0.8562	0.8595	0,82	0,87
API Gravity	34.931	34.677	34.638	34.521	34.444	34.230	33.765	33.131	-	-
Viskositas	5.3976	5.4278	5.3079	5.2547	5.1706	5.2032	5.0682	4.8484	1,6	5,8
Titik Anilin (°F)	189.9	189.0	187.2	186.3	184.5	180.9	178.2	167.4	129,6	-
Indeks Diesel	66,335	65,540	64,843	64,313	63,548	61,922	60,170	55,461	-	-

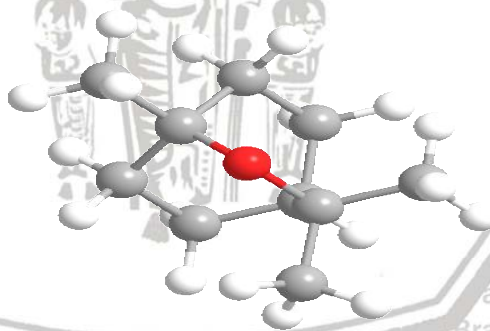
Pada Tabel 2.5 terlihat bahwa semua variasi % massa penambahan bio-aditif minyak kayu putih pada solar memenuhi spesifikasi solar sesuai peraturan Dirjen Migas. Nilai API Gravity sebanding dengan nilai kalor yang didapatkan. Viskositas solar yang ditambahkan bio-aditif mengalami penurunan dibanding solar murni. Menurunnya kekentalan memungkinkan proses pengabutan diperbesar sehingga pembakaran semakin cepat serta efisien, meskipun viabilitasnya untuk *lubricant* kecil. Kekentalan yang kecil menyebabkan penurunan terbentuknya karbon di motor dan peralatan injeksi lebih tahan lama. Keuntungan lain adalah penyebaran *fuel* semakin cepat sebab daya pompa untuk mengalirkan *fuel* dari tangki ke ruang bakar semakin berkurang.

Indeks solar berkaitan dengan komponen *fuel* (*aniline point*), berat jenis, serta API gravity, menunjukkan mutu penyalaan *fuel* setelah ditambahkan bio-aditif. Adanya bio-aditif minyak kayu putih pada solar menyebabkan penurunan indeks solar. Hal ini dapat menyebabkan penundaan yang lebih lama dalam pengapian bahan bakar.



Gambar 2.1 Hubungan Komposisi Bio-aditif *Cajuput Oil* dengan Kecepatan Konsumsi *Fuel* Solar (Kadarohman, 2009)

Dari Gambar 2.1 terlihat bahwa kondisi optimum didapatkan pada campuran solar dengan 3% minyak kayu putih sebagai bio-aditif, dimana menurunkan laju konsumsi solar 253,314 mL/jam. Penambahan 5% minyak kayu pada CPO mendapatkan nilai titik nyala yang memenuhi kualitas (Marlina *et al.*, 2020). Penambahan minyak kayu putih pada minyak kelapa akan menghasilkan warna nyala api biru yang lebih terang (Soebiyakto *et al.*, 2020).

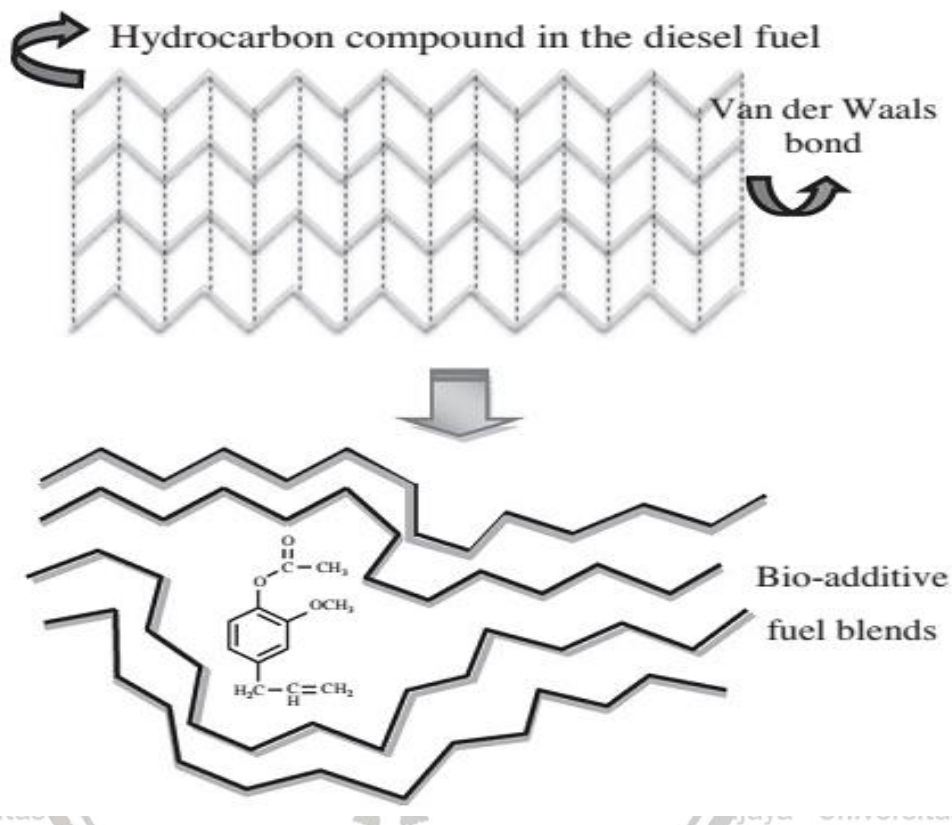


Gambar 2.2 Molekul Sineol

2.4 Eugenol

Eugenol merupakan komponen utama minyak cengkeh. Minyak cengkeh (*Syzygium aromaticum* L. *Myrtaceae*) yang diperoleh dengan proses hidrodestilasi, dari uji GC-MS mempunyai komposisi terbesar eugenol (88,58%) dan komponen lainnya (Chaieb *et al.*, 2007). Eugenol dengan rumus molekul $C_{10}H_{12}O_2$ mempunyai banyak fungsi misalkan di industri obat-obatan, industri pangan, industri obat hama tanaman nabati, industri pengemas dan lain-lain (Towaha, 2012). Pada industri kimia eugenol digunakan untuk antioksidan

alami yaitu menggantikan antioksidan sintetis yang diduga bersifat karsinogenik pada manusia (Daryono, 2015). Senyawa eugenol dan turunannya mempunyai sifat antioksidan yang kuat (Ogata *et al.*, 2000). Campuran eugenol + minyak serih wangi 0,1% dapat menurunkan laju konsumsi spesifik solar 7,55% (Setyaningsih *et al.*, 2018). Penambahan 0,2% eugenol pada solar memberikan keluaran emisi gas NO_x yang lebih rendah dibandingkan dengan penambahan minyak cengkeh pada uji kecepatan mesin 2500 rpm (Kadarohman *et al.*, 2012).



Gambar 2.3 Model Struktur Kimia Diesel Fuel dengan Penambahan Bio-aditif (Kadarohman *et al.*, 2012)

Gambar 2.3 memperlihatkan model struktur kimia bahan bakar solar dengan penambahan bio-aditif. Struktur besar dari eugenol atau eugenol asetat pada bio-aditif dapat mengurangi kekuatan ikatan Van der Walls pada bahan bakar diesel dan rantai karbon. Adanya kandungan oksigen pada struktur molekul bio-aditif akan menambah efisiensi proses pembakaran bahan bakar (Kadarohman *et al.*, 2012).

Tabel 2.6 Sifat Fisika Bahan Bakar Diesel dengan Penambahan Bio-aditif

Karakteristik Fisika	S1	S2	S3	S4
Spesifik gravity	0,85	0,85	0,85	0,84
Viskositas (cSt)	4,34	4,32	4,43	4,35
Densitas (kg/m ³)	840	840	850	840
Flash point (°C)	76	77	78	78
Angka Setana	53	54	51	54
Heating value (kJ/g)	45,23	45,37	45,41	45,36

Sumber: Kadarohman *et al.*, 2012

Keterangan:

S1 = Bahan bakar diesel

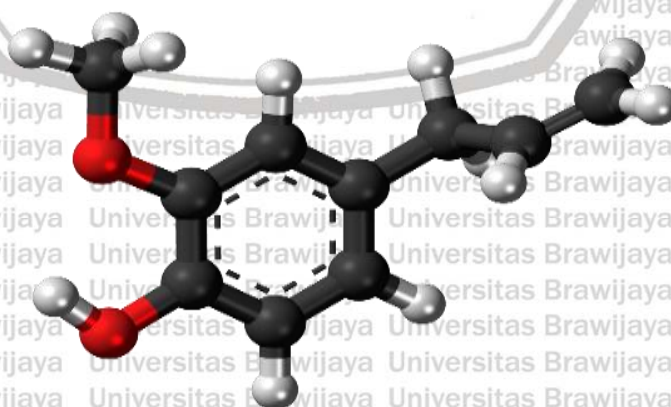
S2 = Bahan bakar diesel + 0,2% minyak cengkeh

S3 = Bahan bakar diesel + 0,2% eugenol

S4 = Bahan bakar diesel + eugenol asetat

Pada Tabel 2.6 terlihat bahwa untuk nilai viskositas semua variasi penambahan bio-aditif memenuhi standard biodiesel SNI 7182:2015 yaitu 2,3-6,0 cSt. Untuk nilai densitas yang sesuai standard biodiesel SNI 7182:2015 (850 – 890 kg/m³) hanya S3 yaitu 850 kg/m³.

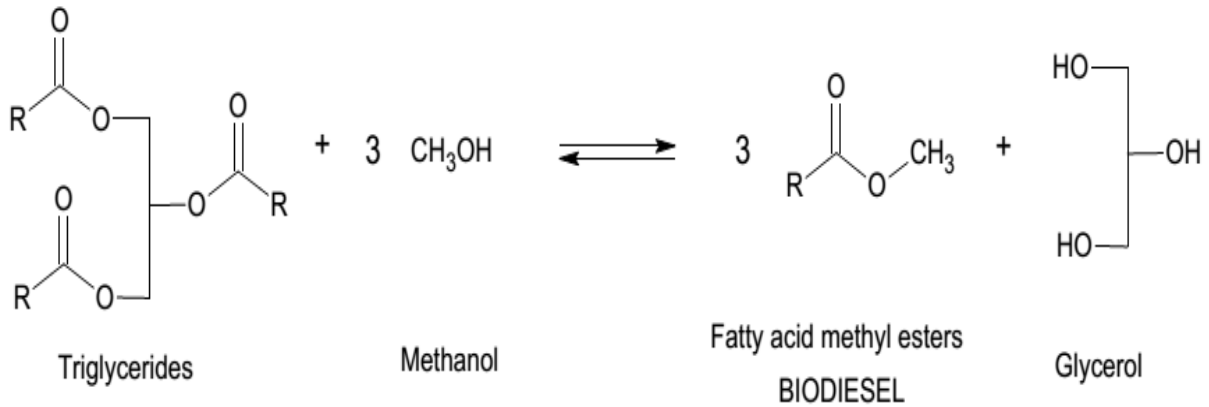
Untuk nilai angka setana semua variasi penambahan bio-aditif memenuhi standard biodiesel SNI 7182:2015 yaitu minimal 51.



Gambar 2.4 Molekul Eugenol

2.5 Reaksi Interesterifikasi Trigliserida dan Alkil Asetat

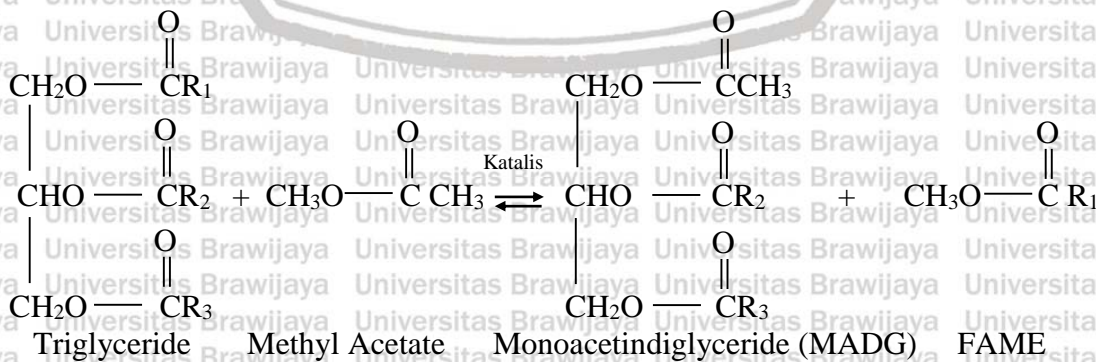
Umumnya, pembuatan biodiesel menggunakan metode transesterifikasi. Namun metode itu memiliki kelemahan yaitu kesulitan pemisahan produk utama biodiesel dan *by-product* gliserol. Gliserol jika masih terikut di biodiesel akan menyebabkan masalah pada waktu digunakan di mesin.



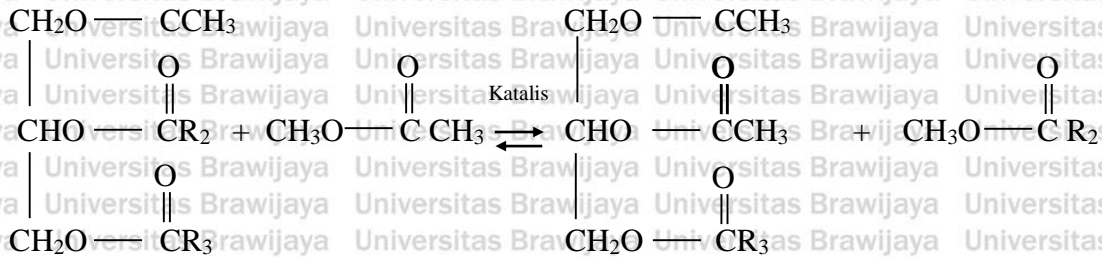
Gambar 2.5 Overall Reaction Transesterification antara TG serta Metil Alkohol (Metanolisis) dimana R = Rantai Asam Lemak (Casas *et al.*, 2011)

Oleh karena itu telah dikembangkan proses pembuatan biodiesel dengan rute non alkohol yaitu proses interesterifikasi dengan pereaksinya adalah senyawa alkil asetat (metil asetat, etil asetat, dll) dimana hasil sampingnya adalah triasetin. Persamaan reaksi interesterifikasi trigliserida dan metil asetat menghasilkan FAME dan triasetin meliputi 3 tahap reaksi seperti digambarkan berikut ini:

Reaksi tahap 1:

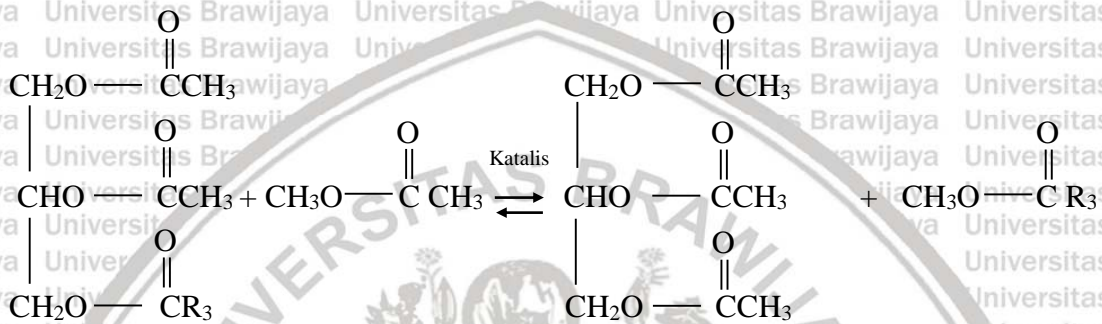


Reaksi tahap 2:



Monoacetindiglyceride Methyl Acetate Diacetinmonoglyceride(DAMG) FAME
(MADG)

Reaksi tahap 3:



Diacetinmonoglyceride Methyl Acetate Triacetin FAME
(DAMG)

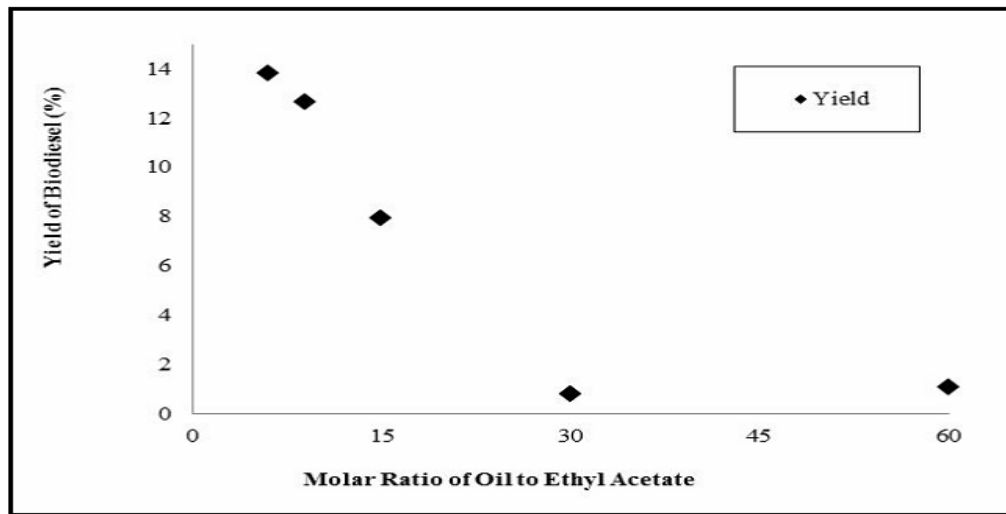
Gambar 2.6 Reaksi Interesterifikasi Trigliserida dan Metil Asetat

Adapun faktor-faktor yang memengaruhi proses interesterifikasi hampir sama dengan faktor-faktor yang memengaruhi proses transesterifikasi adalah kondisi dari dalam serta kondisi dari luar. Kondisi dari dalam adalah mutu *raw material* minyak yang digunakan misalnya kandungan air dan konsentrasi FFA. Sedangkan faktor dari luar yaitu:

- Perbandingan molar

Rasio molar sangat mempengaruhi produk yang dihasilkan. Untuk mendapatkan kesetimbangan reaksi ke arah produk dapat dilakukan dengan menambahkan *excess* alkil asetat (Casas *et al.*, 2011). Rasio molar stokiometri untuk minyak: metil asetat adalah 3:1 untuk mendapatkan 3 mol FAME dan 1 mol triasetin. Pada reaksi tersebut menggunakan metil asetat berlebih agar reaksi bergeser ke arah produk karena reaksi interesterifikasi merupakan reaksi bolak-balik (reversibel) (Casas *et al.*, 2011). Pada interesterifikasi dengan katalis basa, direkomendasikan menggunakan rasio molar 1:12 antara minyak dan metil asetat untuk mendapat yield ester yang maksimum (Casas *et al.*, 2011; Casas *et al.*, 2013). Kusumaningtyas *et al.*, (2016) mendapatkan yield 13,79% pada interesterifikasi

minyak jarak pagar dengan perbandingan molar trigliserida:etil asetat = 1:6, katalis KOH 0,5% wt., waktu reaksi 6 jam dan suhu reaksi 70°C.



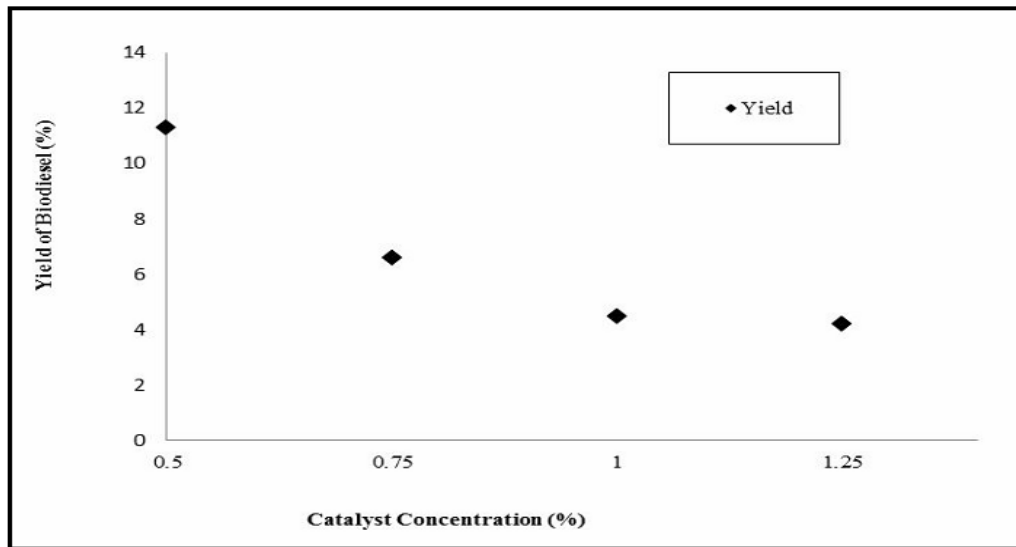
Gambar 2.7 Hubungan Rasio Molar Minyak Jarak Pagar:Etil Asetat dengan Yield Biodiesel (Kusumaningtyas *et al.*, 2016)

Chuepeng dan Komintarachat (2020) mendapatkan yield 77,5% pada interesterifikasi minyak goreng bekas dengan rasio molar etil asetat:minyak = 30:1. Proses interesterifikasi menggunakan enzim lipase *Candida antarctica* dengan rasio molar minyak:metil asetat = 1:20, mendapatkan metil butirat 50% dan triasetin 19% pada waktu reaksi 72 jam (Usai *et al.*, 2010). Goembira dan Saka (2013) mendapatkan FAME 96,7% wt. dan triasetin 8,8% wt. pada interesterifikasi superkritis dengan rasio molar minyak:metil asetat = 1:42. Galia *et al.*, (2014) mendapatkan yield FAEE 61% dan yield triasetin 22% pada interesterifikasi dengan rasio molar minyak rapeseed:etil asetat = 1:40. Sustere *et al.*, (2016) mendapatkan yield FAEE 82,7% dan triasetin 5,5% pada interesterifikasi dengan rasio molar minyak rapeseed:metil asetat = 1:18. Nguyen *et al.*, (2018) mendapatkan yield 96,97% pada interesterifikasi lemak serangga dengan rasio molar lemak:metil asetat = 1:14,64.

Jenis katalis

Jenis katalis sangat berpengaruh dalam pembuatan biodiesel karena dapat mengaktifkan zat-zat pereaksi sehingga energi aktivasi akan semakin kecil. Katalis homogen yang sering dipakai untuk pembuatan FAME yaitu *potassium hydroxide* serta *sodium hydroxide*. Katalis basa memiliki beberapa kelebihan yakni murah dan banyak tersedia di pasaran (Casas *et al.*, 2011). Casas *et al.*, (2011) mendapatkan FAME 76,7% wt. dan triasetin 17,2% wt. pada interesterifikasi minyak bunga matahari dengan katalis

CH₃OK pada waktu reaksi 15 menit. Madikeri *et al.*, (2013) mendapatkan yield FAME 90% pada interesterifikasi ultrasonic minyak goreng bekas dengan katalis CH₃OK 1% wt. minyak pada waktu reaksi 30 menit. Kusumaningtyas *et al.*, (2016) mendapatkan yield 11,27% pada interesterifikasi minyak jarak pagar menggunakan katalis KOH 0,5% wt. minyak, rasio molar trigliserida:etil asetat yaitu 1:6, selama 60 menit serta suhu reaksi 60°C.



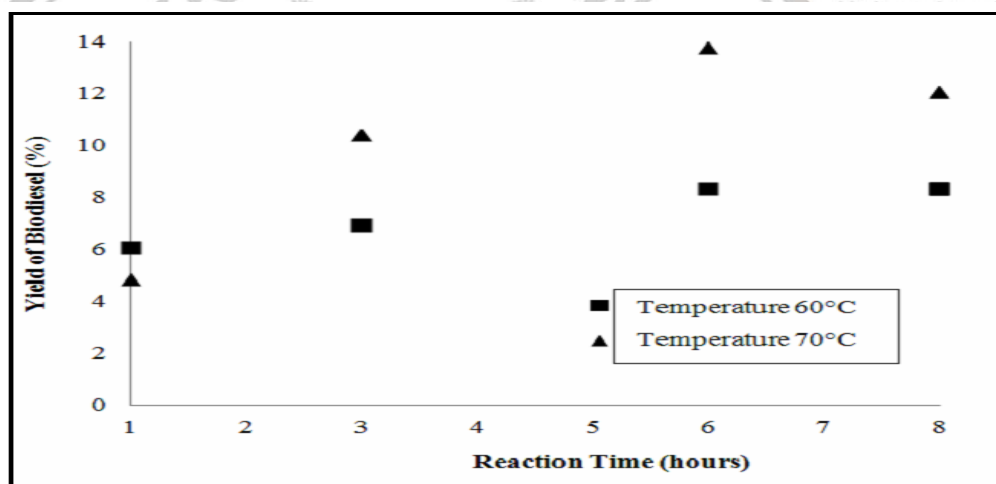
Gambar 2.8 Hubungan Konsentrasi Katalis KOH dalam % Massa Minyak dengan Yield Biodiesel (Kusumaningtyas *et al.*, 2016)

Chuepeng dan Komintarachat (2020) mendapatkan yield 77,5% pada interesterifikasi minyak goreng bekas dengan rasio molar NaOH:minyak = 0,01:1. Galia *et al.*, (2014) mendapatkan yield FAEE 61% dan yield triasetin 22% pada interesterifikasi minyak rapeseed dengan rasio katalis [Sn(Oct)₂]: minyak rapeseed = 0,1:1. Ribeiro *et al.*, (2017) mendapatkan yield total 52,49% pada interesterifikasi minyak macaw dengan katalis γ -alumina 5% massa minyak. Interrante *et al.*, (2018) mendapatkan yield FAME 90% dan yield triasetin 70% pada interesterifikasi minyak rapeseed dengan katalis SnO 0,69 mol/mol minyak pada waktu reaksi 4 jam. Pada interesterifikasi minyak kedelai pada tekanan 20 MPa dengan katalis Ca 40%-Mg-Al R3 oksida 5% wt. minyak mendapatkan yield total 68,55% (Simoes *et al.*, 2020). Pada interesterifikasi minyak kedelai pada suhu 325°C dengan katalis CaO 10% wt. minyak mendapatkan 62,3% wt. FAME pada waktu reaksi 2 jam (Nunes dan Castilhos, 2020). Tavares *et al.*, (2017) mendapatkan yield FAME 98,25% pada proses interesterifikasi ultrasonic minyak crambe dengan katalis enzim lipase

novozym 435 sebanyak 20% wt. minyak. Nguyen *et al.*, (2018) mendapatkan yield 96,97% pada interesterifikasi lemak serangga dengan katalis enzim lipase novozym 435 sebanyak 17,58% wt. minyak. Proses interesterifikasi menggunakan katalis enzim lipase *Candida antarctica* 8% dari reaktan, mendapatkan metil butirat 50% dan triasetin 19% pada waktu reaksi 72 jam (Usai *et al.*, 2010).

Waktu reaksi

Waktu reaksi juga berpengaruh karena berbanding lurus dengan fraksi tumbukan antar molekul yang menyebabkan hasil diperoleh juga akan semakin besar. Namun apabila kesetimbangan reaksi telah terpenuhi, penambahan lama reaksi tidak mempengaruhi konversi, atau justru konversi akan turun jika reaksi bersifat reversibel. Kusumaningtyas *et al.*, (2016) mendapatkan yield 6% pada interesterifikasi minyak jarak pagar dengan waktu reaksi 1 jam, katalis KOH 0,5% wt., perbandingan molar trigliserida:etil asetat = 1:6 dan suhu reaksi 60°C.



Gambar 2.9 Hubungan antara Waktu Reaksi dan Yield Biodiesel dengan Variasi Suhu Reaksi (Kusumaningtyas *et al.*, 2016)

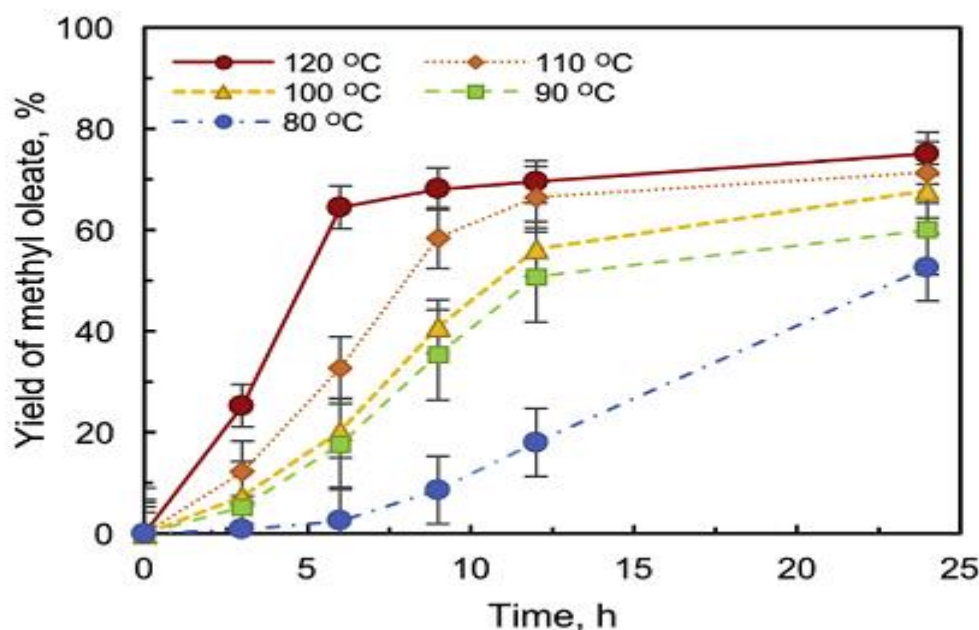
Chuepeng dan Komintarachat (2020) mendapatkan yield 77,5% pada interesterifikasi minyak goreng bekas dengan waktu reaksi 3 jam. Galia *et al.*, (2014) mendapatkan yield FAEE 61% dan yield triasetin 22% pada interesterifikasi minyak *rapeseed* dengan rasio katalis [Sn(Oct)₂]: minyak rapeseed = 0,1:1 pada waktu reaksi 20 jam. Ribeiro *et al.*, (2017) mendapatkan yield total 52,49% pada interesterifikasi minyak macaw dengan katalis γ -alumina 5% massa minyak pada waktu reaksi 1 jam. Pada interesterifikasi minyak kedelai pada tekanan 20 MPa dengan katalis Ca 40%-Mg-Al R3 oksida 5% wt. minyak mendapatkan yield total 68,55% pada waktu reaksi 80 menit (Simoes *et al.*, 2020). Tavares

et al., (2017) mendapatkan yield FAME 98,25% pada proses interesterifikasi ultrasonic minyak crambe dengan katalis enzim lipase novozym 435 sebanyak 20% wt. minyak pada waktu reaksi 6 jam. Nguyen *et al.*, (2018) mendapatkan yield 96,97% pada interesterifikasi lemak serangga dengan katalis enzim lipase novozym 435 sebanyak 17,58% wt. minyak pada waktu reaksi 12 jam.

Suhu Reaksi

Temperatur akan mempengaruhi viskositas dan massa jenis dimana kedua batas ini sangat penting untuk menentukan sifat biodiesel. Perubahan suhu reaksi akan membuat tumbukan antar partikel reaktan bertambah sehingga reaksi lebih cepat. Reaksi interesterifikasi dapat dilakukan antara suhu ruang hingga titik didih dari metil asetat yang digunakan. Temperatur yang biasa digunakan pada reaksi interesterifikasi dengan metil asetat yaitu 40-55°C (Casas *et al.*, 2011; Madikeri *et al.*, 2013). Kusumaningtyas *et al.*, (2016) mendapatkan yield 13,79% pada interesterifikasi minyak jarak pagar dengan perbandingan molar trigliserida:etil asetat = 1:6, katalis KOH 0,5% wt., waktu reaksi 6 jam dan suhu reaksi 70°C. Chuepeng dan Komintarachat (2020) mendapatkan yield 77,5% pada interesterifikasi minyak goreng bekas dengan etil asetat pada suhu reaksi 80°C, dimana titik didih etil asetat adalah 75°C. Tan *et al.*, (2010) mendapatkan yield biodiesel 97,6% pada proses interesterifikasi superkritis pada suhu 399°C tanpa katalis pada waktu reaksi 59 menit. Goembira dan Saka (2013) mendapatkan FAME 96,7% wt. pada proses interesterifikasi superkritis pada suhu 350°C tanpa katalis pada waktu reaksi 45 menit. Goembira dan Saka (2014) mendapatkan FAME 96,8% wt. pada proses interesterifikasi superkritis dengan aditif asam asetat pada suhu 300°C tanpa katalis pada waktu reaksi 45 menit. Postae *et al.*, (2019) mendapatkan yield FAME 58,56% pada proses interesterifikasi superkritis pada suhu 300°C tanpa katalis pada waktu reaksi 20 menit. Tavares *et al.*, (2017) mendapatkan yield FAME 98,25% pada proses interesterifikasi ultrasonic minyak crambe dengan katalis enzim lipase novozym 435 sebanyak 20% wt. minyak pada suhu 60°C. Nguyen *et al.*, (2018) mendapatkan yield 96,97% pada interesterifikasi lemak serangga dengan katalis enzim lipase novozym 435 sebanyak 17,58% wt. minyak pada suhu 39,5°C. Galia *et al.*, (2014) mendapatkan yield FAME 61% dan yield triasetin 22% pada interesterifikasi minyak *rapeseed* dengan rasio katalis [Sn(Oct)₂]: minyak rapeseed = 0,1:1 pada suhu reaksi 483 K. Ribeiro *et al.*, (2017) mendapatkan yield total 52,49% pada interesterifikasi minyak macaw dengan katalis γ -alumina 5% massa minyak pada suhu reaksi 250°C. Pada interesterifikasi minyak kedelai

pada tekanan 20 MPa dengan katalis Ca 40%-Mg-Al R3 oksida 5% wt. minyak mendapatkan yield total 68,55% pada suhu reaksi 325°C (Simoes *et al.*, 2020). Tian *et al.*, (2018) mendapatkan yield metil oleat 75% pada interesterifikasi trioleat dengan rasio molar minyak:metil asetat = 20:1, *co-solvent* metil miristat 3,8 gr/L, suhu reaksi 120°C, massa katalis besi sulfat 7,5% dan waktu reaksi 24 jam.



Gambar 2.10 Hubungan antara Waktu Reaksi dan Yield Metil Oleat dengan Variasi Suhu Reaksi (Tian *et al.*, 2018)

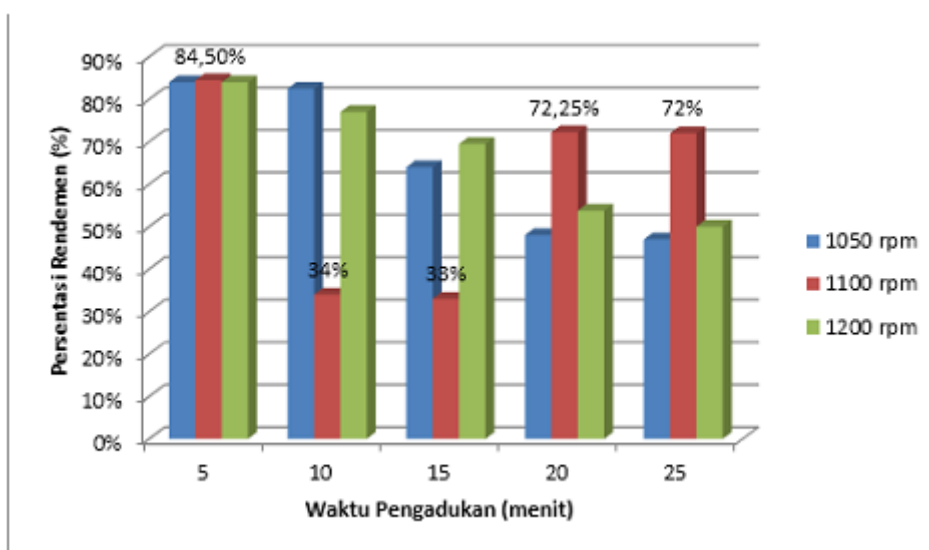
Proses pengadukan

Berhasil tidaknya proses interesterifikasi dipengaruhi oleh pengadukan selama reaksi. Pencampuran bisa menggunakan *mixer* atau *magnetic stirrer*. Semakin tinggi kecepatan pengadukan reaksi akan berpengaruh pada produk FAME yang didapatkan. Hubungan antara kecepatan pengadukan dengan yield/konversi suatu reaksi bisa dijelaskan dengan Persamaan Arrhenius:

$$kA(T) = A e^{-E/RT}$$

Dimana: kA = konstanta kecepatan reaksi, A = factor frekuensi tumbukan, E = energy aktivasi (Btu/lb mol), T = suhu reaksi (R) dan R = *universal gas constant* (1,986 Btu/lb mol. R). Kecepatan pengadukan menentukan factor frekuensi tumbukan antar molekul atau partikel dalam reaksi kimia. Semakin tinggi kecepatan pengadukan maka molekul atau partikel yang bertumbukan juga semakin banyak sehingga nilai factor frekuensi tumbukan akan tinggi. Factor frekuensi tumbukan berbanding lurus dengan konstanta kecepatan reaksi, semakin tinggi factor frekuensi tumbukan maka nilai konstanta kecepatan reaksi

juga semakin tinggi. Semakin tinggi konstanta kecepatan reaksi maka semakin banyak produk yang terbentuk dalam reaksi, sehingga yield atau konversi reaksi akan naik.

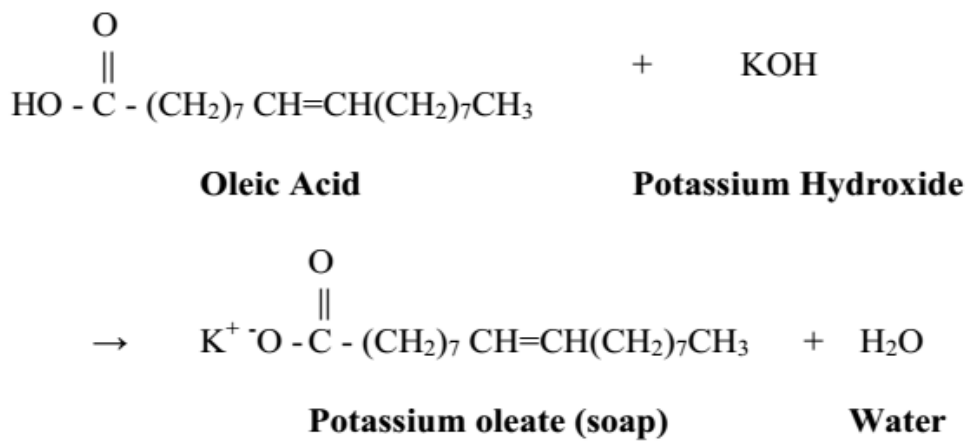


Gambar 2.11 Hubungan antara Waktu Pengadukan dengan Rendemen Biodiesel dengan Variasi Kecepatan Pengadukan (Simatupang *et al.*, 2016)

Pada reaksi transesterifikasi trigliserida menjadi FAME, kecepatan pengadukan menentukan rendemen FAME yang didapatkan (Simatupang *et al.*, 2016). Pada Gambar 2.11 terlihat bahwa kondisi optimum tercapai pada waktu pengadukan 5 menit dan kecepatan pengadukan 1.100 rpm yaitu menghasilkan rendemen biodiesel 84,5%.

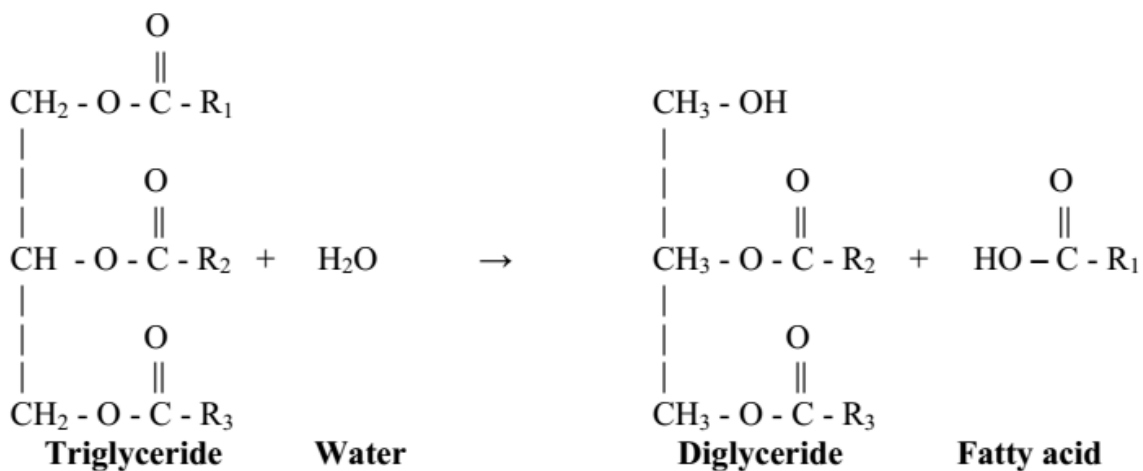
Bahan Baku

Kualitas bahan baku sangat mempengaruhi proses interesterifikasi dan kualitas produk yang dihasilkan. Minyak tumbuhan atau lemak hewan sebagai *raw material* biodiesel harus memenuhi beberapa parameter yang dipersyaratkan. Bahan baku yang digunakan harus mempunyai %FFA < 3% (Jansri, 2015; Pullen dan Saeed, 2015) dan kadar air < 0,6% (Pullen dan Saeed, 2015). Jika reaksi interesterifikasi menggunakan katalis basa (NaOH, KOH) maka akan bereaksi dengan FFA membentuk sabun misalnya natrium palmitate, kalium palmitate dll. Terbentuknya senyawa tersebut akan mengurangi keefektifan katalis basa yang berperan untuk mempercepat reaksi interesterifikasi.



Gambar 2.12 Reaksi Penyabunan FFA dan Katalis KOH (Van Gerpen *et al.*, 2004)

Gambar 2.12 memperlihatkan persamaan reaksi saponifikasi FFA (asam oleat) dan katalis KOH membentuk sabun (kalium oleat) dan air. Jika konsentrasi FFA pada bahan baku tinggi maka sabun yang terbentuk juga akan semakin banyak, sehingga akan terbentuk emulsi pada campuran reaksi yang akan menghambat proses pembentukan biodiesel (Van Gerpen *et al.*, 2004).



Gambar 2.13 Reaksi Hidrolisa Trigliserida dan Air (Van Gerpen *et al.*, 2004)

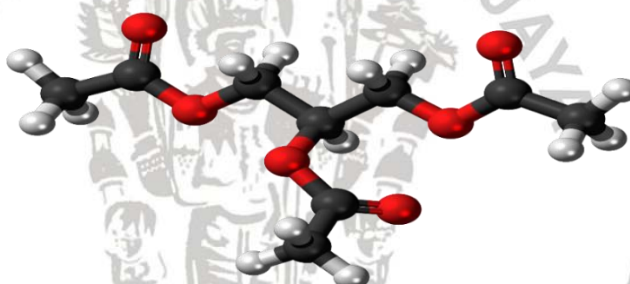
Gambar 2.13 memperlihatkan persamaan reaksi hidrolisa trigliserida oleh air membentuk digliserida dan FFA. *Free fatty acid* yang terbentuk memicu terbentuknya sabun jika bereaksi dengan katalis basa (Van Gerpen *et al.* 2004).

2.6 Triasetin

Triasetin mempunyai rumus molekul $C_9H_{14}O_6$. Triasetin yang terbentuk dari reaksi antara trigliserida dan metil asetat dapat digunakan sebagai aditif untuk memperbaiki sifat fisika kimia dari biodiesel. Triasetin mempunyai harga jual yang lebih tinggi dibandingkan gliserol sehingga lebih menguntungkan.

Tabel 2.7 Karakteristik Triasetin

Parameter	Keterangan
Berat Molekul	218,2039 gr/mol
Kepadatan	1,161 g/cm ³
Titik Nyala	9,39°C
Kelarutan dalam air	64,0 g/L (20°C)
Titik didih	258°C pada 760 mmHg
Titik lebur	3°C



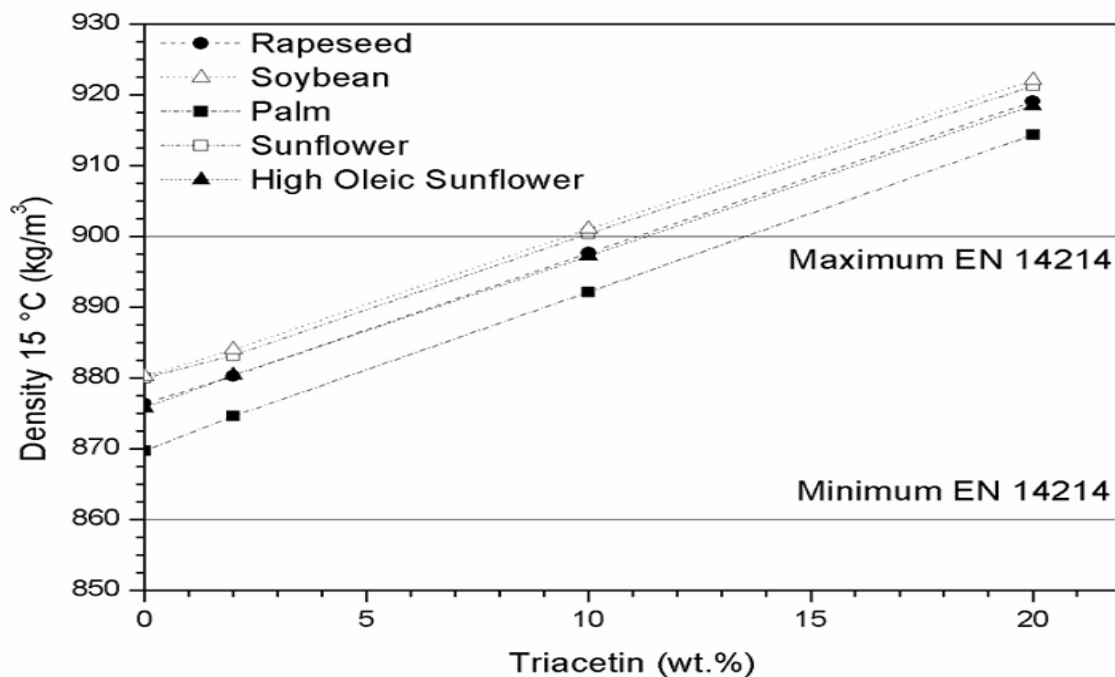
Gambar 2.14 Molekul Triasetin

Tabel 2.8 Standard Kualitas Biodiesel ASTM D6751-12 dan EN 14214:2012

Property	Unit	ASTM D6751-12	EN 14214:2012
Densitas (15°C)	kg/m ³	-	860 – 890
Viskositas kinematik (40°C)	mm ² /s	1,9 – 6,0	3,50 – 5,00
Angka setana	-	≥ 47	≥ 51
Metil ester	% (m/m)	-	≥ 96,5
Flash point	°C	≥ 93	≥ 101
Kandungan sulfur	mg/kg	≤ 15	≤ 10
Kandungan air	-	≤ 0,05% vol.	≤ 500 mg/kg
Stabilitas oksidasi, 110°C	jam	≥ 3	≥ 8
Angka asam	mg KOH/g	≤ 0,5	≤ 0,5
Angka iodine	g I ₂ /g	-	≤ 120
Kandungan fosfor	mg/kg	≤ 10	≤ 4

Densitas

Densitas bahan bakar berpengaruh pada konsumsi bahan bakar dan efisiensi atomisasi bahan bakar (Knothe *et al.*, 2005). Berdasarkan ASTM D6751 densitas biodiesel tidak ditentukan, tetapi berdasarkan EN 14214 densitas biodiesel antara 860 – 900 kg/m³ untuk semua biodiesel dari *raw material* apapun. Berdasarkan EN 14214, densitas biodiesel dibatasi untuk mencegah impurities atau bahan sisa reaksi pada biodiesel. Triasetin mempunyai densitas tinggi yaitu 1183 kg/m³ pada suhu 15°C hampir sama dengan gliserol. Dua senyawa tersebut hampir sama struktur molekulnya tetapi mempunyai pengaruh yang berbeda pada biodiesel. Densitas metil ester tergantung dari panjang rantai serta banyaknya ikatan rangkap. Densitas berkurang dengan panjang rantai, dimana hal ini hanya berlaku untuk panjang rantai lebih besar dari 8 atom karbon. Banyaknya jumlah ikatan rangkap berpengaruh pada besarnya densitas metil ester (Ott *et al.*, 2008).



Gambar 2.15 Hubungan antara Massa Triasetin dan Densitas Biodiesel dengan variasi Bahan Baku Biodiesel (Casas *et al.*, 2010)

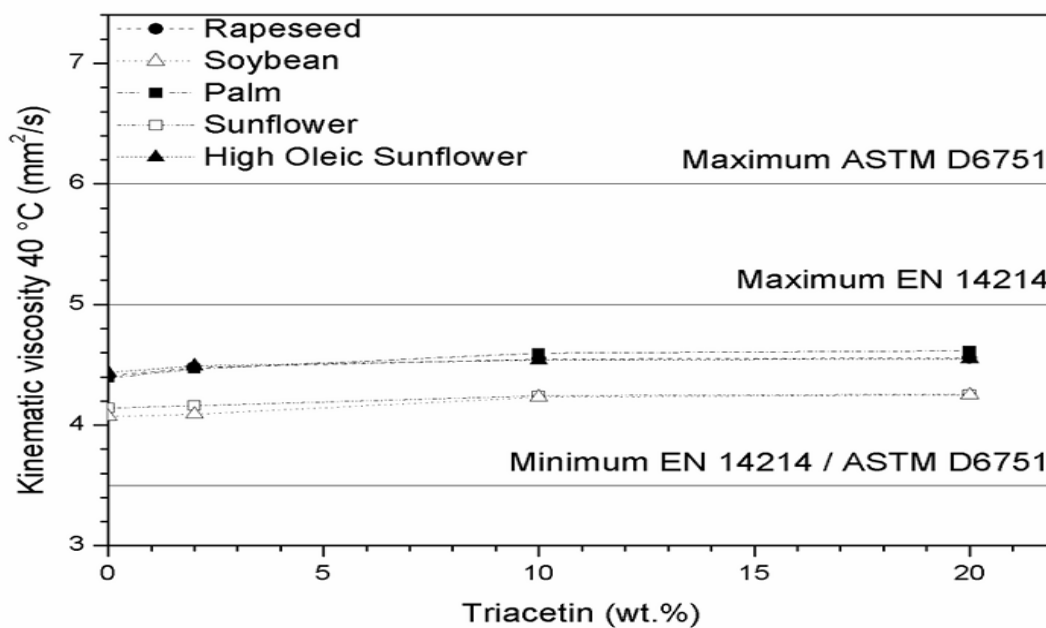
Pada Gambar 2.15 menunjukkan hubungan antara penambahan massa triasetin dan densitas biodiesel pada suhu 15°C untuk berbagai bahan baku yang digunakan dibandingkan dengan Standard EN 14214. Pada gambar terlihat bahwa penambahan triasetin menyebabkan naiknya densitas biodiesel. Densitas biodiesel dari minyak kedelai dan minyak biji bunga matahari (komponen utamanya C18:2) lebih besar daripada densitas biodiesel dari minyak

rapeseed dan minyak biji bunga matahari tinggi oleat (komponen utamanya C18:1). Biodiesel dari minyak kelapa sawit mempunyai densitas paling rendah dengan komponen paling besar metil palmitate (C16:0).

Maksimum kandungan triasetin berdasarkan standard EN 14214 adalah 9,5% wt. untuk biodiesel dari minyak kedelai, 9,81% wt. untuk biodiesel dari minyak biji bunga matahari, 11,1% wt. untuk biodiesel dari minyak biji bunga matahari tinggi oleat, 11,3% wt. untuk biodiesel dari minyak *rapeseed* dan 13,52% wt. untuk biodiesel dari minyak kelapa sawit. Tetapi berdasarkan standard ASTM D6751 kandungan triasetin tidak terbatas untuk densitas biodiesel (Casas *et al.*, 2010).

Viskositas Kinematik

Viskositas berpengaruh penting pada injeksi bahan bakar dan pembakaran. Bertambahnya viskositas menyebabkan masalah pada pompa injeksi yaitu menaikkan tekanan dan volume injeksi. Akibat langsungnya adalah *time delay* antara injeksi bahan bakar dan *fuel ignition* akan bertambah. Temperature pembakaran dan emisi NO_x akan bertambah, begitu juga system injeksi akan terhambat karena atomisasi bahan bakar kecil (Mittelbach *et al.*, 2004). Triasetin mempunyai viskositas 7,83 cSt pada 40°C, lebih tinggi daripada viskositas biodiesel yaitu 3,5 – 5 cSt pada 40°C dan jauh lebih rendah dari viskositas trigliserida dari minyak tumbuhan atau lemak hewan (sekitar 35 – 40 cSt pada 40°C).

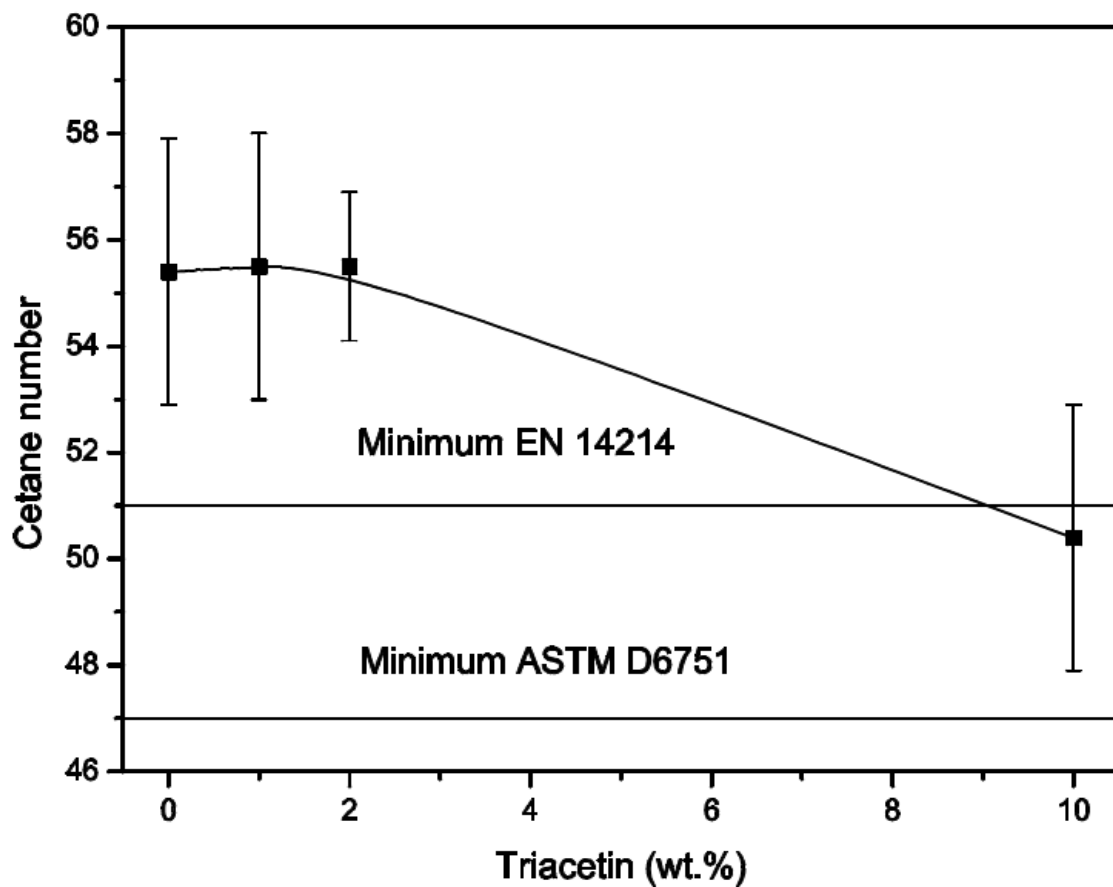


Gambar 2.16 Hubungan antara Massa Triasetin dan Viskositas Biodiesel dengan variasi Bahan Baku Biodiesel (Casas *et al.*, 2010)

Penambahan triasetin akan menambah viskositas dari biodiesel berdasarkan Gambar 2.16. Pada Gambar 2.16 terlihat bahwa semua variasi % massa penambahan triasetin memenuhi standard ASTM D6751 dan EN 14214. Viskositas kinematic metil ester akan bertambah dengan bertambah panjangnya rantai dan berkurang dengan bertambahnya jumlah ikatan rangkap. Jadi, asam lemak metil ester dengan densitas tinggi mempunyai viskositas yang rendah (Knothe *et al.*, 2007). Berdasarkan Gambar 2.16, campuran biodiesel dari minyak kelapa sawit dan triasetin mempunyai viskositas paling tinggi.

Cetane Number

Cetane number menentukan mutu pembakaran bahan bakar diesel selama kompresi ignition yang dinyatakan sebagai campuran setana (heksadekana) dan isosetana (2,2,4,4,6,8,8-heptametilnonana). Penambahan triasetin sebanyak 10% pada biodiesel akan mengurangi angka setana pada biodiesel dibawah standard EN 14214, dimana triasetin murni mempunyai angka setana 15 (Saka *et al.*, 2009).

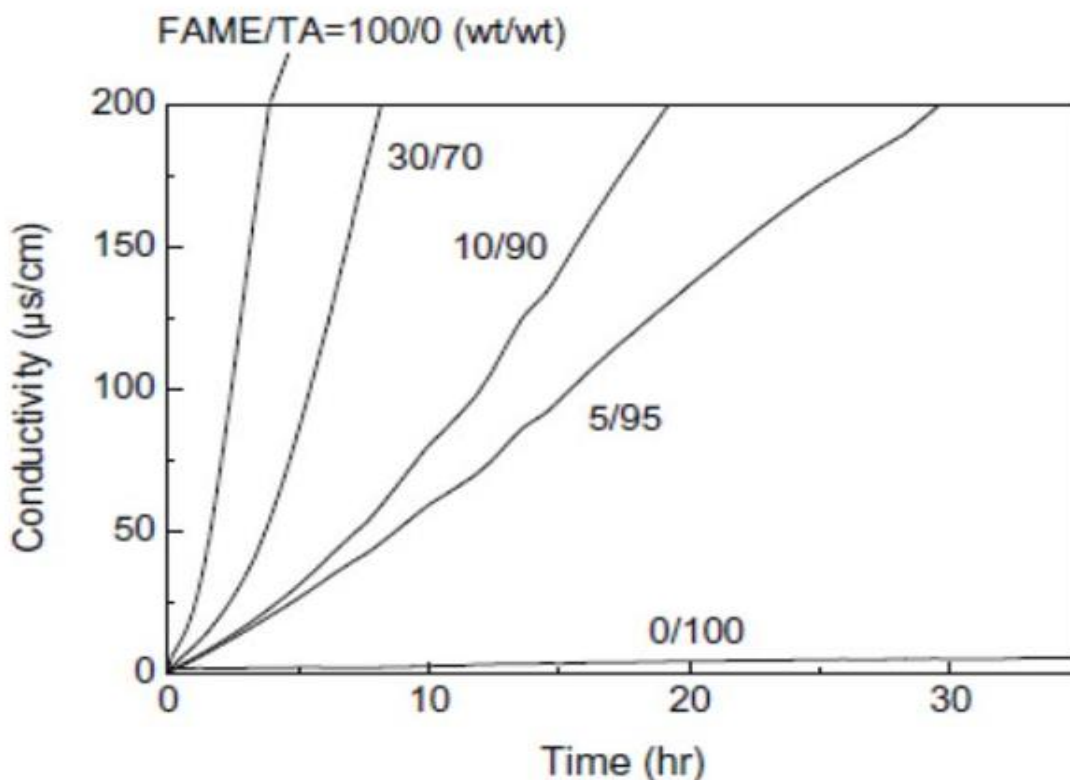


Gambar 2.17 Hubungan antara Massa Triasetin dan Angka Setana Biodiesel dari Minyak *Rapiseed* (Casas *et al.*, 2010)

Pada Gambar 2.17 terlihat bahwa penambahan 10% wt. triasetin menyebabkan angka setana biodiesel tidak memenuhi standard minimum EN 14214 yaitu 51 tetapi masih memenuhi standard minimum ASTM D6751 yaitu 47. Angka setana untuk biodiesel dari minyak *rapeseed* adalah 55, lebih rendah dari *cetane number* biodiesel dari minyak kelapa sawit serta lebih tinggi dari *cetane number* biodiesel dari minyak kedelai dan minyak bunga matahari yaitu 49 dan 50 (Ramos *et al.*, 2008).

Stabilitas Oksidasi

Komposisi kimia dari *fatty acid methyl esters* lebih mudah terdegradasi dan teroksidasi daripada diesel fosil. Khususnya untuk biodiesel dengan komposisi *polyunsaturated ester* yang tinggi. Biodiesel yang mengandung banyak asam linoleate dan asam linolenat seperti pada minyak bunga matahari atau minyak kedelai mempunyai stabilitas oksidasi yang rendah. Biodiesel dari minyak kelapa atau minyak kelapa sawit dengan kandungan *saturated ester* mempunyai stabilitas oksidasi lebih baik.



Gambar 2.18 Hubungan antara Waktu dan Konduktivitas dengan Variasi Perbandingan Massa Metil Oleat:Triasetin (Saka *et al.*, 2009)

Metode standard analisa untuk menentukan stabilitas oksidasi biodiesel (EN 14112) adalah sama dengan metode untuk kimia makanan. Metode ini disebut Rancimat dimana sample biodiesel pada suhu 110°C dialiri udara dengan kecepatan konstan. Senyawa peroksida yang merupakan produk utama reaksi oksidasi akan bereaksi dengan asam volatile (asam formiat dan asam asetat) yang akan menaikkan nilai konduktivitas.

Pada Gambar 2.18 terlihat bahwa dengan penambahan triasetin akan menunda bertambahnya nilai konduktivitas yang berhubungan dengan terbentuknya asam lemak volatile dari oksidasi *unsaturated* metil ester. Semakin rendah nilai konduktivitas maka semakin besar nilai stabilitas oksidasi biodiesel. Berdasarkan standard ASTM D6751-12, stabilitas oksidasi biodiesel minimal 3 jam dan berdasarkan standard EN 14214:2012 adalah minimal 8 jam.

Tabel 2.9 Kandungan Triasetin Maksimum pada Biodiesel Berdasarkan Standard Mutu ASTM D6751 dan EN 14214

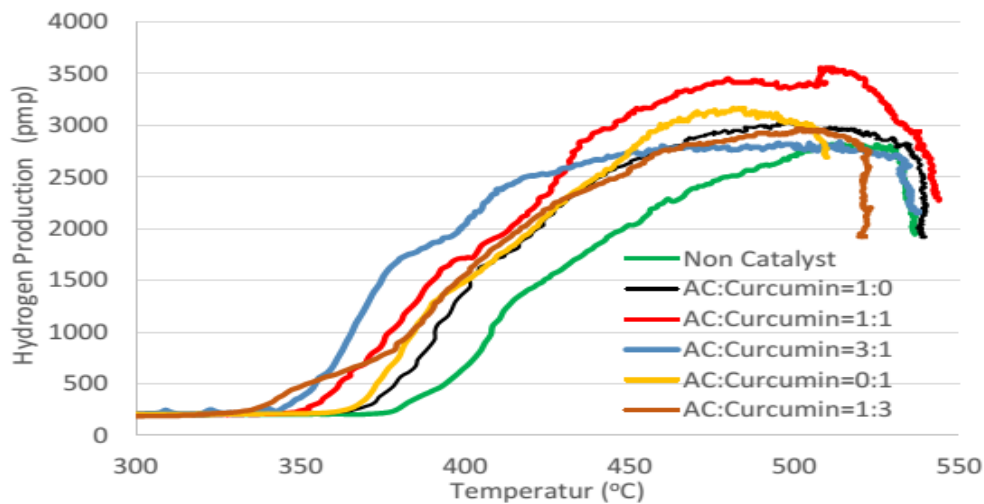
Property	ASTM D6751	EN 14214
Densitas pada 15°C	-	≤ 10% wt . (tergantung jenis biodiesel)
Viskositas kinematic pada 40°C	Maksimum (≤ 20% . wt)	Maksimum (≤ 20% . wt)
Cloud point	Tidak berefek negatif	
Angka setana	Maksimum (≤ 20% . wt)	≤ 10% . wt (tergantung jenis biodiesel)
Kandungan metil ester	-	≤ 3,5% wt
Temperatur destilasi AET T90	Maksimum (≤ 20% . wt)	
Flash point	Maksimum (≤ 20% . wt)	Maksimum (≤ 20% . wt)

2.7 Bio-katalis Senyawa Aromatik

Yang menjadi masalah dalam reaksi interesterifikasi adalah penggunaan katalis homogen maupun heterogen yang membutuhkan proses pemisahan di akhir reaksi. Pada penggunaan katalis basa seperti NaOH dan KOH memerlukan proses netralisasi katalis di akhir reaksi untuk menghentikan reaksi karena reaksi interesterifikasi bersifat reversible.

Casas *et al.*, (2011) menggunakan asam fosfat untuk menetralkan katalis KOH pada reaksi interesterifikasi minyak bunga matahari dengan metil asetat. Tian *et al.*, (2018) menggunakan katalis besi sulfat untuk interesterifikasi trioleat dengan penambahan *co-solvent* metil miristat, dan mendapatkan yield metil oleat 70% pada waktu reaksi 24 jam. Pada interesterifikasi *crambe oil* dengan katalis Novozym 435, mendapatkan yield 98,25% pada temperature 60°C, waktu reaksi 6 jam serta perbandingan molar metil asetat: minyak = 12 (Tavares *et al.*, 2017). Penggunaan bio-katalis senyawa aromatik tidak perlu proses netralisasi seperti katalis homogen serta aktivasi katalis seperti katalis heterogen. Bio-katalis senyawa aromatik bisa didapatkan dengan proses ekstraksi atau langsung dibeli dengan harga yang relatif murah dibandingkan dengan harga bio-katalis buatan yang mahal. Dengan membeli langsung bio-katalis senyawa aromatic bisa menghemat waktu dan fokus pada proses interesterifikasi yang dilakukan. Waktu reaksi yang lama pada penggunaan katalis heterogen dan katalis enzim juga bisa diatasi dengan penggunaan bio-katalis senyawa aromatik.

Beberapa penelitian telah menggunakan senyawa aromatic sebagai bio-katalis. Pada penelitian Suprianto *et al.*, (2020), menggunakan perpaduan bio-katalis karbon aktif dan curcumin pada proses pirolisis biomassa menjadi hydrogen. Kondisi terbaik didapatkan pada rasio karbon aktif:curcumin = 1:1 yaitu mendapatkan gas hydrogen 25,6% (Suprianto *et al.*, 2020).

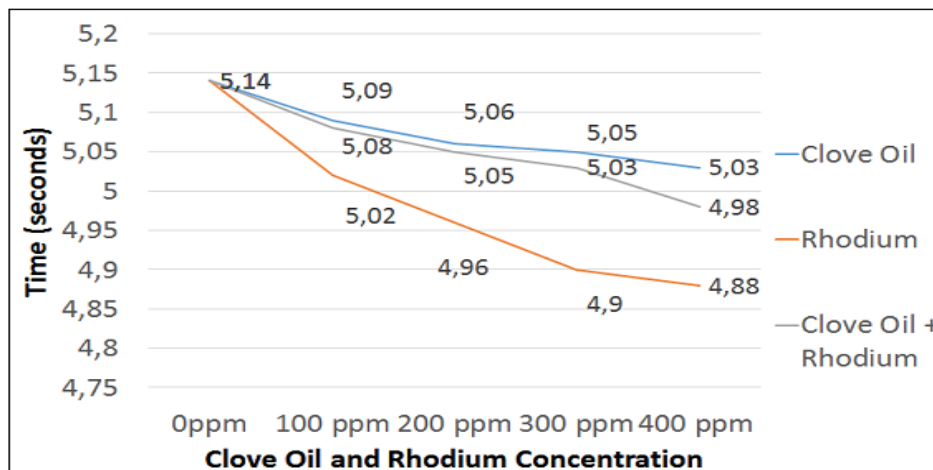


Gambar 2.19 Hubungan antara Temperatur dengan Konsentrasi Hidrogen dengan Variasi Perbandingan Massa Katalis (Suprianto *et al.*, 2020)

Pada Gambar 2.19 terlihat bahwa semakin tinggi suhu pirolisis maka akan semakin tinggi konsentrasi hydrogen yang terbentuk, tetapi ada suhu optimum dimana konsentrasi

hidrogen yang terbentuk akan turun. Kondisi terbaik didapatkan pada suhu pirolisis 500°C dan perbandingan massa katalis karbon aktif:kurkumin = 1:1 dimana mendapatkan konsentrasi hidrogen terbentuk paling tinggi yaitu 3.500 ppm.

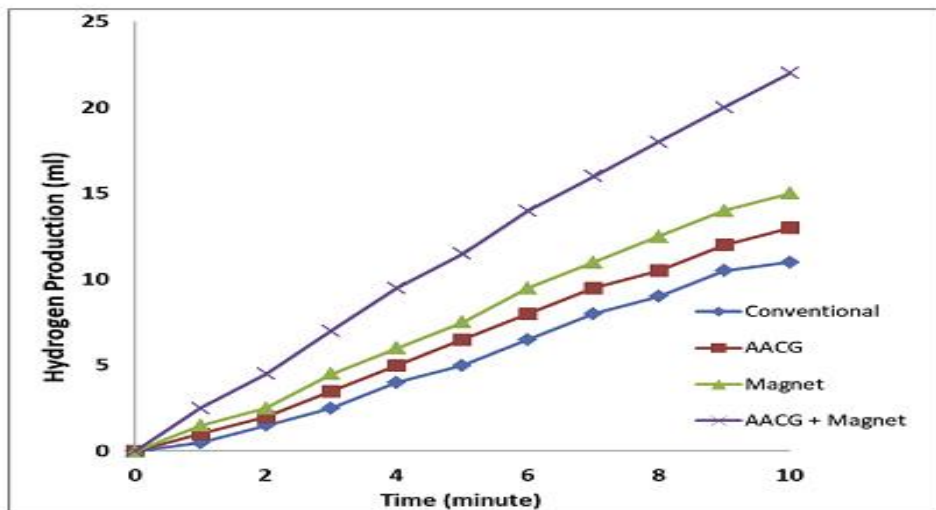
Perpaduan katalis Rhodium (III) sulfat dan minyak cengkeh akan menambah temperature pembakaran, mengurangi *ignition delay* dan laju pembakaran (Purnami *et al.*, 2019).



Gambar 2.20 Hubungan antara Konsentrasi Katalis dengan Waktu *Ignition Delay* (Purnami *et al.*, 2019)

Pada Gambar 2.20 terlihat bahwa semakin tinggi konsentrasi katalis yang ditambahkan maka semakin kecil waktu *ignition delay*. Pada penelitian tersebut masih belum didapatkan kondisi optimum karena trend grafik yang didapatkan masih terus turun. Kondisi terbaik didapatkan pada penambahan konsentrasi katalis minyak cengkeh dan rhodium sebanyak 400 ppm yaitu mendapatkan waktu *ignition delay* terendah 4,88 detik.

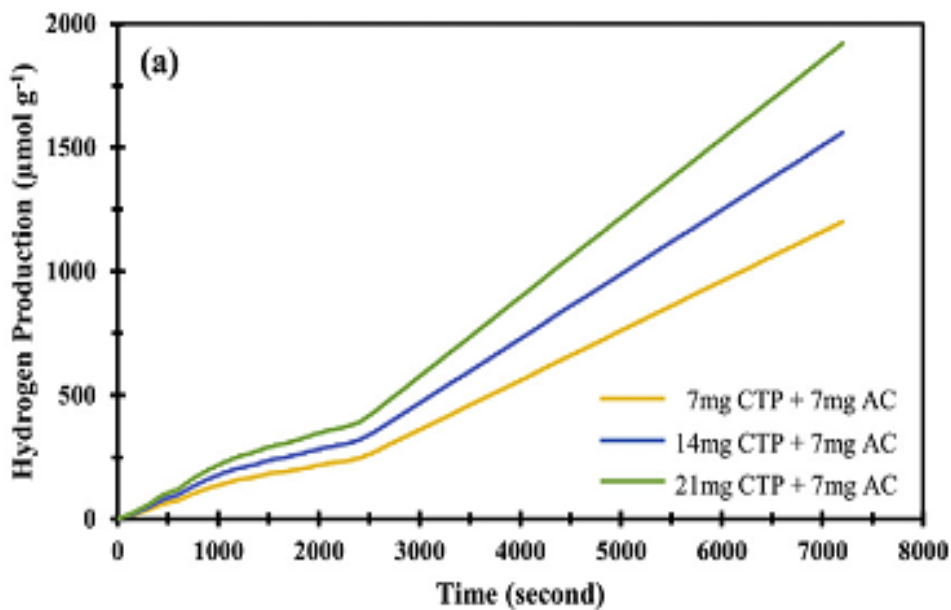
Purnami *et al.*, 2020 juga melakukan elektrolisis air menjadi gas hydrogen dengan menggunakan medan magnet eksternal yang dipadukan dengan grapen dari karbon aktif algae.



Gambar 2.21 Hubungan antara Waktu Reaksi dengan Volume Hidrogen yang Terbentuk dengan Variasi Jenis Katalis (Purnami *et al.*, 2020)

Pada Gambar 2.21 terlihat jika lamanya reaksi sebanding dengan produksi hydrogen. Dari gambar tersebut masih belum didapatkan kondisi optimum karena trend grafik yang didapatkan masih terus naik. Kondisi terbaik didapatkan pada waktu reaksi 10 menit dengan perpaduan katalis magnet dan grapen dari karbon aktif algae, mendapatkan volume hydrogen tertinggi yaitu sekitar 22 ml.

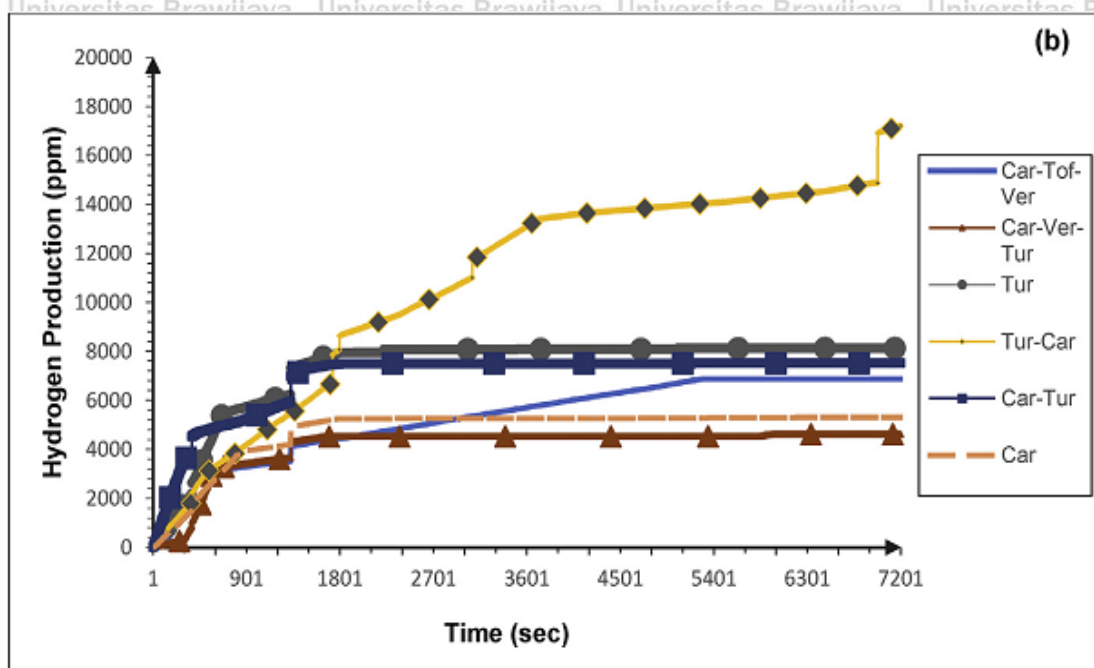
Perpaduan dari karbon aktif dan bubuk bunga telang (*clitoria ternatea*) digunakan sebagai katalis pada proses biofotokatalis air menjadi gas hydrogen (Sofi'i *et al.*, 2020).



Gambar 2.22 Hubungan antara Waktu Reaksi dengan Konsentrasi Hidrogen yang Terbentuk dengan Variasi Perbandingan Massa Katalis (Sofi'i *et al.*, 2020)

Pada Gambar 2.22 terlihat jika lamanya reaksi sebanding dengan produksi hydrogen. Dari Gambar 2.22 masih belum didapatkan kondisi optimum karena trend grafik yang didapatkan masih terus naik. Kondisi terbaik didapatkan pada waktu reaksi 7.000 detik dengan perbandingan massa katalis yaitu 21 mg CTP (bubuk bunga telang) + 7 mg karbon aktif, mendapatkan konsentrasi hydrogen tertinggi yaitu sekitar 1.900 $\mu\text{mol}/\text{gr}$.

Satrio *et al.*, 2020 melakukan proses elektrokatalitik air dan air sisa rebusan mie instan menjadi hydrogen dengan variasi bio-katalis yang digunakan adalah karbon bubuk, limbah padat tofu, bubuk turmeric dan ekstrak *Lumbricus rubellus* bubuk.



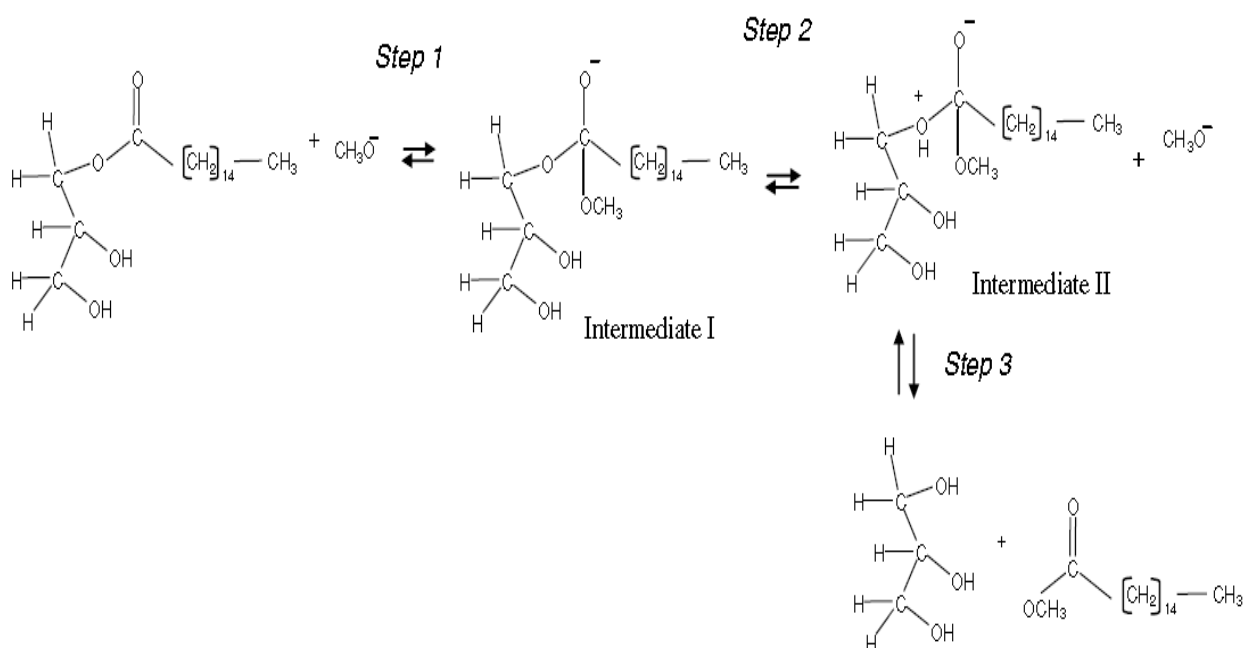
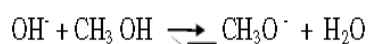
Gambar 2.23 Hubungan antara Waktu Reaksi dengan Konsentrasi Hidrogen yang Terbentuk dengan Variasi Jenis Katalis (Satrio *et al.*, 2020)

Berdasarkan Gambar 2.23 kondisi optimum didapatkan pada waktu reaksi 7.201 detik dengan katalis turmeric + karbon yaitu mendapatkan hydrogen dengan konsentrasi sekitar 18.000 ppm.

2.8 Proses Pembuatan Biodiesel dengan Katalis Basa

Transesterifikasi adalah proses pembuatan biodiesel konvensional yang umum dilakukan, yaitu mereaksikan antara trigliserida atau asam lemak dengan alcohol umumnya metanol membentuk metil ester dan gliserol. Katalis yang paling umum digunakan adalah katalis basa yaitu KOH dan NaOH karena murah, efektifitas tinggi dan mudah didapatkan.

Pada proses transesterifikasi NaOH akan pecah menjadi Na^+ dan OH^- . Ion OH^- akan bereaksi dengan metanol membentuk CH_3O^- dan H_2O . Ion CH_3O^- inilah yang bereaksi dengan asam lemak membentuk produk seperti dalam mekanisme reaksi dibawah ini. Pada step 1 terjadi pemutusan ikatan rangkap $\text{C}=\text{O}$ menjadi ikatan tunggal untuk membentuk senyawa intermediat I. Pada step 2 terjadi serangan dari ion H^+ pada atom O membentuk senyawa intermediat II. Pada step 3 terjadi perubahan dari senyawa intermediat II menjadi metil ester dan gliserol. Pada mekanisme reaksi tersebut terjadi perubahan panjang ikatan $\text{C}-\text{O}$ seperti ditunjukkan pada tabel dibawah.



Gambar 2.24 Transesterification Reaction Mechanism with Base Catalyst

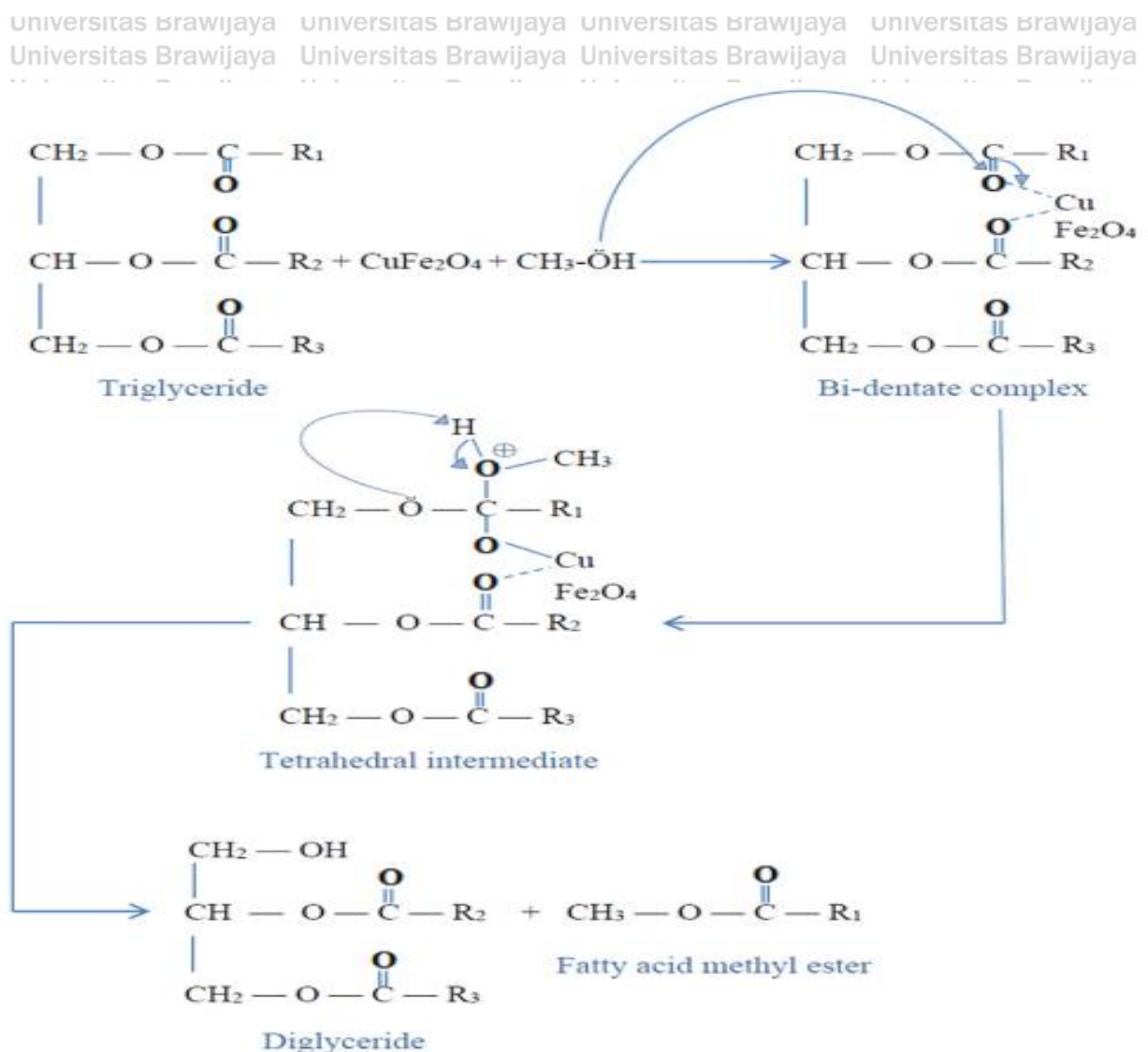
(Tapanes *et al.*, 2008)

Tabel 2.10 Perubahan Panjang Ikatan C – O

Compounds	1-MGpalm		2-MGpalm	
	Structure	Bond length (Å)	Structure	Bond length (Å)
Neutral molecule	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{H}_2\text{C}-\text{O}-\text{C}-\text{C}_{15}\text{H}_{31} \\ \\ \text{HCOH} \\ \\ \text{H}_2\text{COH} \end{array}$	1.37	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{H}_2\text{COH}-\text{O}-\text{C}-\text{C}_{15}\text{H}_{31} \\ \\ \text{HCOH} \\ \\ \text{H}_2\text{COH} \end{array}$	1.37
Intermediate I	$\begin{array}{c} \text{O}^- \\ \\ \text{H}_2\text{C}-\text{O}-\text{C}-\text{C}_{15}\text{H}_{31} \\ \quad \\ \text{HCOH} \quad \text{OCH}_3 \\ \\ \text{H}_2\text{COH} \end{array}$	1.47	$\begin{array}{c} \text{O}^- \\ \\ \text{H}_2\text{COH}-\text{O}-\text{C}-\text{C}_{15}\text{H}_{31} \\ \quad \\ \text{HCOH} \quad \text{OCH}_3 \\ \\ \text{H}_2\text{COH} \end{array}$	1.46
Intermediate II	$\begin{array}{c} \text{O}^- \\ \\ \text{H}_2\text{C}-\text{O}^+-\text{H}-\text{C}-\text{C}_{15}\text{H}_{31} \\ \quad \\ \text{HCOH} \quad \text{OCH}_3 \\ \\ \text{H}_2\text{COH} \end{array}$	3.96	$\begin{array}{c} \text{O}^- \\ \\ \text{H}_2\text{COH}-\text{O}^+-\text{H}-\text{C}-\text{C}_{15}\text{H}_{31} \\ \quad \\ \text{HCOH} \quad \text{OCH}_3 \\ \\ \text{H}_2\text{COH} \end{array}$	3.90

2.9 Proses Pembuatan Biodiesel dengan Katalis Magnet

Beberapa penelitian reaksi transesterifikasi menggunakan katalis magnet mendapatkan hasil yang cukup memuaskan. Penelitian Ali *et al.*, (2020) menggunakan katalis magnet CuFe_2O_4 untuk proses transesterifikasi minyak goreng bekas menjadi biodiesel. Tahap pembuatan katalis magnet heterogen CuFe_2O_4 meliputi: reaksi $\text{Cu}^{2+} + \text{Fe}^{2+}$ dengan rasio molar 1:2, dilanjutkan dengan penetapan pH = 11 dengan menggunakan larutan NaOH 2N, kemudian lanjut dengan proses hidrotermal pada temperatur 110°C dengan waktu 12 jam, dilanjutkan dengan proses *washing*, penyaringan serta *drying*. Proses terakhir adalah kalsinasi pada suhu 900°C selama 1 jam sehingga akhirnya didapatkan katalis CS_2 . Kondisi optimum penelitian mendapatkan yield biodiesel 90,24% dengan waktu reaksi 0,5 jam, perbandingan mol trigliserida:metanol = 1:18, katalis 3% wt., putaran pengaduk 300 rpm serta temperature reaksi 60°C. *Transesterification reaction mechanism* menggunakan katalis magnet CuFe_2O_4 ditunjukkan dalam gambar berikut:



Gambar 2.25 *Transesterification reaction mechanism* menggunakan katalis magnet CuFe_2O_4

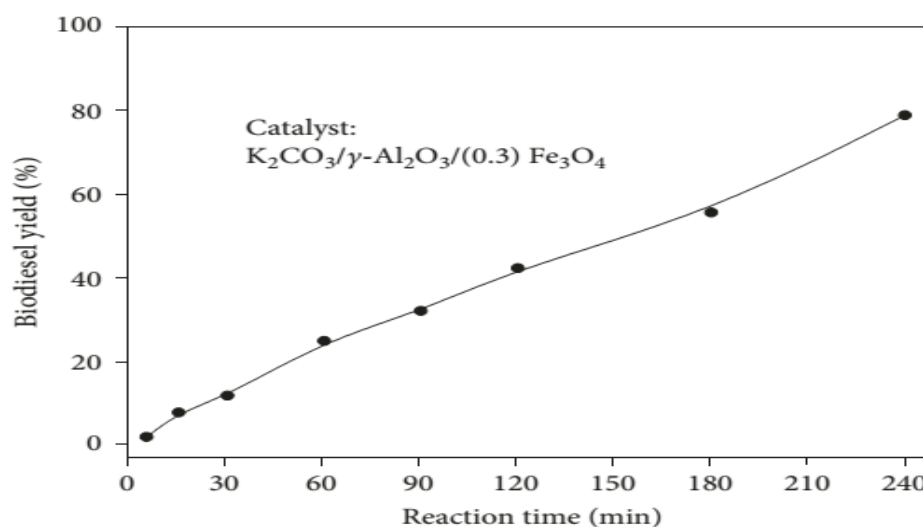
Reaksi transesterifikasi terjadi dengan penyerangan gugus karbonil pada minyak goreng bekas. Pusat Cu pada katalis CuFe_2O_4 membentuk bi-dentate kompleks dengan substrat sebagai hasil dari afinitas Cu untuk O yang memotivasi serangan nukleofilik metanol ke bi-dentate kompleks membentuk tetrahedral intermediet. Hidrogen selanjutnya mentransfer dan menyerang atom yang lebih elektronegatif yaitu O yang memiliki pasangan elektron bebas untuk membentuk satu molekul FAME dan digliserida. Kemudian digliserida bereaksi lagi dengan metanol dengan katalis CuFe_2O_4 untuk menghasilkan satu molekul FAME kedua dan membentuk monogliserida. Akhirnya siklus berulang untuk menghasilkan satu molekul FAME ketiga dan satu molekul gliserol.

Junior *et al.*, (2018) menggunakan variasi jenis katalis magnet heterogen untuk reaksi transesterifikasi minyak bunga matahari menjadi biodiesel. Tabel berikut menunjukkan hubungan sifat magnet katalis terhadap yield biodiesel yang dihasilkan.

Tabel 2.11 Sifat Magnet Katalis dan Yield Biodiesel yang Dihasilkan

Katalis	Magnetisasi (emu/g)	Yield Biodiesel (%)
$K_2CO_3/\gamma-Al_2O_3$	0,00	65,73
$K_2CO_3/\gamma-Al_2O_3/(0,1)Fe_3O_4$	3,31	64,41
$K_2CO_3/\gamma-Al_2O_3/(0,2)Fe_3O_4$	7,60	69,22
$K_2CO_3/\gamma-Al_2O_3/(0,3)Fe_3O_4$	10,08	78,86
$K_2CO_3/\gamma-Al_2O_3/(0,4)Fe_3O_4$	13,46	70,82

Sumber : Junior *et al.*, 2018



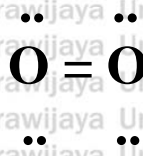
Gambar 2.26 Hubungan antara Waktu Reaksi dan Yield Biodiesel dengan katalis $K_2CO_3/\gamma-Al_2O_3/(0,3)Fe_3O_4$ (Junior *et al.*, 2018)

Secara umum menunjukkan bahwa sifat magnetisasi berbanding lurus dengan yield biodiesel yang dihasilkan. Dari Gambar 2.26 juga terlihat bahwa waktu reaksi sebanding dengan yield. Untuk Gambar diatas masih belum didapatkan kondisi optimum karena trend grafik yang didapatkan masih terus naik. Kondisi terbaik penelitian mendapatkan yield 78,86% pada waktu reaksi 4 jam, massa katalis $K_2CO_3/\gamma-Al_2O_3/(0,3)Fe_3O_4$ 5% wt., rasio molar minyak:etanol = 1:12, suhu reaksi 80°C dan kecepatan pengadukan 200 rpm.

2.10 Teori Orbital Molekul

Ikatan valensi adalah teori dalam *quantum mechanics* yang menerangkan terbentuknya ikatan pada molekul akibat penggunaan bersama elektron. Teori ini secara kualitatif menjelaskan stabilitas ikatan kovalen karena tumpang tindih orbital atom. Berdasarkan

percobaan, teori ikatan valensi belum bisa menerangkan perilaku molekul dengan baik. Contohnya adalah molekul oksigen (O_2) dengan struktur Lewis sebagai berikut:



Gambar 2.27 Ikatan Valensi Molekul Oksigen (O_2)

Sesuai dengan gambar 2.27, setiap elektron dalam O_2 berpasangan serta harusnya bersifat diamagnetik. Namun dari eksperimen memperlihatkan jika molekul O_2 adalah paramagnetik dengan dua elektron yang tidak berpasangan. Kondisi ini tidak sesuai dengan hukum ikatan valensi. Sifat-sifat magnet molekul lebih tepat dijelaskan dengan satu lagi teori mekanika kuantum, yaitu teori orbital molekul.

Susunan elektron keadaan dasar O adalah $1s^2 2s^2 2p^4$, jadi ada 16 elektron di O_2 .

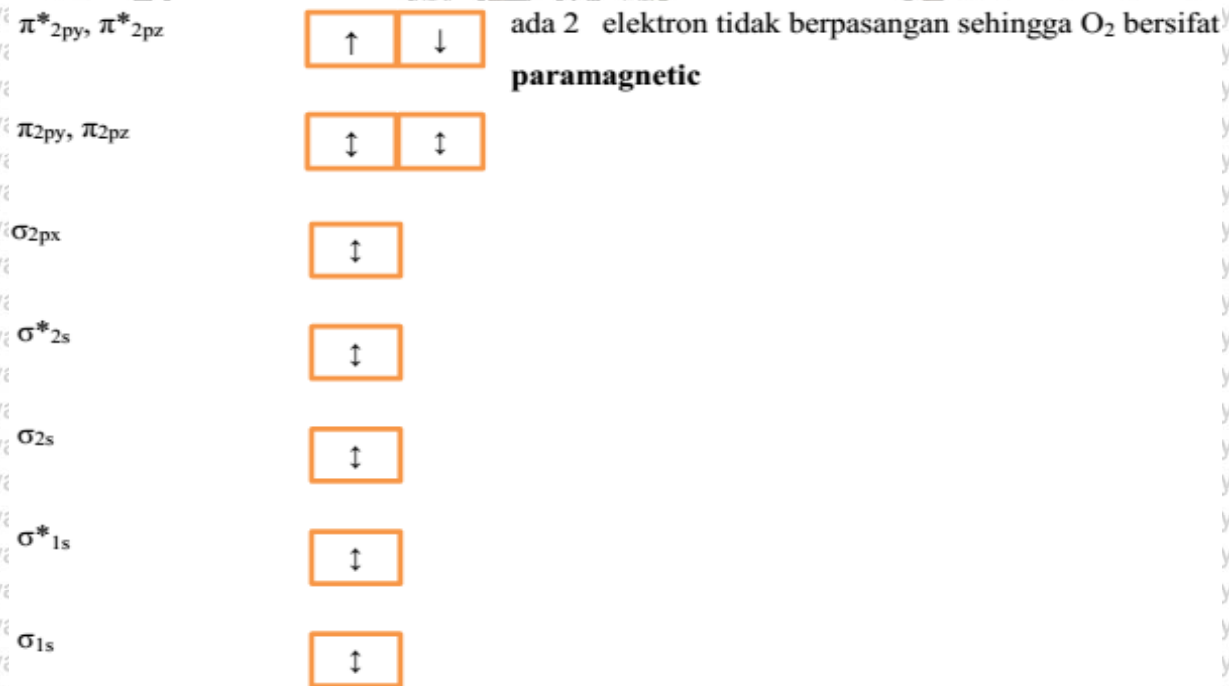
Memakai urutan peningkatan energy orbital molekul yaitu:

$$\sigma_{1s} < \sigma^*_{1s} < \sigma_{2s} < \sigma^*_{2s} < \pi_{2py} = \pi_{2pz} < \sigma_{2px} < \pi^*_{2py} = \pi^*_{2pz} < \sigma^*_{2px}$$

maka konfigurasi elektron keadaan dasar O_2 adalah:

$$(\sigma_{1s})^2 (\sigma^*_{1s})^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma^*_{2s})^2 (\sigma_{2px})^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\pi^*_{2py})^1 (\pi^*_{2pz})^1$$

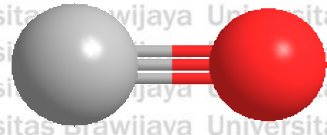
Untuk O_2 orbital σ_{2px} lebih rendah energinya daripada orbital π_{2py} dan π_{2pz} . Sesuai aturan Hund, dua elektron terakhir masuk orbital π^*_{2py} serta orbital π^*_{2pz} dengan spin sejajar.



Gambar 2.28 Orbital Molekul Oksigen (O_2)

Elektron terakhir memasuki orbital molekul adalah \downarrow sehingga bilangan kuantum spin elektron (m_s) adalah $-\frac{1}{2}$ dengan spin elektron searah jarum jam.

Tidak semua molekul yang terbentuk dari atom O bersifat paramagnetic. Molekul CO (karbon monoksida) terbentuk dari atom C dan atom O dengan ikatan rangkap tiga.



Gambar 2.29 Molekul Karbon Monoksida

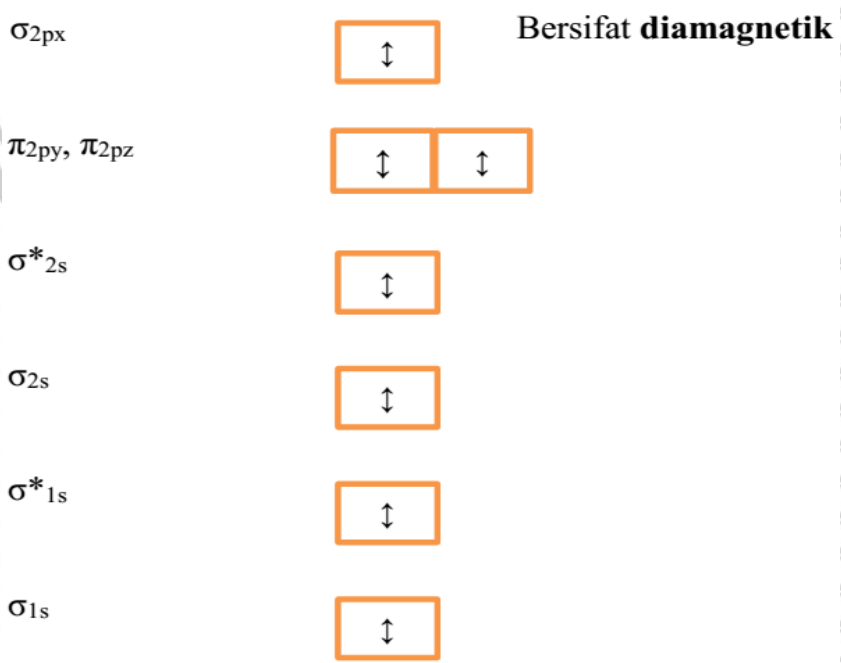
Pada molekul CO, konfigurasi elektron keadaan dasar C adalah $1s^2 2s^2 2p^2$ serta O adalah $1s^2 2s^2 2p^4$, sehingga terdapat 14 elektron pada CO. Dengan menggunakan urutan peningkatkan energy orbital molekul yaitu:

$$\sigma_{1s} < \sigma^*_{1s} < \sigma_{2s} < \sigma^*_{2s} < \pi_{2py} = \pi_{2pz} < \sigma_{2px} < \pi^*_{2py} = \pi^*_{2pz} < \sigma^*_{2px}$$

maka konfigurasi elektron keadaan dasar CO adalah:

$$(\sigma_{1s})^2 (\sigma^*_{1s})^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma^*_{2s})^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\sigma_{2px})^2$$

Sehingga orbital molekul untuk CO adalah:



Gambar 2.30 Orbital Molekul CO

2.11 Energi Potensial dan Energi Kinetik

Energi adalah kemampuan untuk mengelola pekerjaan. Semua jenis energi dapat melakukan kerja, namun tidak semuanya dapat diterapkan pada bidang kimia. Kerja dicirikan sebagai penyesuaian energi yang secara langsung diciptakan oleh suatu interaksi. *Kinetic energy* yaitu energi yang diciptakan oleh materi bergerak. *Potential energy* yaitu energi yang terjadi karena keadaan suatu materi. Energi kimia disimpan dalam molekul yang jumlahnya tergantung pada jenis dan susunan atom penyusunnya. Ketika molekul terlibat dengan reaksi energi kimia dilepas, disimpan atau diubah menjadi energi yang berbeda.

Konsep *thermodynamics* I yang bersumber dari konsep kekekalan energi, menerangkan jika energi bisa diganti dari satu struktur ke struktur berikutnya, namun tidak bisa dibuat/dilenyapkan. Konsep *thermodynamics* I bisa ditunjukkan melalui asumsi penyesuaian *internal energy* sistem pada kondisi awal serta kondisi final dari suatu interaksi. Perubahan energy dalam ΔE dituliskan dengan:

$$\Delta E = E_i - E_f$$

Dimana E_i adalah energy dalam system pada kondisi awal dan E_f adalah energy dalam system pada kondisi final. *Internal energy* pada sistem memiliki 2 bagian, yaitu *kinetic energy* serta *potential energy*. *Kinetic energy* tersusun dari bermacam gerakan sub-atom serta pergerakan elektron pada partikel. *Potential energy* dikendalikan melalui gaya tarik menarik antar elektron serta inti juga oleh gaya tolak menolak antar elektron serta inti dalam suatu partikel, termasuk kolaborasi antar atom. Dalam kimia terjadi perubahan energy yang berkaitan dengan system, sehingga persamaan konsep I yaitu:

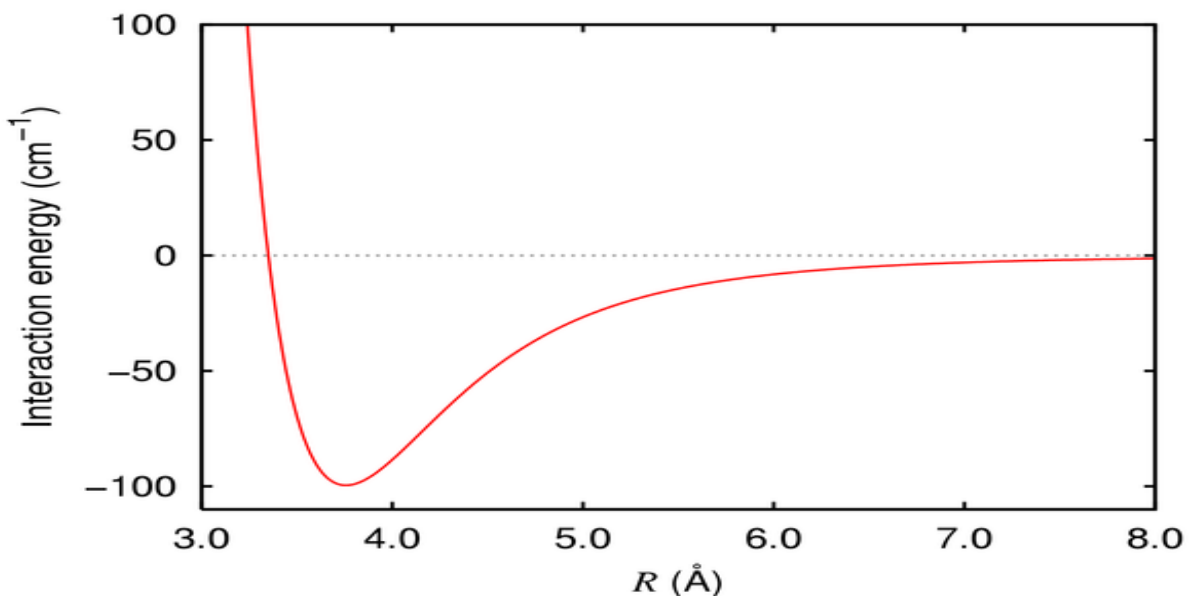
$$\Delta E = q + w$$

Kondisi tersebut menjelaskan jika penyesuaian *internal energy* ΔE dari suatu sistem merupakan banyaknya panas (q) yang ditukarkan antar sistem serta lingkungan serta kerja (w) yang dikerjakan pada/oleh sistem. Nilai panas (+) pada siklus endotermis serta (-) pada siklus eksotermis serta kerja (+) jika dikerjakan pada sistem oleh lingkungan serta (-) pada w yang dikerjakan sistem pada lingkungan. Apabila sistem melepaskan panas pada lingkungan/bekerja pada lingkungan, maka *internal energy* berkurang akibat terjadi penurunan energi, jadi panas serta kerja (-). Apabila panas diberikan pada system/sebaliknya apabila w diberikan pada sistem, *internal energy* sistem akan naik, jadi q dan w positif.

Kondisi terkini ada 2 spekulasi *quantum mechanics* yang dipakai menjelaskan susunan ikatan kovalen serta konstruksi elektron atom. Hipotesis ikatan valensi mengharapkan elektron pada suatu partikel menempati orbital atom. Hipotesis orbital molekul mengharapkan

bahwa orbital molekul disusun dari orbital inti. Susunan partikel H_2 oleh dua molekul H dapat diperjelas dengan hipotesis ikatan valensi. Hipotesis Lewis menggambarkan ikatan $H - H$ dengan sepasang elektron untuk partikel H. Pada hipotesis ikatan valensi, ikatan kovalen $H - H$ terjadi dengan tumpang tindih 2 orbital $1s$ pada partikel H. Mekanisme terbentuknya molekul H_2 bisa dijelaskan sebagai berikut:

Pada keadaan awal kedua atom H terpisah satu sama lain, tidak terjadi interaksi sehingga *potential energy* sistem (2 atom H) = 0. Saat atom berdekatan, tiap elektron ditarik inti atom lain, bersamaan dengan itu kedua elektron saling tolak, juga dengan dua inti. Pada saat atom terpisah, gaya tarik-menarik lebih besar dibandingkan tolak-menolak, akibatnya *potential energy* system turun menjadi (-) saat atom-atom berdekatan. Tren itu berlangsung hingga *potential energy* menjadi paling kecil. Saat suatu system mempunyai *potential energy* terkecil, itu adalah yang terstabil. Keadaan tersebut dikaitkan pada tumpang tindih yang baik antara orbital $1s$ serta penyusunan H_2 yang stabil. Apabila jarak antar inti diperkecil kembali, *potential energy* akan naik tinggi serta akhirnya bernilai (+) karena naiknya tolakan elektron serta inti. Menurut konsep kekekalan energi, turunnya *potential energy* akibat penyusunan molekul H_2 juga diikuti pelepasan energy. Untuk memutuskan $H - H$, energy harus diberikan pada molekul.



Gambar 2.31 Hubungan Jarak Atom dengan Energi Interaksi/Energi Potensial

Pada Gambar 2.31 terlihat bahwa ketika dua atom masih dalam kondisi terpisah dengan jarak paling jauh akan mempunyai energy potensial paling besar. Semakin dekat jarak

dua atom maka energy potensial akan semakin kecil. Ketika dua atom berikatan membentuk molekul maka nilai energy potensial paling minimum karena berada pada kondisi paling stabil.

2.12 Entalphy of Reaction

Kebanyakan reaksi kimia terjadi pada P konstan. Pertukaran panas dalam proses ini sama dengan perubahan entalpi. Pada setiap reaksi: reaktan \rightarrow produk

Entalpi reaksi atau ΔH adalah selisih *entalphy product* dengan *entalphy reactant*:

$$\Delta H = H(\text{product}) - H(\text{reactant})$$

Entalphy of reaction (+) atau (-) bergantung pada reaksi. Pada reaksi endoterm (panas dikonsumsi oleh sistem dari lingkungan), H (+) atau ($\Delta H > 0$). Pada reaksi eksotermis (panas dikirim dari sistem ke lingkungan), H negatif ($\Delta H < 0$).

Entalphy of reaction standar ($\Delta H^{\circ}_{\text{reaksi}}$) adalah *entalphy of reaction* yang berlangsung untuk tekanan 1 atmosfer. Misalkan untuk reaksi berikut:



dimana e, f, g serta h merupakan koefisien stoikiometri. Pada reaksi tersebut $\Delta H^{\circ}_{\text{reaksi}}$ dihitung dengan:

$$\Delta H^{\circ}_{\text{reaksi}} = [g\Delta H^{\circ}_f(G) + h\Delta H^{\circ}_f(H)] - [e\Delta H^{\circ}_f(E) + F\Delta H^{\circ}_f(F)]$$

Dengan e, f, g serta h dalam mol. Kita dapat menggeneralisasi persamaan tersebut menjadi:

$$\Delta H^{\circ}_{\text{reaksi}} = \sum n\Delta H^{\circ}_f(\text{product}) - \sum m\Delta H^{\circ}_f(\text{reactant})$$

Dimana ΔH°_f merupakan entalpi pembentukan standar sebagai perubahan panas yang diberikan saat 1 molekul unsur disusun dari komponennya pada P = 1 atmosfer, m serta n adalah koefisien stoikiometri (dalam mol) *reactant* serta *product* serta Σ adalah totalnya.

Agar dapat menggunakan kondisi di atas untuk menentukan $\Delta H^{\circ}_{\text{reaksi}}$ kita harus menentukan ΔH°_f dari campuran yang ikut dalam proses tersebut. Untuk menentukan nilainya kita dapat menggunakan strategi langsung.

Ilustrasi estimasi teknik langsung:

Untuk menentukan *entalphy of formation* CO₂ dengan menggunakan entalpi C (grafit) serta O dalam kondisi standarnya diubah menjadi CO₂ dalam kondisi standarnya:



Dihitung dengan persamaan berikut:

$$\Delta H^{\circ}_{\text{reaksi}} = [g\Delta H^{\circ}_f(G) + h\Delta H^{\circ}_f(H)] - [e\Delta H^{\circ}_f(E) + F\Delta H^{\circ}_f(F)]$$

$$\Delta H^{\circ}_{\text{reaksi}} = (1 \text{ mol}) \Delta H^{\circ}_f(CO_2, g) - [(1 \text{ mol}) \Delta H^{\circ}_f(C, \text{grafit}) + (1 \text{ mol}) \Delta H^{\circ}_f(O_2, g)]$$

$$= -393,5 \text{ kJ}$$

Karena C dan O₂ adalah bentuk alotropik stabil dari komponen tersebut, maka $\Delta H_f^\circ(\text{C, grafit})$ dan $\Delta H_f^\circ(\text{O}_2, \text{g}) = 0$. Sehingga:

$$\Delta H_{\text{reaksi}}^\circ = (1 \text{ molekul}) \Delta H_f^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) = -393,5 \text{ kJ}$$

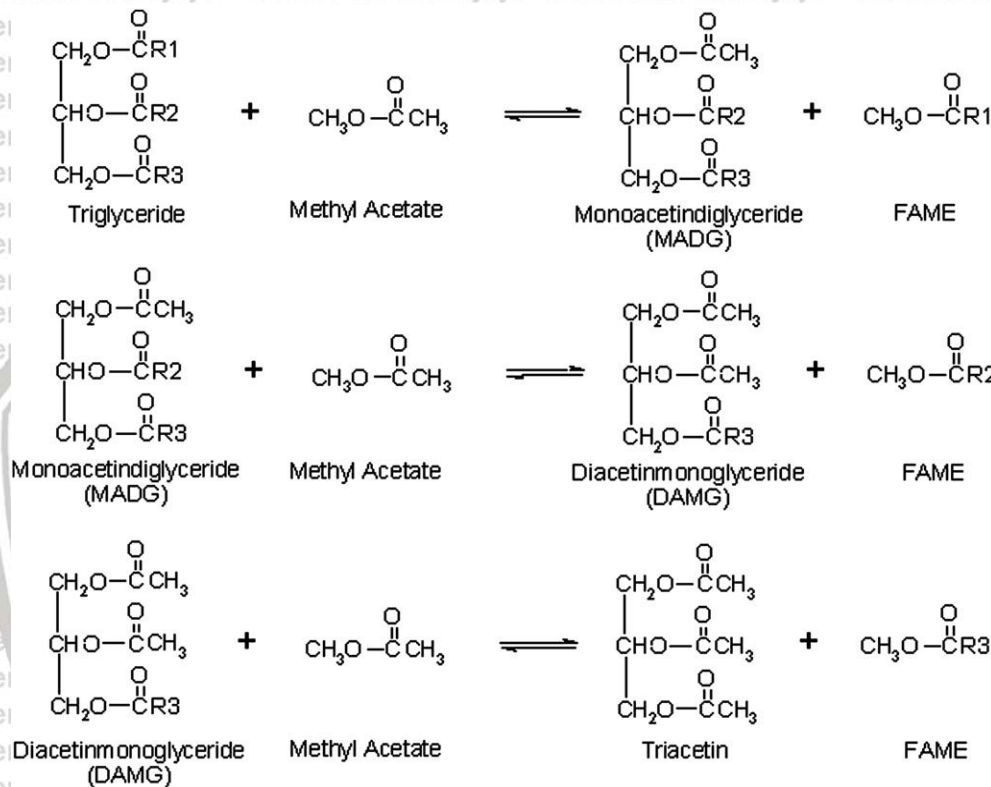
Sehingga $\Delta H_f^\circ(\text{CO}_2, \text{g})$ adalah -393,5 kJ



BAB III KERANGKA KONSEP PENELITIAN

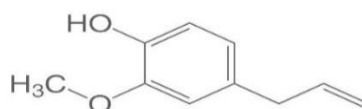
3.1. Bio-katalis Senyawa Aromatik

Reaksi interesterifikasi adalah reaksi antara senyawa ester untuk menghasilkan senyawa ester yang baru. Pada proses pembuatan biodiesel, reaksi interesterifikasi antara trigliserida dengan alkil asetat akan menghasilkan alkil ester serta triasetin.

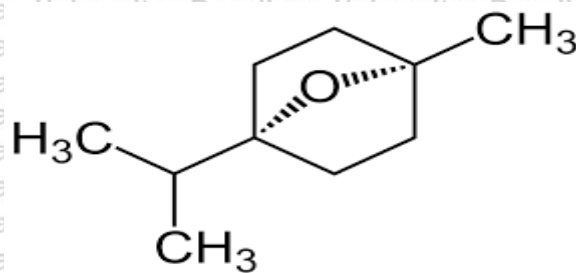


Gambar 3.1 Reaksi Interesterifikasi 3 Tahap Trigliserida dan Metil Asetat

Permasalahan utama pada reaksi ini adalah sifat dari kedua reaktan yang saling bertentangan yaitu trigliserida bersifat non polar sedangkan metil asetat bersifat polar. Untuk mengatasi hal tersebut, maka digunakan katalis yang akan meningkatkan kelarutan kedua reaktan dan mempercepat reaksi. Katalis yang digunakan adalah senyawa aromatik organik yaitu minyak kayu putih dan eugenol. Sineol adalah komponen utama minyak kayu putih.

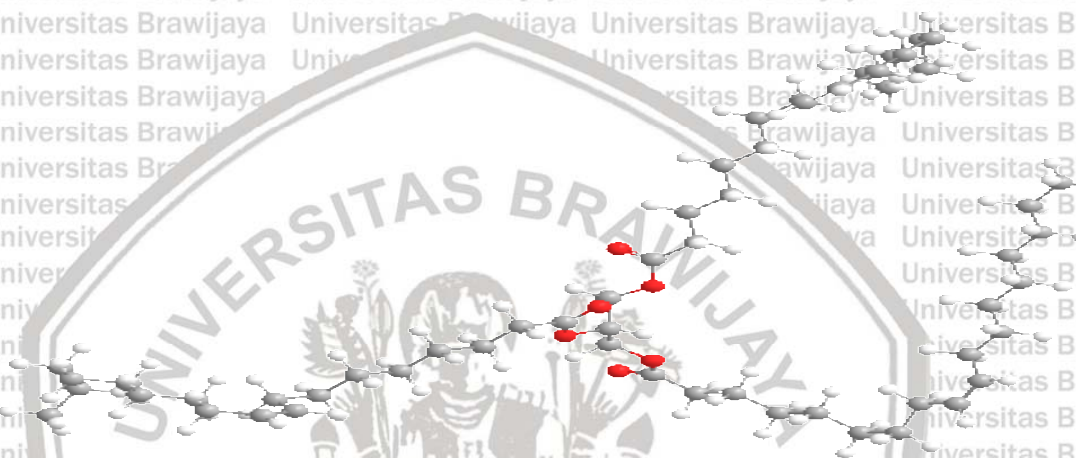


Gambar 3.2 Struktur geometri eugenol (C₁₀H₁₂O₂)



Gambar 3.3 Struktur geometri sineol ($C_{10}H_{18}O$)

3.2. Pengaruh Medan Magnet Senyawa Aromatik



Gambar 3.4 Struktur molekul trigliserida

Pada trigliserida dan metil asetat adanya gugus C—O dan C=O bersifat polar karena mempunyai moment dipole dan gugus ini yang mengikat kuat gugus R (alkil) yang bersifat non polar pada trigliserida dan metil asetat dengan gaya van der Waals (interaksi dipol-dipol terinduksi) (Chang, 2003). Gugus C=O mempunyai keelektronegatifan lebih besar dalam molekul, sehingga lebih aktif terhadap medan magnet (Sajjadi *et al.* 2014). Senyawa aromatik organik seperti eugenol dan sineol menghasilkan medan magnet karena adanya delokalisasi elektron pada struktur aromatik senyawa tersebut (Purnami *et al.*, 2019; Soebiyakto *et al.*, 2020). Jika gugus C=O didekatkan dengan senyawa yang mempunyai medan magnet, maka gaya van der Waals antara molekul dan rantai karbon akan melemah (Purnami *et al.*, 2019). Dengan lemahnya gaya VDW, maka dengan menambahkan energi (misalkan energi panas) akan memutuskan ikatan R. Ikatan C—C mempunyai energi ikatan paling kecil yaitu 347 kJ/mol sehingga akan putus terlebih dahulu. Dengan putusnya gugus R pada trigliserida dan metil asetat, menyebabkan reaksi substitusi dimana gugus R pada trigliserida dan gugus R metil asetat akan saling bertukar tempat sesuai dengan mekanisme reaksi interesterifikasi.

Tabel 3.1 Data Energi Ikatan Molekul

Ikatan	Energi Ikatan (kJ/mol)	Ikatan	Energi Ikatan (kJ/mol)
H – H	436,4	C – S	255
H – N	393	C = S	477
H – O	460	N – N	193
H – S	368	N = N	418
H – P	326	N ≡ N	941,4
H – F	568,2	N – O	176
H – Cl	431,9	N – P	209
H – Br	366,1	O – O	142
H – I	298,3	O = O	498,7
C – H	414	O – P	502
C – C	347	O = S	469
C = C	620	P – P	197
C ≡ C	812	P = P	489
C – N	276	S – S	268
C = N	615	S = S	352
C ≡ N	891	F – F	156,9
C – O	351	Cl – Cl	242,7
C = O	745	Br – Br	192,5
C – P	263	I – I	151

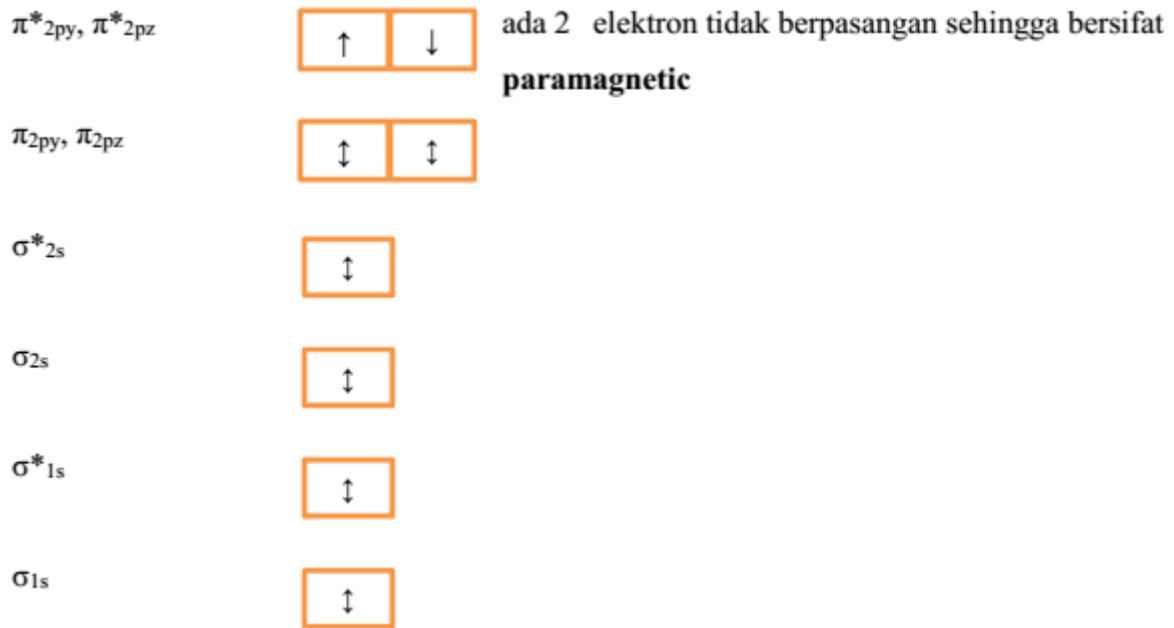
Pada gugus C=O, struktur elektron awal C adalah $1s^2 2s^2 2p^2$ dan O adalah $1s^2 2s^2 2p^4$, sehingga terdapat 14 elektron pada C=O. Dengan menggunakan urutan peningkatan energy orbital molekul yaitu:

$$\sigma_{1s} < \sigma^*_{1s} < \sigma_{2s} < \sigma^*_{2s} < \pi_{2py} = \pi_{2pz} < \sigma_{2px} < \pi^*_{2py} = \pi^*_{2pz} < \sigma^*_{2px}$$


maka konfigurasi elektron keadaan dasar C=O adalah:

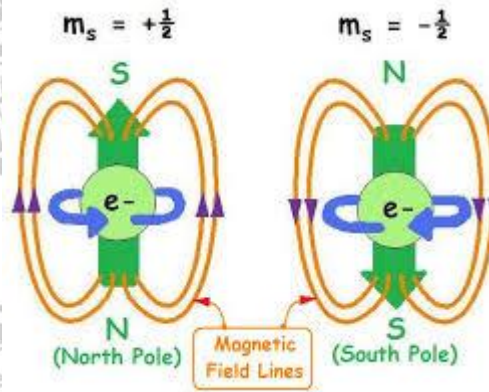
$$(\sigma_{1s})^2 (\sigma^*_{1s})^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma^*_{2s})^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\pi^*_{2py})^1 (\pi^*_{2pz})^1$$

Untuk C=O orbital σ_{2px} lebih tinggi energinya dibanding orbital π^*_{2py} dan π^*_{2pz} . Sesuai hukum Hund, kedua elektron terakhir masuk orbital π^*_{2py} serta orbital π^*_{2pz} dengan spin sejajar.

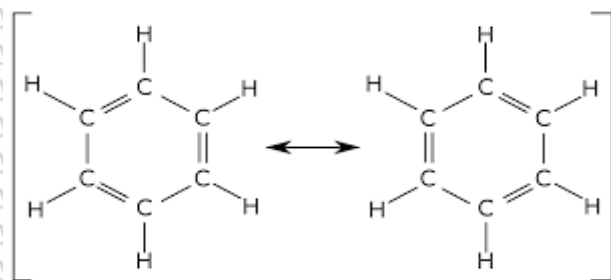


Gambar 3.5 Orbital Molekul C=O

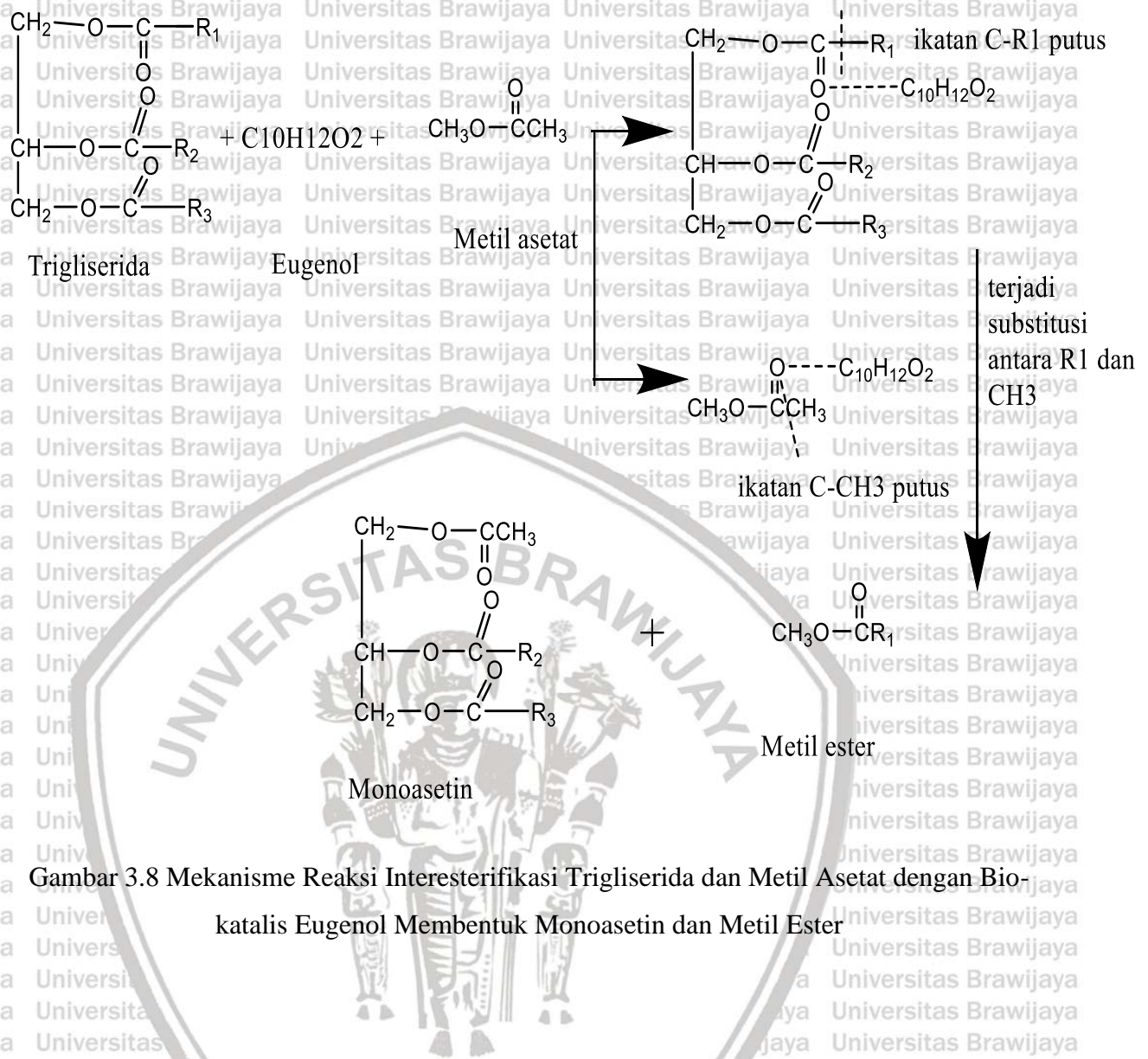
Elektron terakhir memasuki orbital molekul adalah  sehingga bilangan kuantum spin elektron (m_s) adalah $-\frac{1}{2}$ dengan spin elektron searah jarum jam.



Gambar 3.6 Spin elektron pada medan magnet

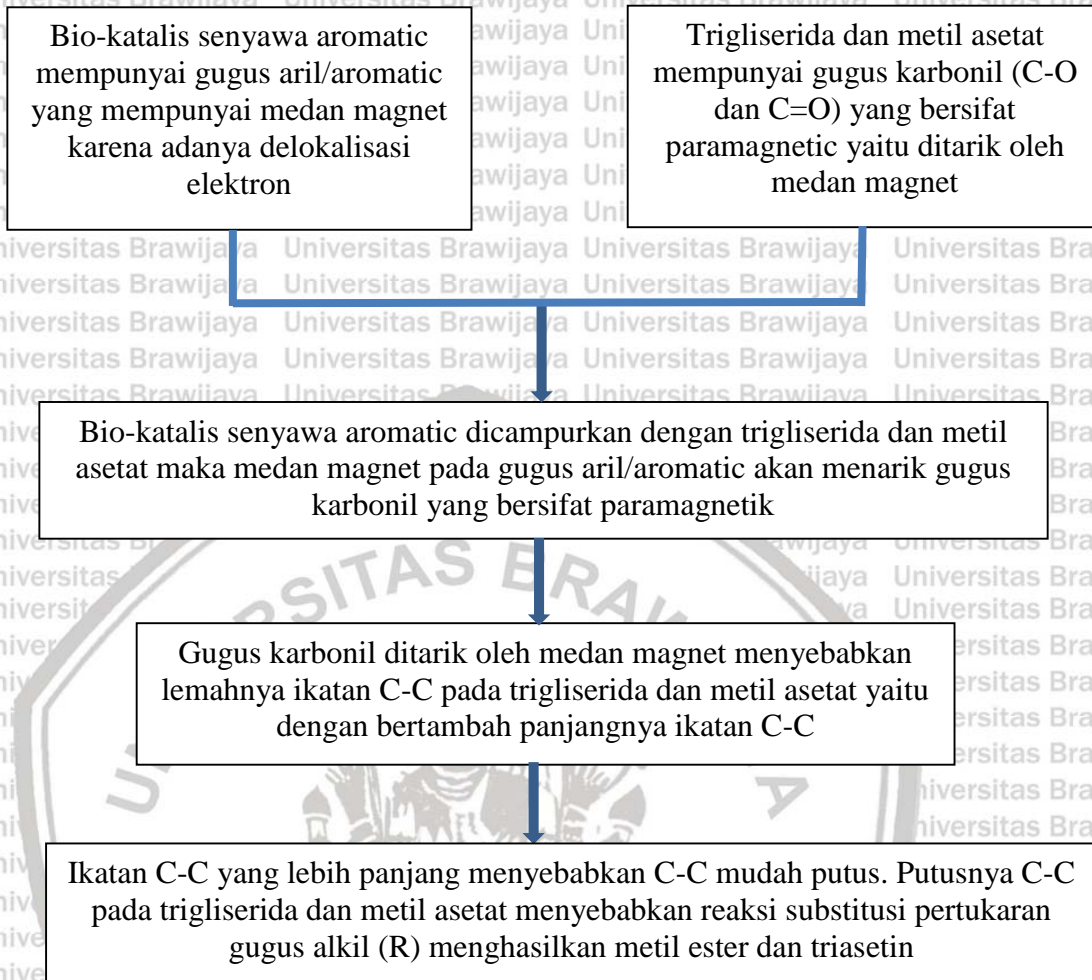


Gambar 3.7 Struktur delokalisasi senyawa aromatik (benzene)



Gambar 3.8 Mekanisme Reaksi Interesterifikasi Trigliserida dan Metil Asetat dengan Bio-katalis Eugenol Membentuk Monoasetin dan Metil Ester

Kerangka Konsep Penelitian



Gambar 3.9 Kerangka Konsep Penelitian

3.3 Hipotesa

Bio-katalis senyawa aromatic yang mengandung magnet akan memengaruhi kestabilan elektron pada trigliserida dan metil asetat. Jika elektron tidak stabil maka akan mudah keluar/lompat dari pita valensi ke pita konduksi. Keluarnya elektron akan mempermudah terjadinya reaksi interesterifikasi antara trigliserida dan metil asetat.

3.4 Kebaruan Penelitian

Kebaruan (*novelty*) dari penelitian yang dilakukan adalah penggunaan senyawa aromatic organik sebagai pelarut reaktan yaitu trigliserida dan metil asetat serta sebagai bio-katalis untuk proses interesterifikasi minyak kelapa sawit membentuk FAME dan triasetin.

Selain itu pada proses ini bio-katalis senyawa aromatic tidak dilakukan pemisahan karena berfungsi sebagai antioksidan pada biodiesel.



BAB IV METODE PENELITIAN

4.1 Metode yang Dilakukan

Metode yang dilakukan pada riset ini yaitu metode percobaan, yakni dengan melakukan percobaan, analisa dan perhitungan sehingga bisa menghitung konsentrasi dan yield dari produk yang dihasilkan sesuai variasi yang digunakan. Data diperoleh dengan menganalisa konsentrasi produk yang dihasilkan (metil ester dan triasetin) dengan GC. Data hasil analisa kemudian dibuat dalam bentuk tabel dan gambar. Selain dengan metode ekeperimental juga dilakukan simulasi dengan software ChemDraw Professional 15.0 untuk melihat perilaku molecular senyawa-senyawa yang terlibat dalam reaksi interesterifikasi.

Urutan proses sebagai berikut:

1. Proses interesterifikasi minyak kelapa sawit dengan katalis KOH untuk mencari kondisi optimum proses yaitu massa katalis dan kecepatan pengadukan yang akan digunakan sebagai variable proses yang akan dilakukan.
2. Reaksi interesterifikasi minyak kelapa sawit dengan katalis basa (NaOH) dan bio-katalis senyawa aromatic (eugenol dan minyak kayu putih)
3. Analisa komposisi metil ester dengan GC (Gas Kromatografi) dan analisa komposisi hasil reaksi dengan GC-MS (*Gas Chromatography Mass Spectrum*)
4. Analisa sifat fisik metil ester yaitu densitas dan angka asam
5. Simulasi dengan software ChemDraw Professional 15.0

4.2 Rancangan Penelitian

Penelitian yang dilakukan yaitu menganalisis peran katalis yaitu katalis basa (KOH, NaOH) dan bio-katalis senyawa aromatic yaitu eugenol dan minyak kayu putih terhadap proses pembentukan biodiesel dan triasetin, terutama terkait dengan konsentrasi metil ester dan triasetin yang dihasilkan. Penelitian ini juga menganalisis pengaruh variable penelitian yaitu jenis katalis dan waktu reaksi terhadap proses pembentukan biodiesel dan triasetin.

Dilakukan juga analisa massa jenis dan *cetane number* produk yang dihasilkan menurut standar biodiesel SNI 7182:2015. Simulasi menggunakan ChemDraw untuk mengetahui perilaku molekuler senyawa-senyawa yang terlibat dalam reaksi yang meliputi jarak atom, panjang ikatan, energy potensial, energy kinetic dan moment dipole.

4.3 Peralatan dan Material

Peralatan yang dibutuhkan pada riset ini adalah *hot plate* dan *magnetic stirrer*, kondensor, labu leher tiga, oven, pendingin balik, piknometer 5 mL, *stopwatch*, termometer, Erlenmeyer, corong pemisah, alat destilasi satu set dan timbangan analitis.

Material yang digunakan dalam penelitian adalah aquadest (H₂O), metanol p.a (Merck, 99,9%), asam oksalat p.a, aseton, kalium hidroksida (KOH) (Merck, 90%), metil asetat (Sigma Aldrich, 99,9%), minyak kelapa sawit merk Sunco, natrium hidroksida (NaOH) p.a (Merck, 90%), indicator phenolphthalein (pp), asam asetat p.a, minyak kayu putih (*oleum cajuputi*) dan eugenol 95%.

4.4 Tahapan Penelitian

Tahapan penelitian yang dikerjakan yaitu :

a). Persiapan Bahan

Minyak kelapa sawit dianalisa %FFA dan kadar airnya. Jika %FFA < 3% dan kadar air < 0,6% bisa langsung digunakan untuk reaksi interesterifikasi. Jika %FFA > 3% dilakukan reaksi esterifikasi dan jika kadar air > 0,6% dilakukan penguapan dalam oven pada suhu 110°C sampai massa konstan.

Pengujian *Free Fatty Acid* (Damanik, 2008)

Timbang 20 gr minyak serta panaskan minyak hingga temperature 65°C. Tambahkan 50 mL etanol 96% dan 3 tetes phenolphthalein, dinginkan campuran pada temperature kamar lalu titrasi menggunakan KOH 0,1 N hingga warna berubah merah muda. Catat titran yang diperlukan. Menghitung % *Free Fatty Acid* dengan persamaan (1):

$$\%FFA = \frac{ml\ KOH \times N\ KOH \times BM\ asam\ lemak}{massa\ sampel \times 1000} \times 100\% \dots\dots\dots(1)$$

Menghitung Kandungan Air

Timbang 10 gram minyak, dan masukkan pada oven di suhu 110°C untuk waktu 0,5 jam. Turunkan suhu dalam desikator hingga temperature ruang dan massa tetap, dan hitung kadar air minyak sawit dengan persamaan (2):

$$Kadar\ air = \frac{massa\ awal - massa\ akhir}{massa\ awal} \times 100\% \dots\dots\dots(2)$$

b). Reaksi Interesterifikasi dengan Katalis KOH

Timbang minyak kelapa sawit seberat 250 gram lalu panaskan sampai suhu 60°C. Campurkan katalis KOH dengan massa 0,25; 0,5 dan 0,75% wt. dengan metil asetat kedalam *three-neck flask* sebagai reaktor yang telah dilengkapi kondensor reflux. Untuk katalis KOH sebanyak 0,25% wt. maka massa katalis KOH yang digunakan adalah 0,625 gram, untuk katalis KOH = 0,5% minyak maka massa KOH = 1,25 gram dan untuk katalis KOH = 0,75% minyak maka massa KOH = 1,875 gram. Perbandingan mol minyak dan metil asetat adalah 1:6 yaitu minyak kelapa sawit = 250 gram dan metil asetat = 135,957 gram. Campuran kemudian dipanaskan sampai mencapai suhu reaksi 60°C menggunakan *hot plate* yang dilengkapi dengan *magnetic stirrer*. Memasukkan minyak kelapa sawit pada *three-neck flask* saat temperature reaksi tercapai, mempertahankan suhu reaksi 60°C serta melakukan pengadukan sesuai variabel kecepatan pengadukan 200, 300, 400, 500 dan 600 rpm dan waktu reaksi 1 jam.

c). Pemisahan Produk dengan *Water Washing*

Mencampurkan air panas dengan suhu 60°C sebanyak 50% dari volume hasil reaksi ke dalam hasil reaksi serta asam asetat ditambahkan seberat 0,03% vol. minyak. Penambahan asam asetat bertujuan untuk menghentikan reaksi yaitu dengan netralisasi katalis KOH oleh asam asetat membentuk kalium asetat. Memasukkan campuran ke dalam Erlenmeyer dan mengaduk dengan kecepatan 300 rpm selama 20 menit. Memisahkan air cucian dan produk dengan corong pemisah selama 1 jam. Lapisan bawah merupakan campuran dari air, metil asetat dan hasil reaksi netralisasi katalis, sedangkan lapisan atas merupakan campuran dari FAME, triasetin serta minyak yang tidak bereaksi. Mengulangi pencucian sampai air cucian jernih dan pH netral. Memurnikan biodiesel hasil pencucian dengan destilasi pada suhu 105°C untuk memisahkan metil asetat ($t_d = 57^\circ\text{C}$) dan air yang masih terikut pada produk. Memasukkan biodiesel dalam desikator sampai dilakukan analisa selanjutnya.

d). Reaksi Interesterifikasi dengan Katalis NaOH

Timbang minyak kelapa sawit seberat 250 gram dan panaskan sampai suhu 60°C. Campurkan katalis NaOH sebanyak 0,75% massa minyak = 1,875 gram dan metil asetat kedalam labu leher tiga yang telah dilengkapi kondensor. Perbandingan mol minyak kelapa sawit dan metil asetat adalah 1:6 yaitu minyak kelapa sawit = 250 gram dan metil asetat = 135,957 gram. Panaskan campuran sampai suhu reaksi 60°C menggunakan *hot plate* yang

dilengkapi dengan magnetic stirrer. Memasukkan minyak kelapa sawit pada *three-neck flask* saat temperature reaksi tercapai, mempertahankan suhu reaksi 60°C, mengaduk dengan kecepatan pengadukan 300 rpm serta mengambil 50 gram hasil reaksi dengan variable waktu reaksi 15, 30, 45, 60 dan 75 menit. Mencampurkan air panas dengan suhu 60°C sebanyak 50% dari volume hasil reaksi ke dalam hasil reaksi serta menambahkan asam asetat sebanyak 0,03% dari volume hasil reaksi. Penambahan asam asetat bertujuan untuk menghentikan reaksi yaitu dengan netralisasi katalis NaOH oleh asam asetat membentuk natrium asetat. Memasukkan campuran ke dalam Erlenmeyer dan mengaduk dengan kecepatan 300 rpm selama 20 menit. Memisahkan air cucian dan produk dengan corong pemisah selama 1 jam. Lapisan bawah merupakan campuran dari air, metil asetat dan hasil reaksi netralisasi katalis, sedangkan bagian atas terdiri dari FAME, triasetin serta minyak yang tidak bereaksi. Mengulangi pencucian sampai air cucian jernih dan pH netral. Memurnikan biodiesel hasil pencucian dengan destilasi pada suhu 105°C untuk memisahkan metil asetat serta air yang masih terikut pada produk. Memasukkan biodiesel dalam desikator sampai dilakukan analisa selanjutnya.

e). Reaksi Interesterifikasi dengan Bio-katalis Senyawa Aromatik

Minyak kelapa sawit, metil asetat dan bio-katalis ditimbang sesuai dengan variabel penelitian. Masukkan minyak pada *three-neck flask*, metil asetat serta bio-katalis dimasukkan ke dalam Erlenmeyer terpisah, kemudian masing-masing bahan dipanaskan pada suhu 60°C. Setelah suhu reaksi 60°C tercapai, metil asetat dan bio-katalis dimasukkan pada *three-neck flask* berisi minyak yang sudah dipanaskan sampai suhu 60°C dengan *hot plate*. Setelah semua bahan dimasukkan labu leher tiga yang telah dilengkapi kondensor untuk refluks serta suhu reaksi dipertahankan 60°C, dilakukan pengadukan 300 rpm dengan *magnetic stirrer* dan penghitungan waktu reaksi dimulai sesuai variable penelitian. Setelah waktu reaksi tercapai, sample hasil reaksi sebanyak 50 gram diambil untuk setiap variable waktu reaksi.

f). Proses Pemisahan Hasil Reaksi Interesterifikasi dengan Bio-katalis Senyawa Aromatik

Sampel hasil reaksi kemudian di distilasi di suhu 105°C untuk memisahkan sisa metil asetat serta air dari campuran hasil reaksi. Distilasi dilakukan sampai tidak ada distilat yang menetes. Sebagai distilat adalah metil asetat (td = 57°C) dan air (td = 100°C). Sebagai residu adalah minyak/trigliserida sisa reaksi (td = 383°C), metil ester (td = 373,78°C), triasetin (td = 306,74°C), eugenol (td = 253,4°C) atau sineol (td = 176,4°C). Setelah distilasi selesai, residu

hasil distilasi ditimbang sebagai produk yaitu metil ester + triasetin hasil reaksi interesterifikasi dan dianalisis konsentrasi dan komposisi dengan GC. Produk pada kondisi optimum dilakukan analisis sesuai dengan standard biodiesel (SNI 7182-2015).

Menghitung *crude yield* produk dengan persamaan (3):

$$\text{Crude Yield (\%)} = \frac{\text{Massa Produk (gram)}}{\text{Massa Minyak Awal (gram)}} \times 100\% \quad \dots\dots\dots(3)$$

g. Analisa

Uji Massa Jenis/densitas

Pengujian massa jenis yaitu mencatat massa pikno tidak berisi lalu FAME dimasukkan ke dalam pikno serta mencatat massa pikno berisi FAME. Massa jenis dihitung dengan persamaan (4):

$$\text{Densitas} = \frac{\text{massa pikno isi} - \text{massa pikno kosong}}{\text{volume piknometer}} \quad \dots\dots\dots(4)$$

Analisa Acid Number

Analisa *acid number* yaitu membuat 100 mL larutan KOH 0,1 N, lalu timbang sekitar 20 gr FAME pada Erlenmeyer dan tambahkan 100 mL aseton. Tambahkan indikator phenolphthalein tiga drop dan titrasi hingga warna merah muda bertahan sekitar 15 detik.

Acid number dihitung dengan persamaan (5):

$$\text{Angka asam} = \frac{56,1 \times \text{volume KOH} \times \text{N KOH}}{\text{massa sampel}} \quad \dots\dots\dots(5)$$

Analisa Metil Ester dan Hasil Reaksi

Komposisi serta konsentrasi FAME dianalisa dengan *Gas Chromatography* (GC) merk Shimadzu yang datanya:

- Column : BPX5 0,25µm, 12 m x 0,53 mm ID
- Initial temp : 100°C, 0,5 min
- Rate 1 : 50°C/min
- Temp : 280°C
- Rate 2 : 10°C/min

- Final temp : 360°C, 5 min
- Carrier gas : He, 5 min
- Detektor : FID
- Injection mode : on column (OCI-5)
- Injection volume : 1 µl

Analisa hasil reaksi menggunakan GC-MS (*Gas Chromatography Mass Spectrum*) hanya dilakukan pada kondisi optimum proses dengan bio-katalis eugenol dan minyak kayu putih.

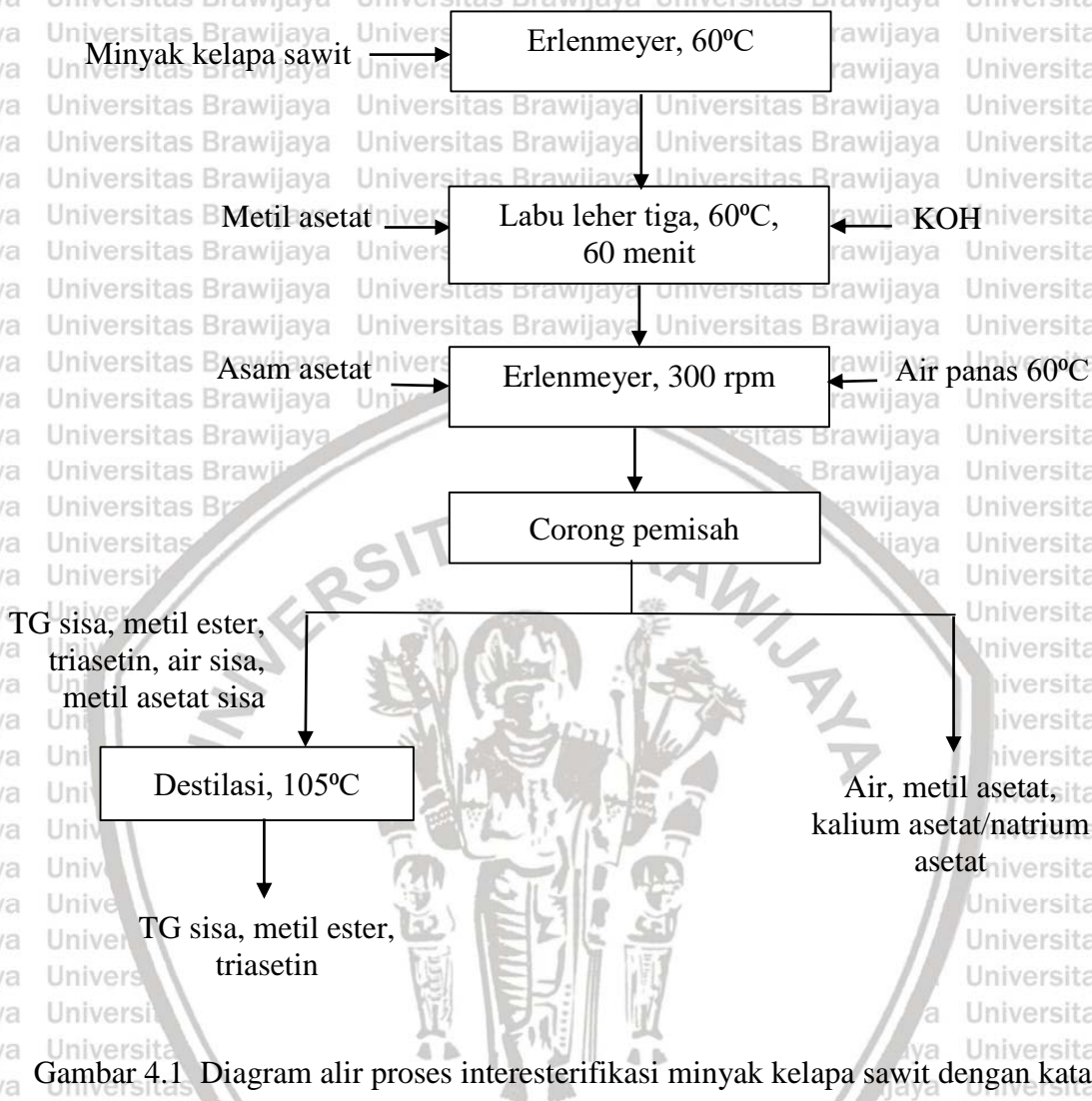
Kondisi operasi GC-MS adalah:

- Column Oven Temperature : 80,0°C
- Ignition Temperature : 310,00°C
- Injection Mode : Split
- Flow Control Mode : Linear Velocity
- Pressure : 10,9 kPa
- Total Flow : 71,9 mL/min
- Column Flow : 0,45 mL/min
- Linear Velocity : 24,8 cm/detik
- Split Ratio : 152,1
- High Pressure Injection : OFF
- Carrier Gas Saver : OFF
- Splitter Hold : OFF

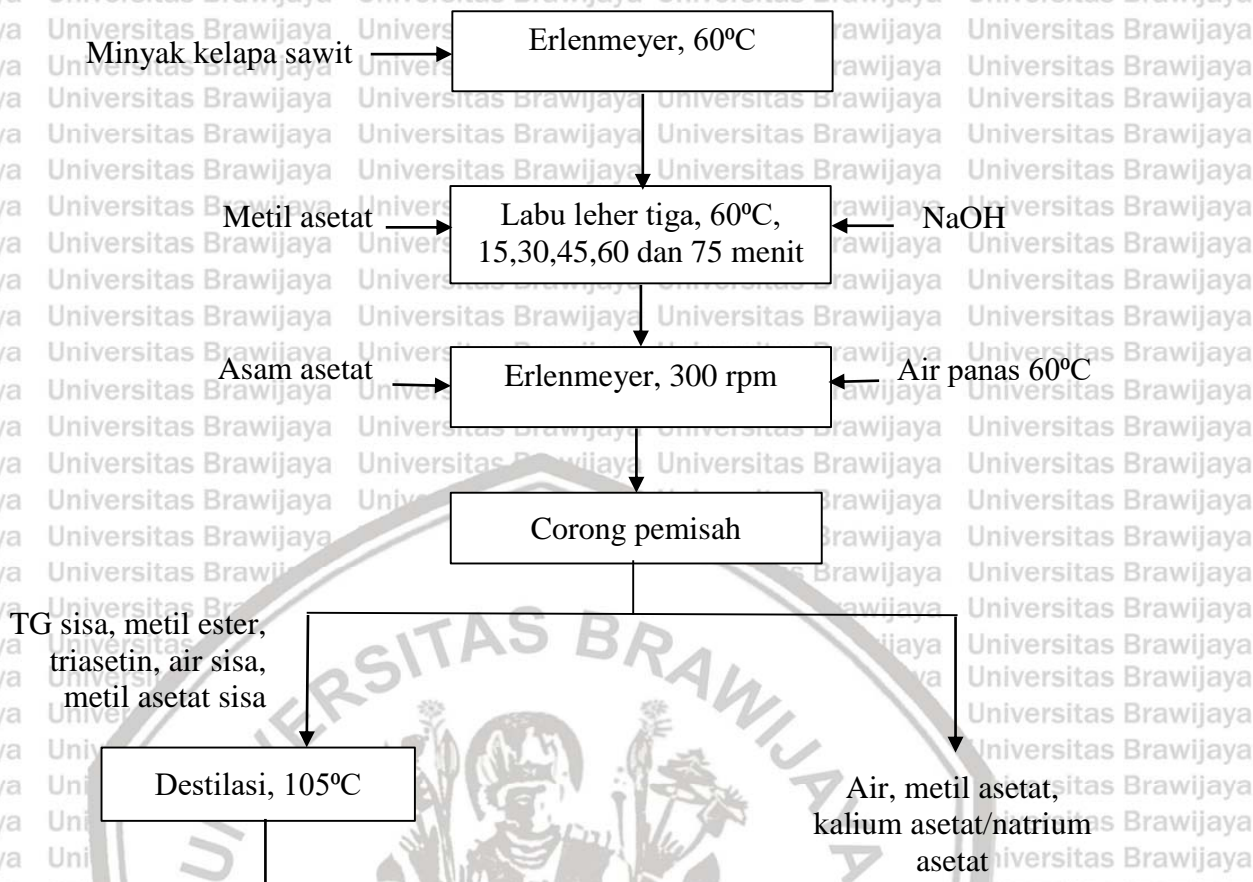
Oven Temperature Program

Rate	Temperature (°C)	Hold Time (menit)
-	80,0	3,00
5,00	310,0	3,00

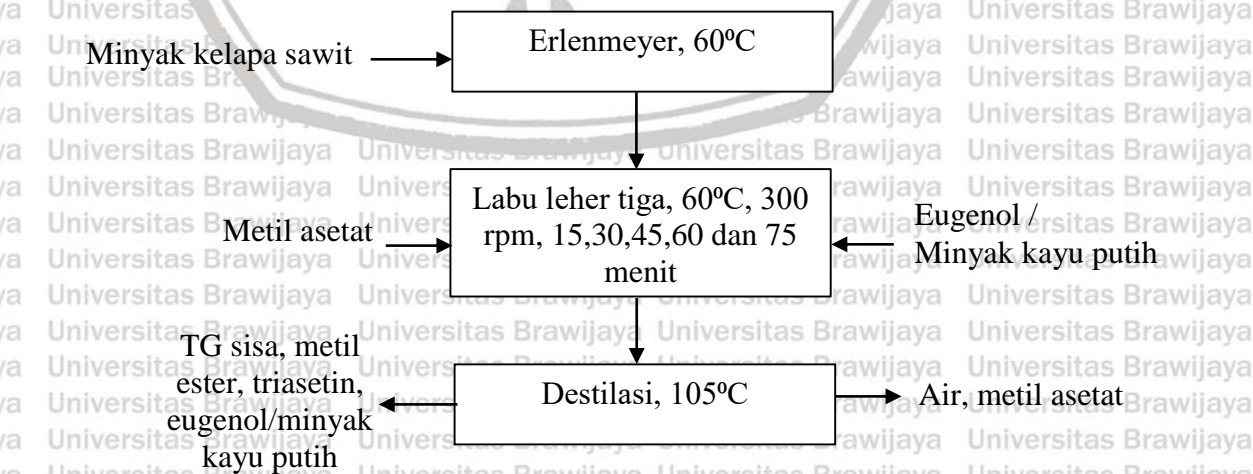
4.5 Diagram Alir Penelitian



Gambar 4.1 Diagram alir proses interesterifikasi minyak kelapa sawit dengan katalis KOH

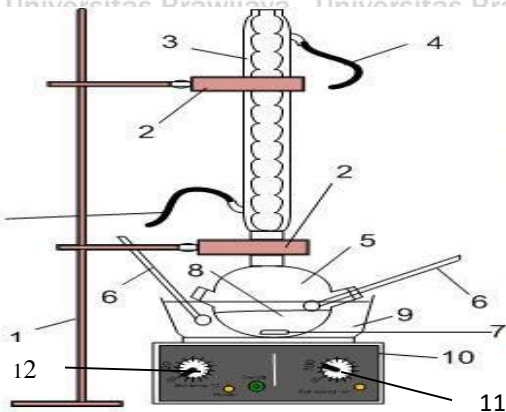


Gambar 4.2 Diagram alir proses dengan katalis NaOH



Gambar 4.3 Diagram alir proses interesterifikasi minyak kelapa sawit dengan bio-katalis

4.6 Deskripsi Peralatan



Gambar 4.4 Gambar reaktor intersterifikasi

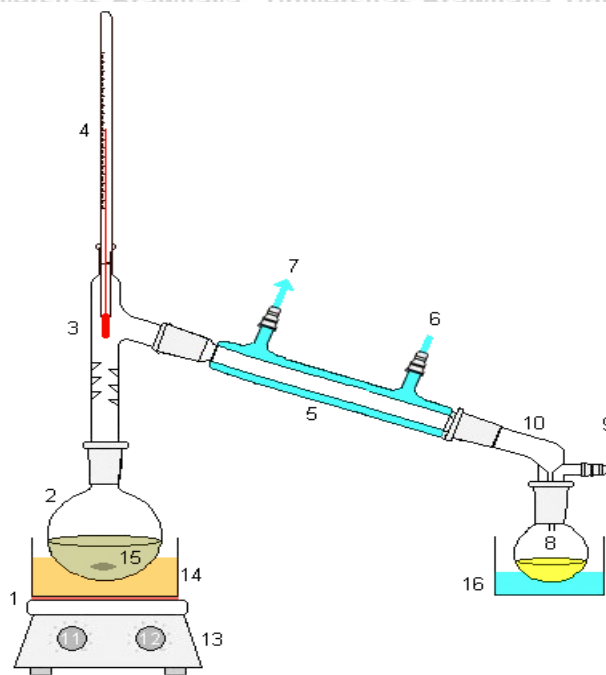
Keterangan:

1. Statif
2. Klem
3. Pendingin balik
4. Air pendingin
5. Labu leher tiga
6. Termometer
7. *Magnetic Stirrer*
8. Tempat bahan
9. Panci wadah labu leher tiga
10. *Hot plate*
11. Kecepatan pengadukan
12. Pengaturan temperatur

Mekanisme Penggunaan Alat:

Minyak kelapa sawit dipanaskan pada labu leher tiga (5) yang dilengkapi dengan *hot plate* (10) sampai suhu 60°C. Metil asetat dan katalis juga dipanasi sampai suhu 60°C pada Erlenmeyer terpisah. Setelah semua bahan mencapai suhu 60°C, masukkan metil asetat dan katalis ke *three-neck flask* yang telah diisi *palm oil*. Sesudah suhu semua bahan dipertahankan pada temperature 60°C maka perhitungan reaksi dimulai. Labu leher tiga dilengkapi dengan pendingin balik (3) dengan saluran keluar masuk air pendingin (4) untuk merubah fase metil asetat selama reaksi dari gas menjadi cair kembali (td metil asetat = 57°C). Kecepatan pengadukan diatur dengan putaran kecepatan (11) dimana di dalam labu leher tiga telah

dimasukkan *magnetic stirrer* (7), sedangkan suhu reaksi diatur dengan putaran pengatur temperatur (12) dimana untuk mengetahui suhu dalam campuran diletakkan termometer (6) ke dalam labu leher tiga. Untuk memperkokoh letak labu leher tiga dan refluks digunakan statif (1) dan klem (2). Untuk mengamankan labu leher tiga supaya tidak mudah pecah dan supaya pemanasan berlangsung baik digunakan panci wadah labu leher tiga (9) yang berisi media pemanas air. Untuk memasukkan bahan dan mengambil sample melalui lubang tempat bahan (8) yang dilengkapi dengan tutup.



Gambar 4.5 Gambar alat destilasi

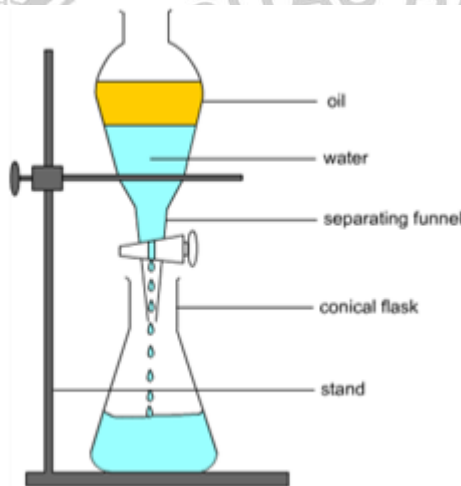
Keterangan:

1. Panci wadah minyak
2. Labu leher satu
3. Klem
4. Termometer
5. Pendingin balik
6. Air pendingin masuk
7. Air pendingin keluar
8. Labu penampung destilat
9. Lubang gas keluar
10. Klem

13. Hot plate
14. Minyak sebagai media pemanas
15. Sample
16. Wadah berisi air sebagai pendingin destilat

Mekanisme Penggunaan Alat:

Sample hasil reaksi dimasukkan labu leher satu (2) dan dipanaskan dengan *hot plate* (13) sampai suhu 105°C. Hasil yang menguap masuk ke dalam pendingin balik (5) untuk dikondensasi sebagai destilat dan masuk ke dalam labu penampung destilat (8). Destilat adalah metil asetat sisa reaksi dan air, sedangkan residu adalah metil ester, triasetin, bio-katalis dan minyak sisa reaksi.



Gambar 4.6 Corong pemisah

Mekanisme Penggunaan Alat:

Corong pemisah digunakan untuk memisahkan hasil dan sisa reaksi interesterifikasi minyak kelapa sawit dengan katalis basa (KOH dan NaOH) setelah dilakukan *water washing*. Hasil *water washing* dimasukkan corong pemisah (*separating funnel*) selama 1 jam sampai terbentuk dua lapisan. Lapisan bawah merupakan fase air (*water*) yang terdiri dari air, metil asetat sisa reaksi dan hasil reaksi netralisasi katalis, sedangkan lapisan atas adalah fase minyak (*oil*) yaitu merupakan campuran dari FAME, triasetin serta trigliserida sisa reaksi. Layer bawah ditampung dalam Erlenmeyer (*conical flask*). Corong pemisah ditopang dengan statif (*stand*) dan klem.

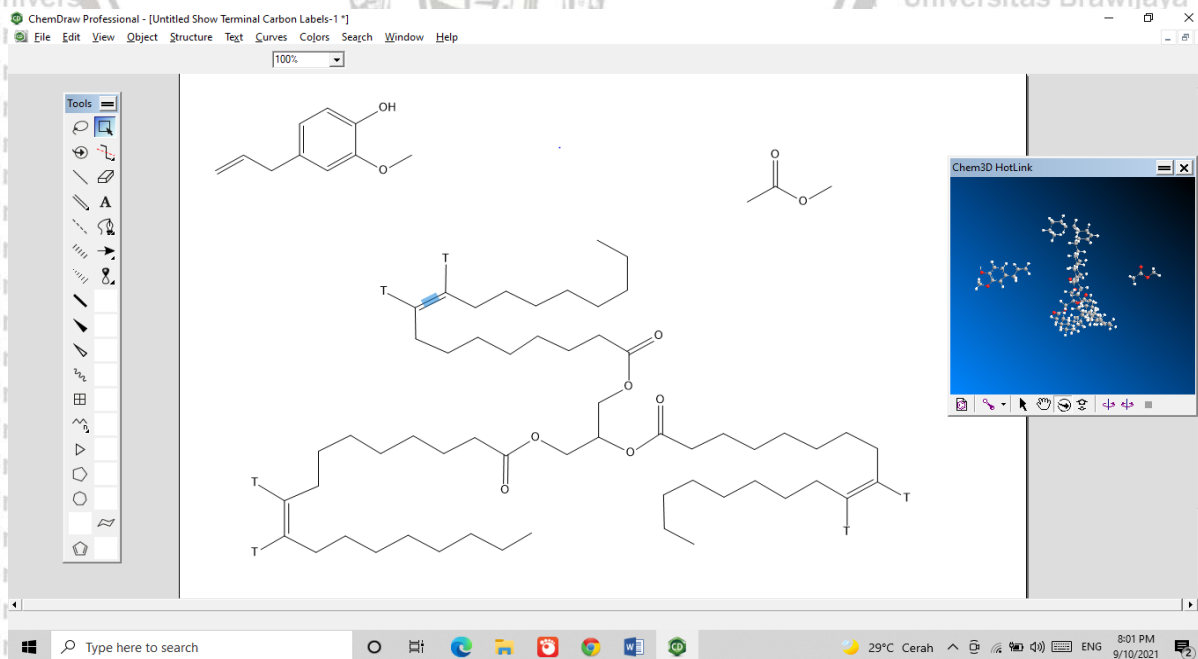
4.7 Simulasi Perilaku Molekuler dengan Software ChemDraw Professional 15.0

Perilaku molecular (*molecular modeling*) dari senyawa-senyawa yang terlibat dalam reaksi interesterifikasi yaitu trigliserida, metil asetat dan katalis diketahui dengan simulasi menggunakan software ChemDraw. Dengan software ChemDraw juga bisa dihitung parameter yang berhubungan dengan interaksi senyawa-senyawa yang terlibat dalam reaksi interesterifikasi. Perilaku molecular dan parameter yang diketahui adalah:

1. Jarak ikatan antar atom sebelum dan sesudah ditambahkan katalis. Dari hasil simulasi didapatkan gambar molecular dynamic senyawa-senyawa yang bereaksi.
2. Energi potensial, yaitu energy yang dibutuhkan supaya senyawa bersifat stabil. Semakin tinggi energy potensial semakin sulit senyawa tersebut direaksikan, karena membutuhkan energy yang besar untuk membuat kondisi tidak stabil.
3. Energi kinetic, yaitu energy karena gerakan molekul dan elektron dalam molekul. Semakin tinggi energy kinetic semakin mudah senyawa tersebut direaksikan, karena membutuhkan energy yang lebih kecil untuk membuat kondisi tidak stabil.
4. Energi total = energy potensial + energy kinetic
5. Moment dipole yang berhubungan dengan kelarutan senyawa-senyawa yang terlibat dalam reaksi interesterifikasi. Semakin tinggi moment dipole semakin tinggi kelarutan bahan.

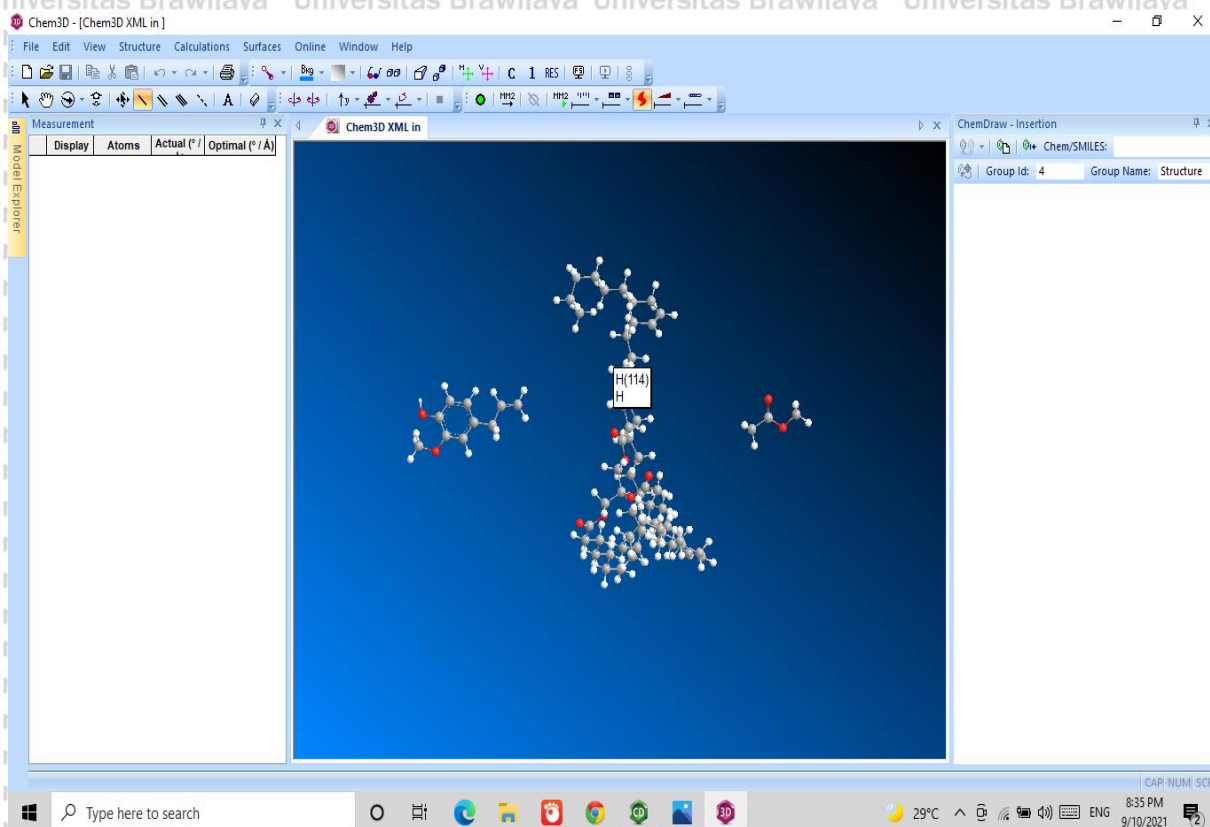
Menentukan Energi Potensial, Energi Kinetik dan Energi Total

Membuat bentuk senyawa trigliserida, metil asetat dan eugenol/sineol di ChemDraw 2D



Gambar 4.7 Struktur Molekul Trigliserida, Metil Asetat dan Eugenol dalam 2 Dimensi

Merubah tampilan gambar ChemDraw 2D ke ChemDraw 3D



Gambar 4.8 Struktur Molekul Triglicerida, Metil Asetat dan Eugenol dalam 3 Dimensi

1. Menentukan Energi Potensial

Energi potensial berada dalam system. Dalam system molekular, energy potensial adalah ikatan kimia dalam molekul dan juga kekuatan antara molekul.

Untuk menghitung energy potensial menggunakan **GAMESS**

- Masuk ke **Calculations > GAMESS Interface**

- Expand **Compute Properties** dan pilih **Potential Energy**

- Klik **RUN**

2. Menentukan Energi Kinetik

Persamaan untuk menghitung energy kinetik adalah:

$$K = p^2 / (2m)$$

Dimana K = energy kinetic, m = massa dan p adalah momentum yang berhubungan dengan massa produk dan kecepatan (v).

Untuk menghitung energy kinetik menggunakan **GAMESS**

- Masuk ke **Calculations > GAMESS Interface Compute Properties**

- Expand **Compute Properties** dan pilih **Kinetic Energy**

- Klik **RUN**

3. Menentukan Energi Total

Energi total = energi potensial + energi kinetik

Untuk menghitung energy total menggunakan **GAMESS**

- Masuk ke **Calculations > GAMESS Interface**

- Expand **Compute Properties** dan pilih **Total Energy**

- Klik **RUN**

4. Menentukan Moment Dipole

Persamaan untuk menghitung moment dipole adalah:

$$\mu = qr$$

Dimana μ = moment dipole, q = *magnitude separated charge* dan r adalah vektor dari *site positive charge* ke *site negative charge*.

Untuk menghitung moment dipole menggunakan **GAMESS**

- Masuk ke **Calculations > GAMESS Interface > Compute Properties**

- Di properties tab, pilih **Dipole** dan klik **RUN**

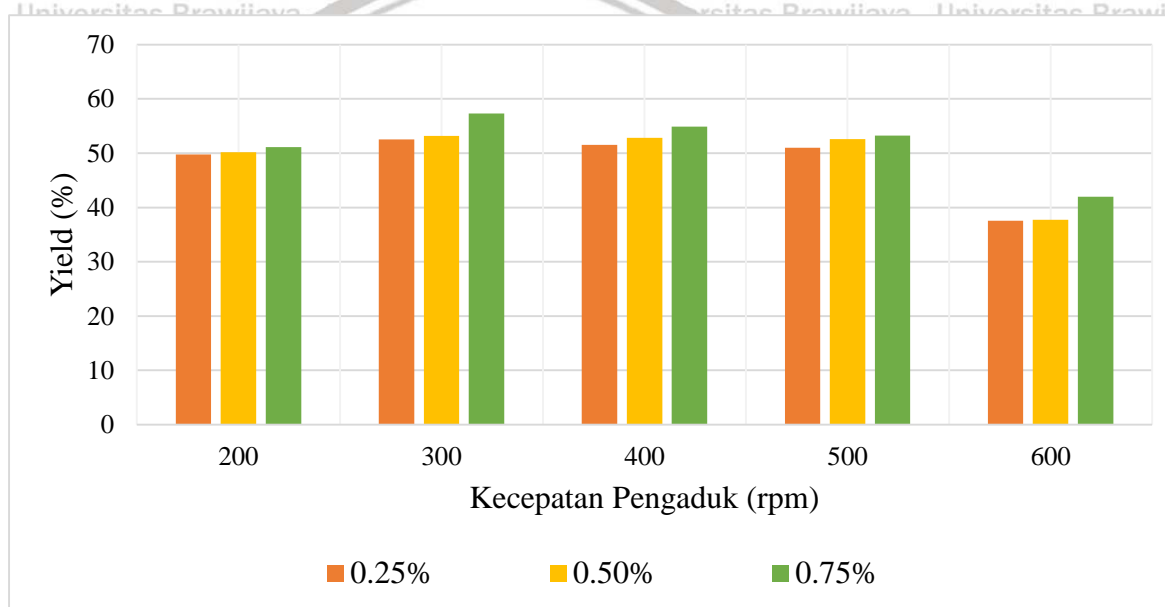


BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN

5.1 Persiapan Bahan

Dari hasil analisa bahan baku minyak kelapa sawit didapatkan % FFA 0,15% dan kadar air 0,015%, sehingga minyak kelapa sawit bisa langsung digunakan untuk proses interesterifikasi.

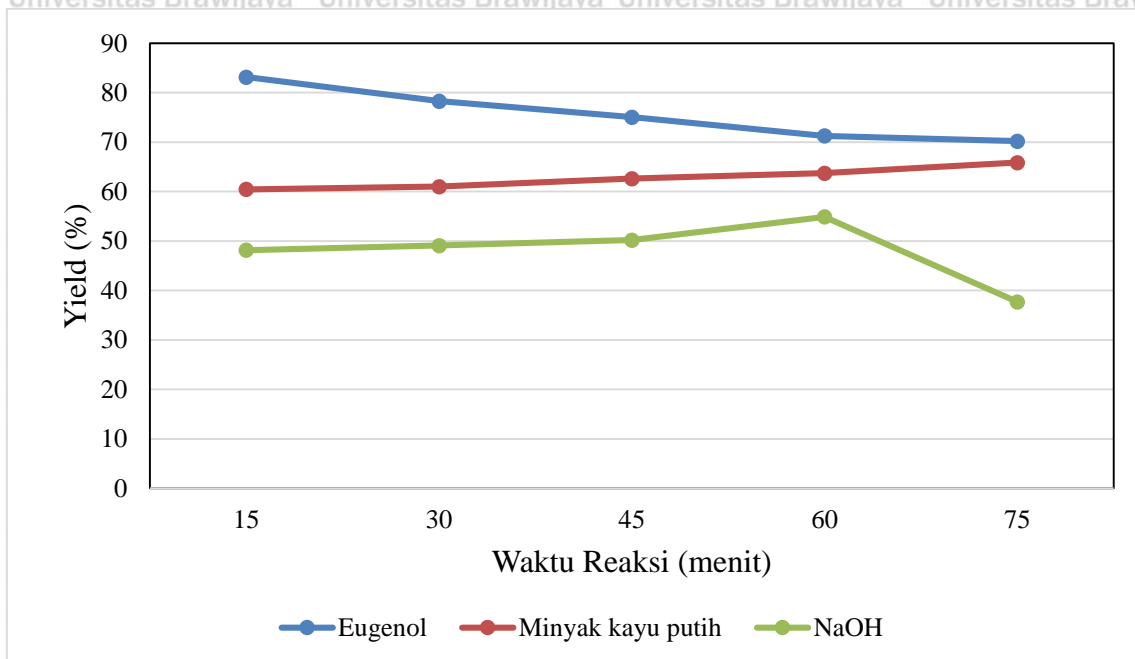
5.2 Reaksi Interesterifikasi dengan Katalis KOH



Gambar 5.1 Hubungan kecepatan pengaduk (rpm) dengan yield (%) pada proses interesterifikasi dengan variasi % massa katalis KOH

Pada Gambar 5.1 menunjukkan semakin tinggi massa katalis KOH yang digunakan maka FAME yield juga semakin tinggi. Untuk variable kecepatan pengadukan kondisi optimum didapatkan pada kecepatan pengadukan 300 rpm dimana menghasilkan yield tertinggi pada semua variable massa katalis KOH. Untuk katalis KOH 0,75% wt., FAME yield optimum adalah 57,3%. Kondisi optimum yang didapatkan yaitu massa katalis KOH 0,75% dan kecepatan pengadukan 300 rpm digunakan sebagai kondisi operasi pada reaksi interesterifikasi *palm oil* menggunakan katalis NaOH dan bio-katalis senyawa aromatic yaitu eugenol dan minyak kayu putih. Yield merupakan campuran dari metil ester, triasetin dan trigliserida sisa reaksi.

5.3 Reaksi Interesterifikasi dengan Katalis NaOH dan Bio-katalis Senyawa Aromatik

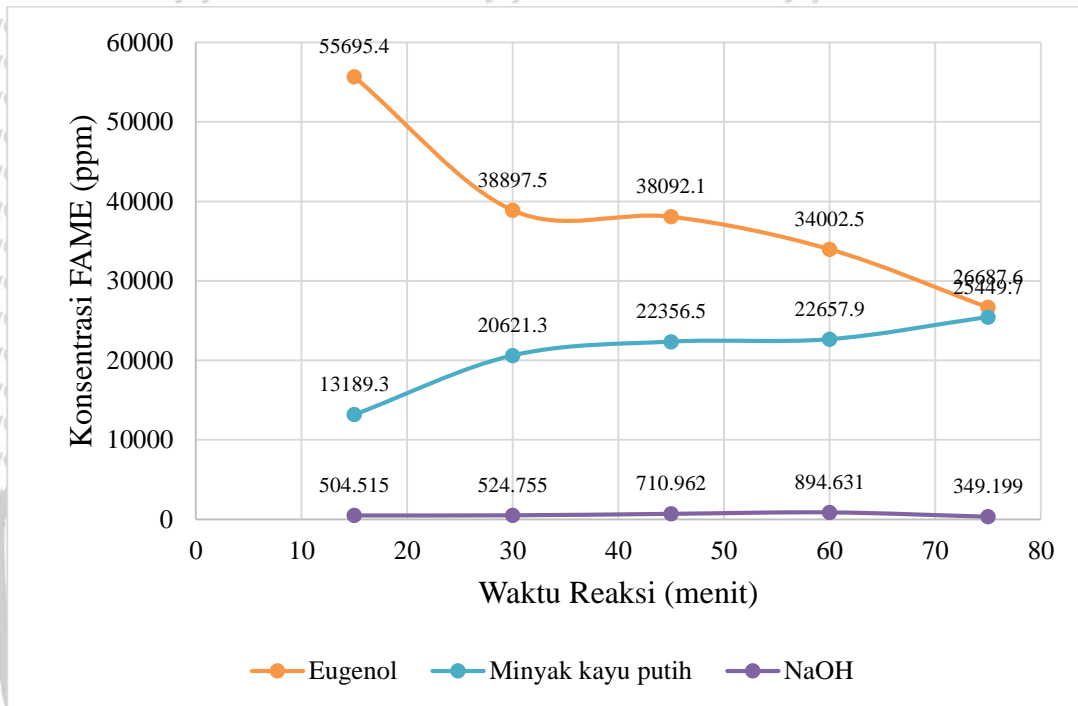


Gambar 5.2 Hubungan waktu reaksi (menit) dan yield (%) untuk variabel jenis katalis

Gambar 5.2 menunjukkan pada penggunaan bio-katalis eugenol jika waktu reaksi berbanding terbalik dengan yield produk. Yield optimum didapatkan dengan bio-katalis eugenol pada waktu reaksi 15 menit yaitu 83,16%. Pada penggunaan bio-katalis minyak kayu putih terlihat jika waktu reaksi berbanding lurus dengan yield produk. Yield tertinggi didapatkan pada waktu reaksi 75 menit yaitu 65,88%.

Produk reaksi interesterifikasi dengan bio-katalis eugenol atau minyak kayu putih merupakan campuran antara metil ester, triasetin, bio-katalis dan trigliserida yang tidak bereaksi sedangkan produk reaksi interesterifikasi dengan katalis NaOH merupakan campuran antara metil ester, triasetin dan trigliserida yang tidak bereaksi. Katalis NaOH tidak terikut dalam hasil reaksi karena sudah dilakukan proses netralisasi dengan penambahan asam asetat untuk membentuk natrium asetat dan air. Kemudian dilakukan *water washing* untuk melarutkan natrium asetat sampai air cucian jernih dan pH netral. Pada penggunaan katalis NaOH terlihat secara umum bahwa waktu reaksi berbanding lurus dengan yield produk, tetapi tercapai kondisi optimum pada waktu reaksi 60 menit yaitu menghasilkan yield 54,91%. Pada waktu reaksi 75 menit terjadi penurunan yield, hal ini karena adanya reaksi balik yang mengakibatkan FAME terdekomposisi (Eevera *et al.*, 2008). Natrium hidroksida bereaksi *irreversible* dengan ester membentuk sabun natrium dan natrium asetat (Casas *et al.*, 2011).

Jika ditinjau dari factor ekonomi proses maka reaksi interesterifikasi minyak kelapa sawit dengan bio-katalis eugenol merupakan kondisi terbaik. Hal ini karena dengan waktu reaksi 15 menit sudah bisa menghasilkan yield tertinggi. Waktu reaksi sangat penting dalam pemilihan suatu proses, karena semakin singkat waktu reaksi maka semakin efisien proses tersebut dari segi ekonomi.



Gambar 5.3 Hubungan waktu reaksi (menit) terhadap konsentrasi FAME (ppm) dengan variasi jenis katalis

Pada Gambar 5.3 terlihat bahwa kondisi optimum tercapai pada waktu reaksi 15 menit untuk penggunaan bio-katalis eugenol yaitu mendapatkan konsentrasi metil ester tertinggi 55.695,4 ppm. Pada penggunaan katalis minyak kayu putih terlihat bahwa waktu reaksi berbanding lurus dengan konsentrasi FAME. Pada penggunaan bio-katalis minyak kayu putih belum tercapai waktu reaksi optimum dan konsentrasi metil ester tertinggi 26.687,6 ppm didapatkan pada waktu reaksi 75 menit. Pada penggunaan katalis NaOH kondisi optimum tercapai pada waktu reaksi 60 menit yaitu mendapatkan konsentrasi metil ester tertinggi 894,631 ppm. Tercapainya waktu reaksi optimum pada penggunaan katalis NaOH dan eugenol disebabkan karena reaksi interesterifikasi sudah mencapai kesetimbangan, sehingga jika waktu reaksi ditambah justru akan menggeser kesetimbangan reaksi ke kiri atau ke arah reaktan karena reaksi interesterifikasi bersifat *reversible* atau reaksi bolak-balik (Eevera *et al.*, 2008). Semakin lama waktu reaksi akan memicu terjadinya reaksi hidrolisis ester dengan air

membentuk asam lemak bebas dan juga reaksi saponifikasi NaOH dengan asam lemak bebas membentuk sabun (Eevera *et al.*, 2008).

Pada reaksi interesterifikasi secara stoikiometri perbandingan mol minyak dan metil asetat adalah 1:3, tetapi pada proses ini digunakan metil asetat berlebih 100% sehingga perbandingan mol minyak dan metil asetat menjadi 1:6. Hal ini dilakukan karena reaksi interesterifikasi bersifat reversible atau reaksi bolak-balik. Menurut azas Lee Chatelier beberapa cara bisa dilakukan pada reaksi reversible untuk menggeser kesetimbangan reaksi ke arah kanan/produk yaitu dengan salah satu reaktan dibuat *excess*, menaikkan suhu dan tekanan reaksi, serta secepat mungkin memisahkan produk yang telah terbentuk agar reaksi tidak bergeser ke kiri/reaktan.

5.4 Hasil Analisa Densitas dan Angka Asam

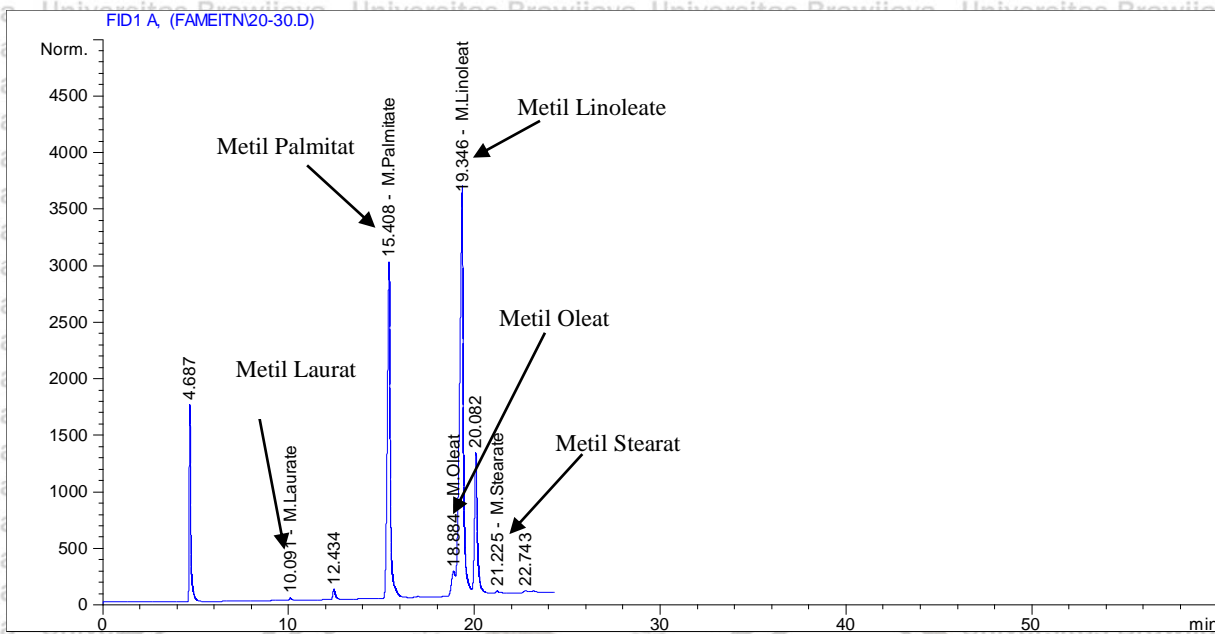
Tabel 5.1 Hasil Analisa Densitas dan Angka Asam

Jenis Katalis	Waktu Reaksi (menit)	Densitas (gr/ml)	Densitas (gr/mL) SNI 7182:2015	Angka Asam (mg KOH/gr sampel)	Angka Asam (mg KOH/gr sampel) SNI 7182:2015
NaOH	15	0,875		0,449	
	30	0,878		0,449	
	45	0,880		0,393	
	60	0,850		0,449	
	75	0,887		0,561	
	15	0,892		0,337	
	30	0,896		0,348	
Eugenol	45	0,896	0,85 – 0,89	0,359	≤ 0,5
	60	0,9		0,359	
	75	0,904		0,370	
	15	0,938		0,381	
Minyak kayu putih	30	0,912		0,393	
	45	0,91		0,404	
	60	0,91		0,415	
	75	0,908		0,426	

Pada Tabel 5.1 terlihat bahwa pada penggunaan katalis NaOH, nilai densitas dan angka asam memenuhi SNI 7182:2015 yaitu densitas biodiesel 0,85 – 0,89 g/mL serta *acid number* maksimum 0,0005 g KOH/g sampel, kecuali angka asam untuk waktu reaksi 75 menit yaitu 0,561 mg-KOH/g. Hal ini disebabkan pada waktu reaksi 75 menit terbentuk asam lemak bebas (FFA) yang lebih banyak sehingga mempengaruhi nilai angka asam. *Free fatty acid* terbentuk karena reaksi oksidasi oleh O₂ dari udara secara langsung apabila material dengan kandungan minyak terpapar udara. Laju reaksi oksidasi berdasarkan pada jenis minyak serta keadaan waktu disimpan. Oksidasi langsung tidak terbatas untuk material berminyak, melainkan pada bahan seperti hidrokarbon, aldehida, eter, fenol, amina dan senyawa sulfid. Oksidasi langsung minyak tak jenuh berkaitan dengan serangan O₂ terhadap ikatan ganda sehingga terbentuk hidroperoksida tak jenuh. *Unsaturated fatty acid* pada trigliserida adalah oleic acid (=), linoleic acid (= =) serta linolenic acid (= = =). *Unsaturated fatty acid* bila teroksidasi bisa terbentuk *oleic hydroxide*, *linoleic hydroxide*, serta *linolenic hydroperoxide*. *Peroxide* yang terbentuk unstabil serta cepat terurai karena reaksi isomerase/polimerisasi yang akan membentuk senyawa dengan BM lebih kecil. Asam lemak bebas juga dapat terbentuk karena reaksi hidrolisis trigliserida oleh air membentuk digliserida dan asam lemak bebas (Van Gerpen *et al.*, 2004).

Pada proses interesterifikasi menggunakan bio-katalis eugenol dan minyak kayu putih didapatkan semua nilai angka asam yang memenuhi SNI 7182:2015, dan *acid number* yang didapatkan lebih kecil dari *acid number* yang didapatkan dengan katalis NaOH. Semakin kecil nilai angka asam maka semakin baik karena semakin sedikit produk yang terkonversi menjadi FFA. Eugenol dan minyak kayu putih selain berfungsi sebagai bio-katalis juga berfungsi sebagai antioksidan yang mencegah terjadinya reaksi oksidasi membentuk asam lemak bebas. Pada proses interesterifikasi dengan bio-katalis eugenol dan minyak kayu putih didapatkan semua nilai densitas tidak memenuhi SNI 7182:2015. Hal ini disebabkan karena produk reaksi merupakan campuran dari metil ester, triasetin, trigliserida sisa dan bio-katalis karena pada proses ini katalis tidak dipisahkan. Densitas yang didapatkan merupakan densitas rata-rata dari keempat komponen pada produk reaksi. Untuk ρ triasetin = 1,16 gr/ml, ρ eugenol = 1,06 gr/ml, ρ trigliserida = 0,91 gr/ml dan ρ minyak kayu putih = 0,925 gr/ml.

5.5 Hasil Analisa GC (Gas Chromatography) dan GC-MS (Gas Chromatography-Mass Spectrum)

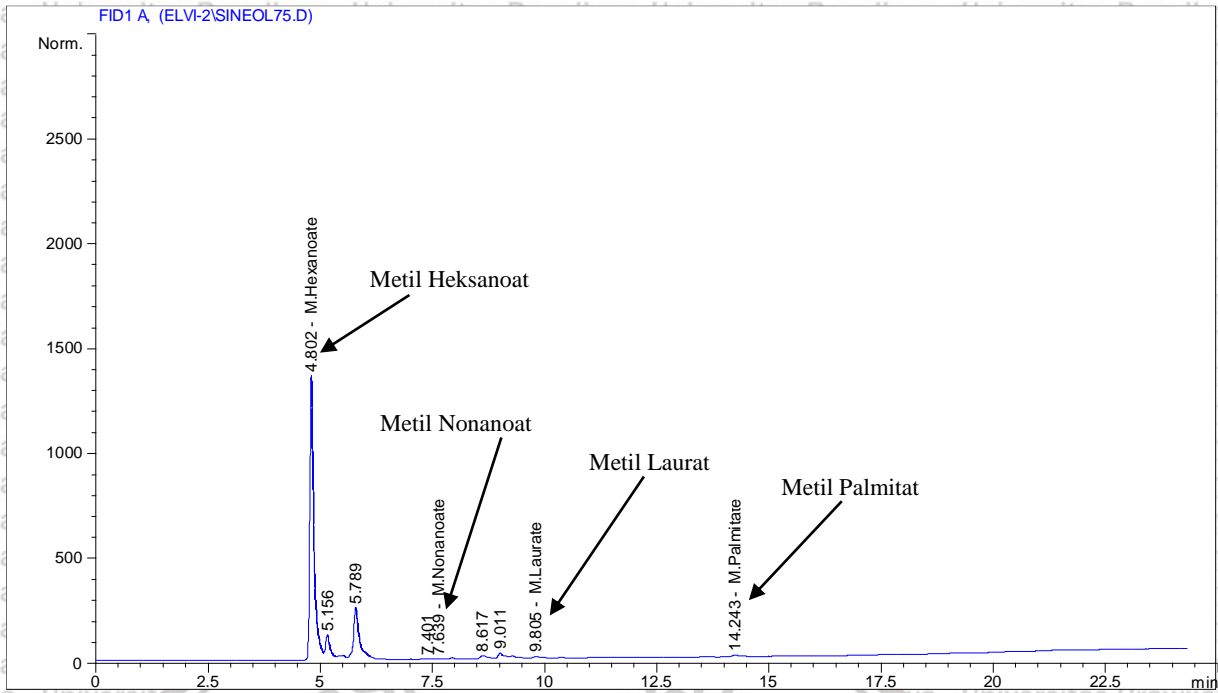


Gambar 5.4 Kromatogram FAME hasil analisa GC untuk penambahan katalis NaOH pada waktu reaksi 60 menit

Tabel 5.2 Komposisi Metil Ester Hasil Analisa GC pada Reaksi Interesterifikasi Minyak Kelapa Sawit dengan Katalis NaOH pada Waktu Reaksi 60 Menit

No.	FAME (<i>Fatty Acid Methyl Esters</i>)	Rumus Molekul	Komposisi (%)
1.	Metil Oleat	C ₁₉ H ₃₆ O ₂	6,0760
2.	Metil Linoleat	C ₁₉ H ₃₄ O ₂	26,3233
3.	Metil Stearat	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	0,1652
4.	Metil Laurat	C ₁₃ H ₂₆ O ₂	0,6666
5.	Metil Palmitat	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	66,7690

Gambar 5.4 dan Tabel 5.2 menunjukkan komposisi FAME hasil reaksi interesterifikasi minyak kelapa sawit dengan katalis NaOH pada waktu reaksi 60 menit. FAME yang diperoleh merupakan metil ester rantai panjang (*Long Chain Methyl Esters* = LCME) yang terdiri dari *unsaturated methyl esters* yaitu metil oleat dan metil linoleate serta *saturated methyl esters* yaitu metil stearate, metil palmitate dan metil laurat. Komposisi FAME yang terbentuk identic dengan asam lemak penyusun trigliserida minyak kelapa sawit yaitu asam oleat, asam linoleate, asam stearate, asam laurat dan asam palmitate.

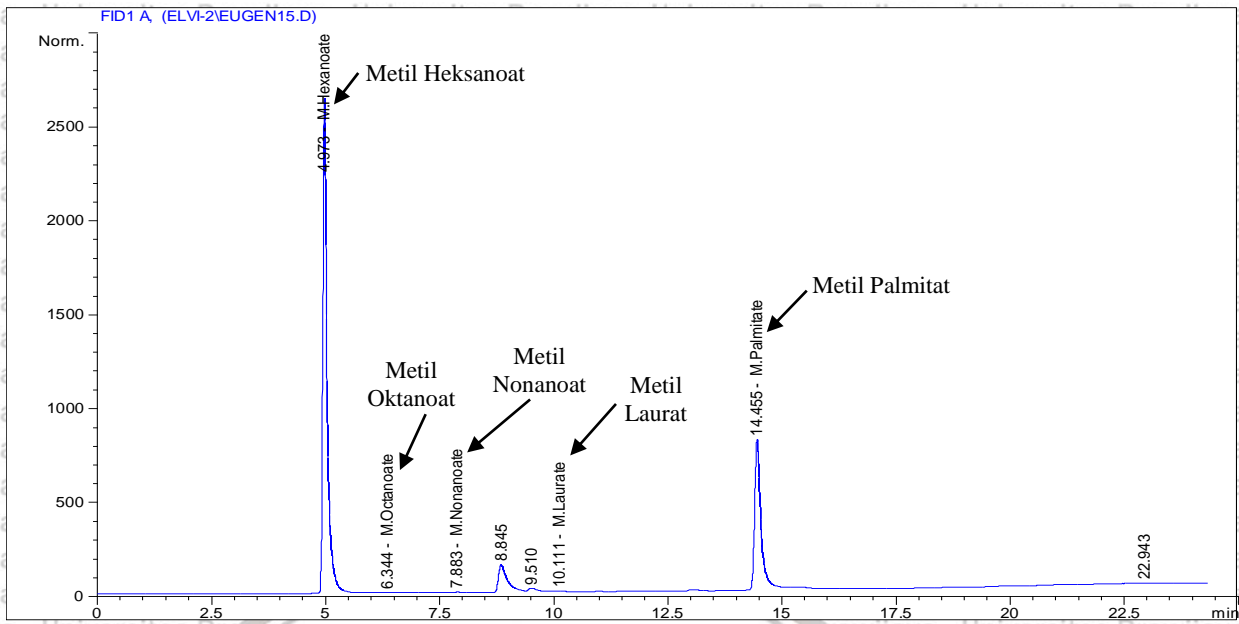


Gambar 5.5 Kromatogram GC metil ester dengan penambahan bio-katalis minyak kayu putih pada waktu reaksi 75 menit

Pada Gambar 5.5 terlihat kromatogram FAME yang diperoleh pada proses interesterifikasi minyak kelapa sawit menggunakan bio-katalis minyak kayu putih pada waktu reaksi 75 menit yang merupakan kondisi optimum proses.

Tabel 5.3 Komposisi Metil Ester Hasil Analisa GC pada Reaksi Interesterifikasi Minyak Kelapa Sawit dengan Bio-katalis Minyak Kayu Putih pada Waktu Reaksi 75 Menit

No.	FAME (<i>Fatty Acid Methyl Esters</i>)	Rumus Molekul	Komposisi (%)
1.	Metil Heksanoat	$C_7H_{14}O_2$	89,3504
2.	Metil Nonanoat	$C_{10}H_{20}O_2$	2,1881
3.	Metil Laurat	$C_{13}H_{26}O_2$	2,9479
4.	Metil Palmitat	$C_{17}H_{34}O_2$	5,5135



Gambar 5.6 Kromatogram GC metil ester dengan penambahan bio-katalis eugenol pada waktu reaksi 15 menit

Pada Gambar 5.6 terlihat kromatogram FAME yang diperoleh pada proses interesterifikasi minyak kelapa sawit menggunakan bio-katalis eugenol pada waktu reaksi 15 menit yang merupakan kondisi optimum proses.

Tabel 5.4 Komposisi Metil Ester Hasil Analisa GC pada Reaksi Interesterifikasi Minyak Kelapa Sawit dengan Bio-katalis Eugenol pada Waktu Reaksi 15 Menit

No.	FAME (<i>Fatty Acid Methyl Esters</i>)	Rumus Molekul	Komposisi (%)
1.	Metil Heksanoat	$C_7H_{14}O_2$	80,8744
2.	Metil Oktanoat	$C_9H_{18}O_2$	0,7171
3.	Metil Nonanoat	$C_{10}H_{20}O_2$	1,0922
4.	Metil Laurat	$C_{13}H_{26}O_2$	0,7244
5.	Metil Palmitat	$C_{17}H_{34}O_2$	16,5927

Tabel 5.3 dan Tabel 5.4 menunjukkan ada 2 jenis metil ester yang terbentuk, yaitu metil ester rantai pendek (*Short Chain Methyl Esters* = SCME) yaitu metil heksanoat, metil oktanoat dan metil nonanoat dan metil ester rantai panjang (*Long Chain Methyl Esters* = LCME) yaitu metil laurat dan metil palmitate (Riadi *et al.*, 2012; Riadi *et al.*, 2014). Metil oktanoat terbentuk dari pemecahan metil linolenat (Frankel *et al.*, 1987), dimana metil

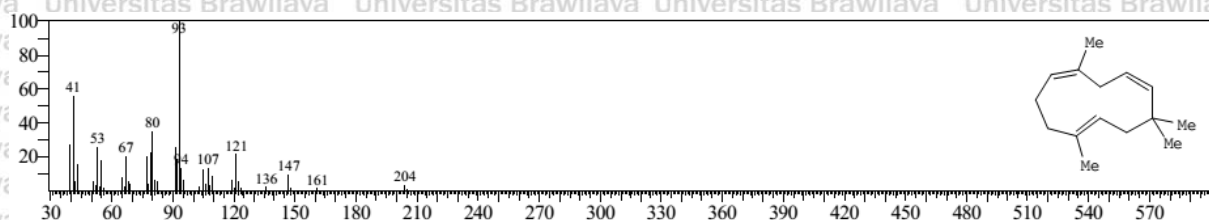
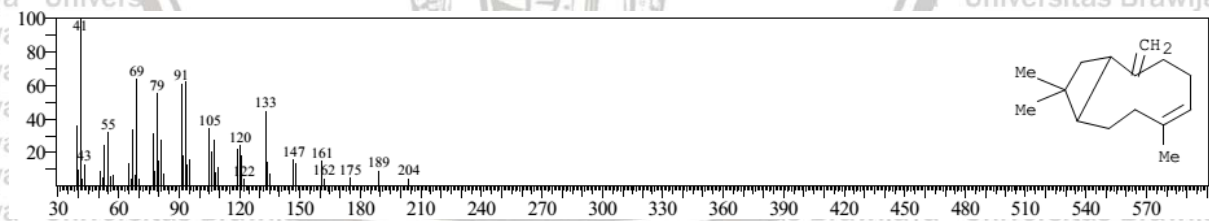
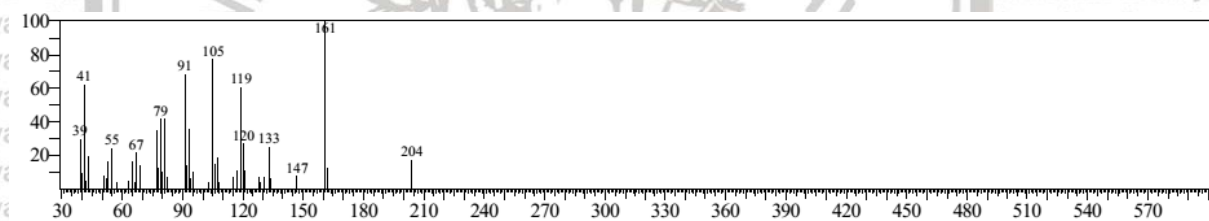
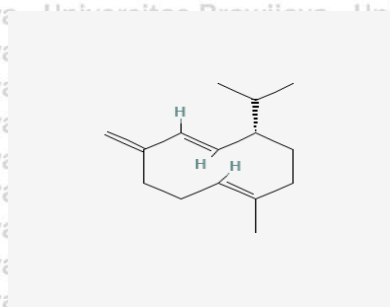
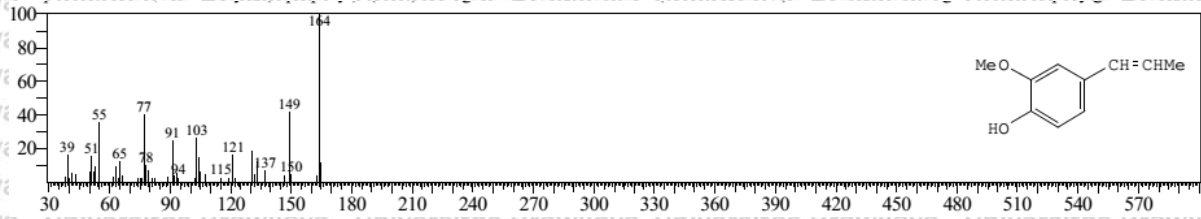
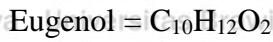
linolenat tidak terdeteksi oleh GC meskipun asam linolenat merupakan komponen dari minyak kelapa sawit. Metil nonanoat terbentuk dari pemecahan metil oleat yang merupakan *unsaturated methyl esters*, sedangkan metil heksanoat terbentuk dari pemecahan metil dinoleate yang juga merupakan *unsaturated methyl esters* (Riadi *et al.*, 2012; Riadi *et al.*, 2014). Metil linoleat dan metil oleat tidak terdeteksi oleh GC meskipun asam linoleat dan asam oleat merupakan komponen yang cukup besar pada minyak kelapa sawit. Metil ester rantai pendek (*Short Chain Methyl Esters* = SCME) berperan untuk mengurangi viskositas kinematic biodiesel (Riadi *et al.*, 2012; Riadi *et al.*, 2014).

Tabel 5.5 Komposisi Produk Reaksi Hasil Analisa GC-MS pada Reaksi Interesterifikasi Minyak Kelapa Sawit dengan Bio-katalis Eugenol pada Waktu Reaksi 15 Menit

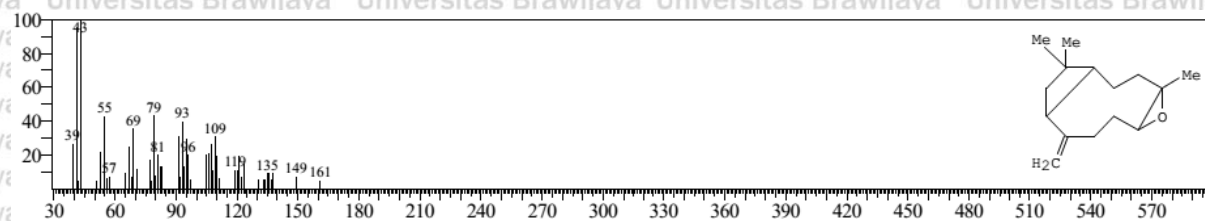
No.	Produk Reaksi	Komposisi (%)
1.	2-Propanol, 1-butoxy	1,227 %
2.	Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl	2,076 %
3.	2,4-Decadienal	1,751 %
4.	2,4-Decadienal	2,757 %
5.	Eugenol	56,645 %
6.	Germacrene D	0,342 %
7.	trans-Caryophyllene	17,177 %
8.	alpha-Humulene	4,009 %
9.	Caryophyllene oxide	2,871 %
10.	Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1,3-propanediyl ester	0,702 %
11.	Stearic acid	0,848 %
12.	1H-Purin-6-amine, [(2-fluorophenyl)methyl]	0,181 %
13.	Palmitoleic acid	0,297 %
14.	13-oxabicyclo [10.1.0] tridecane	0,948 %
15.	9-Octadecenoic acid (oleic acid)	0,868 %
16.	Glycerol 1,3-dipalmitate	0,858 %
17.	Glycerol 1,3-dipalmitate	2,062 %
18.	3,3-(ethylenedioxy) decanal	0,437 %
19.	Oleic acid, 3-hydroxypropyl ester	3,946 %

Tabel 5.5 menunjukkan komposisi hasil dan sisa reaksi interesterifikasi minyak kelapa sawit dengan bio-katalis eugenol yang terbagi atas:

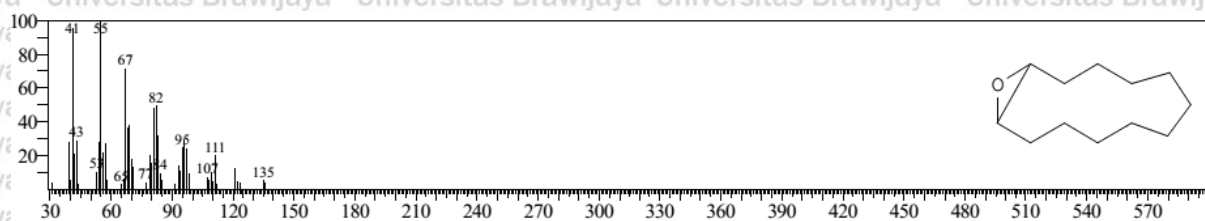
Komponen penyusun eugenol yaitu:



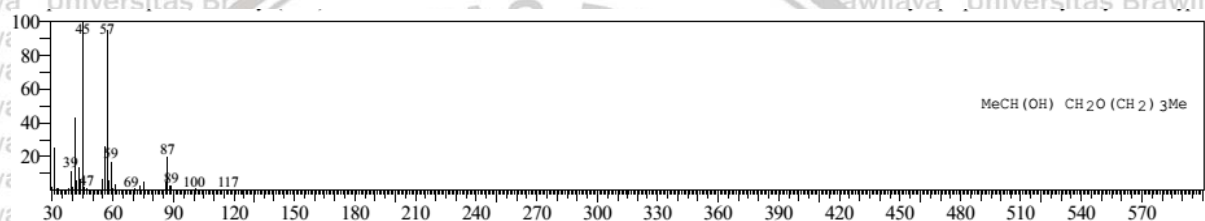
(-)-Caryophyllene oxide = $C_{15}H_{24}O$



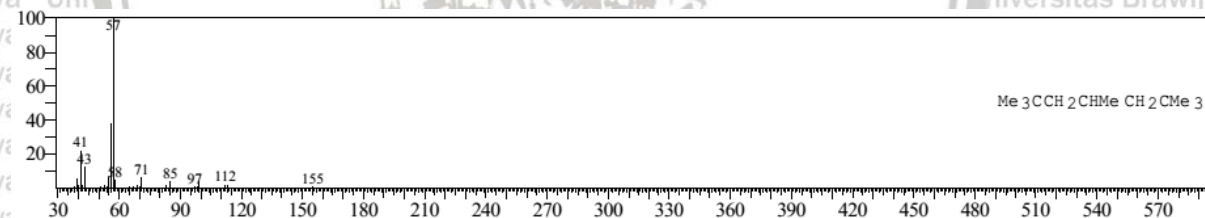
13-Oxabicyclo[10.1.0]tridecane = $C_{12}H_{22}O$



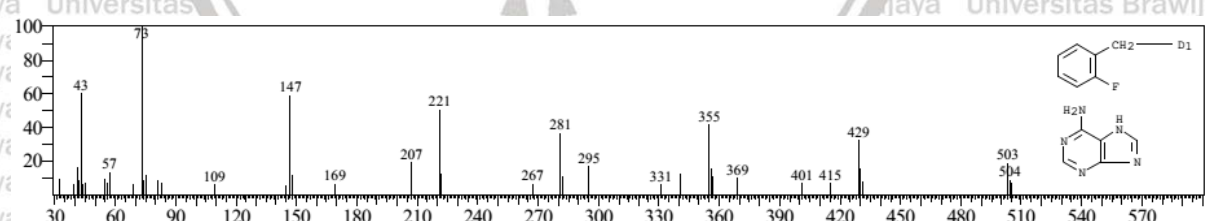
2-propanol, 1-butoxy = $C_7H_{16}O_2$ (sebagai solvent)



Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl = $C_{12}H_{26}$ (sebagai fragrance agent)

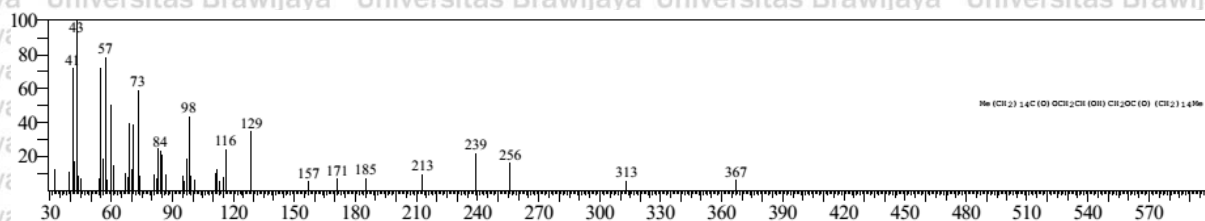


1H-Purin-6-amine, [(2-fluorophenyl) methyl] = $C_{12}H_{10}FN_5$

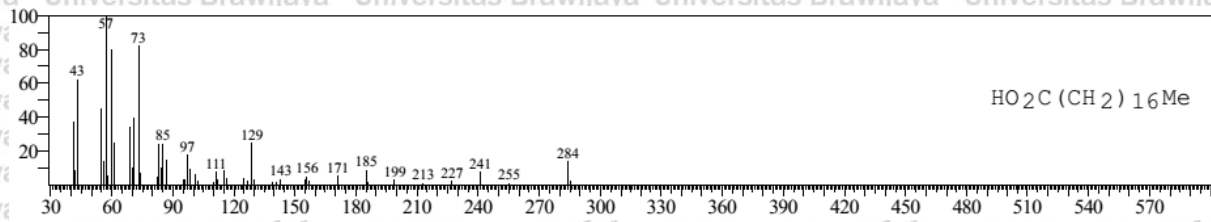


Digliserida dan asam lemak sisa reaksi yaitu:

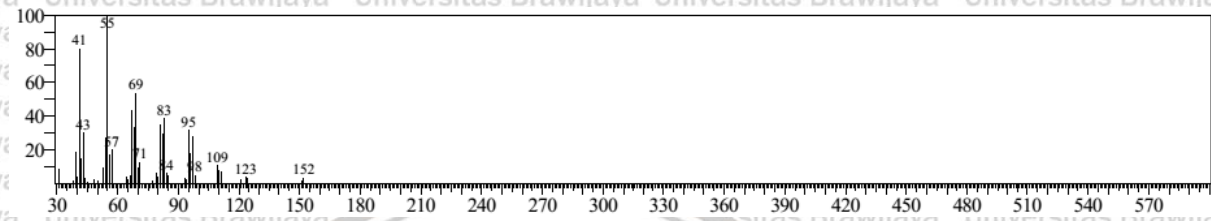
Glyceril, 1,3-dipalmitate = $C_{35}H_{68}O_5$



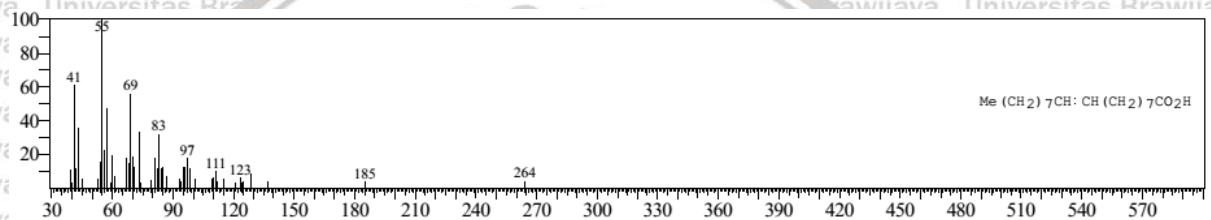
Stearic acid = $C_{18}H_{36}O_2$



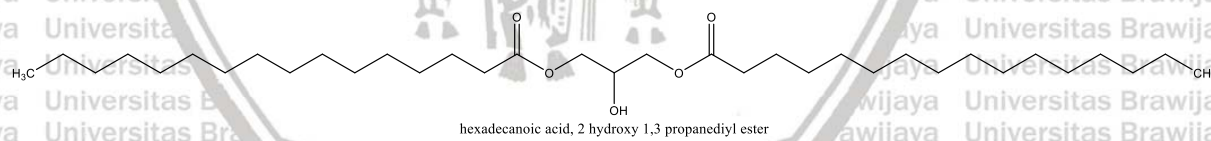
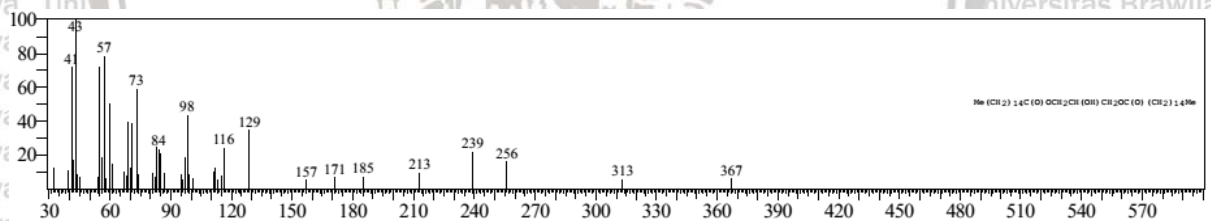
Palmitoleic acid = $C_{16}H_{30}O_2$



Oleic acid = $C_{18}H_{34}O_2$

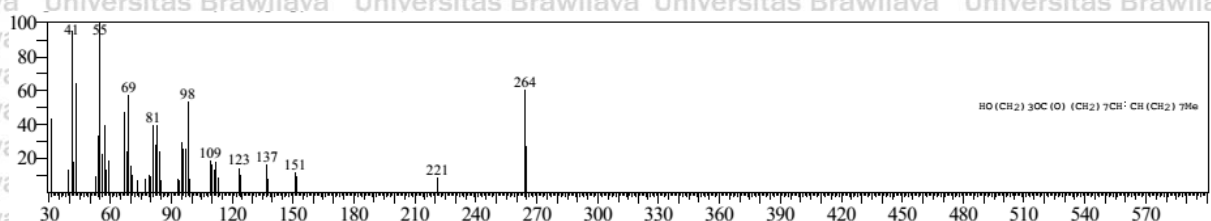


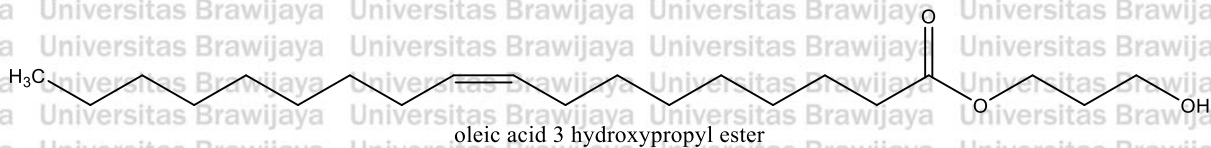
Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1,3-propanediyl ester = $C_{35}H_{68}O_5$



FAME (Fatty Acid Methyl Esters)

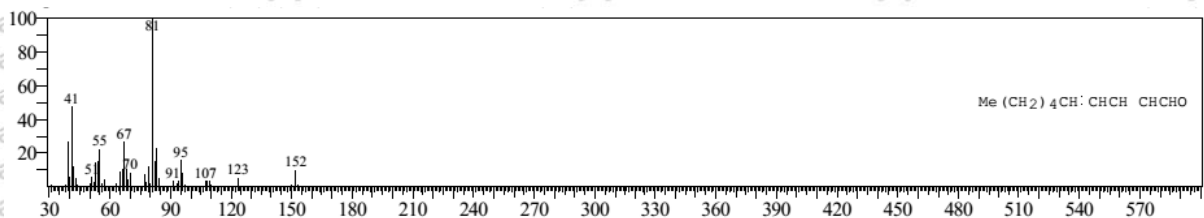
Oleic acid, 3-hydroxypropyl ester = $C_{21}H_{40}O_3$



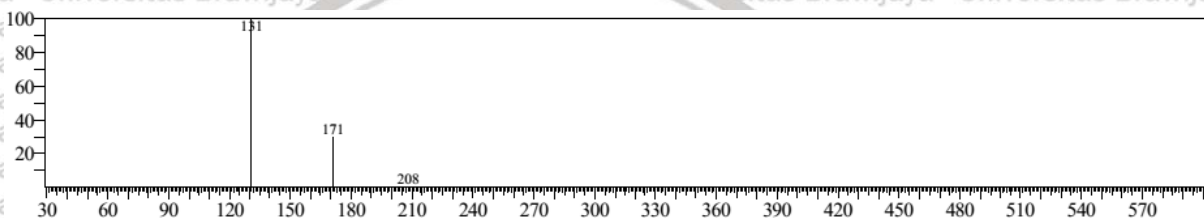


Pada Tabel 5.5 juga terlihat terbentuk senyawa aldehyde yaitu:

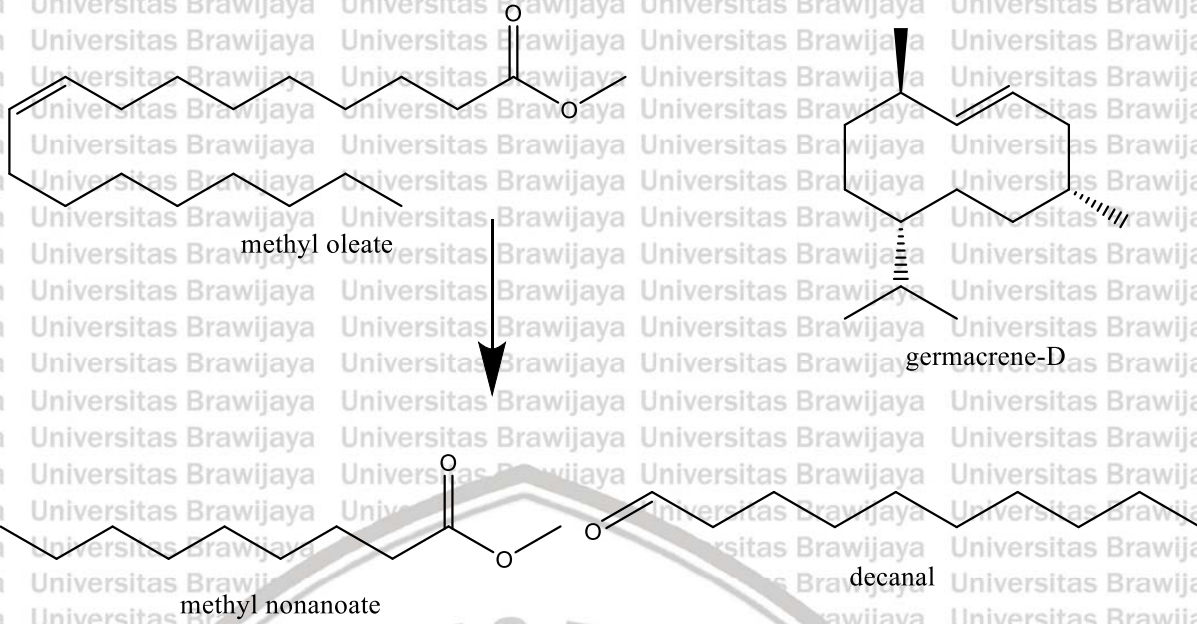
2,4-decadienal = $C_{10}H_{16}O$



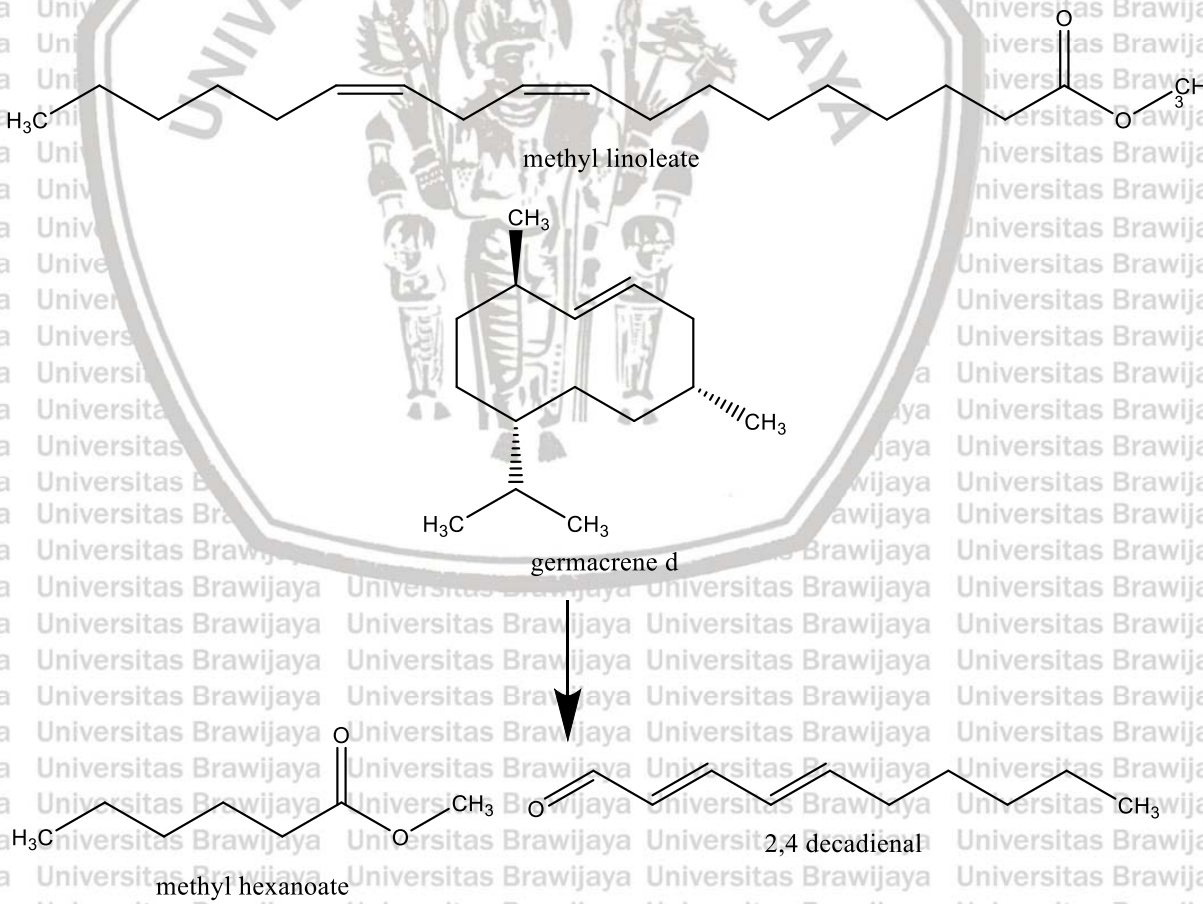
3,3-(ethylenedioxy) decanal = $C_{12}H_{22}O_3$



Pemecahan *unsaturated methyl esters* rantai panjang yaitu metil oleat dan metil linoleat menjadi metil ester rantai pendek (*Short Chain Methyl Esters* = SCME) dan senyawa aldehida (Baber *et al.*, 2005). Hal ini terjadi karena banyaknya komponen selain eugenol yang juga mempunyai gugus aromatic yaitu germacrene D, trans-caryophyllene, alpha-humulene, caryophyllene oxide, 13-Oxabicyclo [10.1.0] tridecane dan 1H-Purin-6-amine, [(2-fluorophenyl) methyl], sehingga menimbulkan medan magnet yang juga besar. Besarnya medan magnet inilah yang memicu terjadinya reaksi pemecahan dari *unsaturated methyl esters* rantai panjang yang terbentuk menjadi metil ester rantai pendek yaitu metil heksanoat, metil nonanoat, metil oktanoat serta senyawa aldehida. Metil oleat akan pecah menjadi metil nonanoat dan 3,3-(ethylenedioxy) decanal sedangkan metil linoleate akan pecah menjadi metil heksanoat dan 2,4-decadienal (Baber *et al.*, 2005). Dengan pecahnya *unsaturated methyl esters* rantai panjang yaitu metil oleat dan metil linoleat menjadi metil ester rantai pendek (*Short Chain Methyl Esters* = SCME) dan senyawa aldehida, mengakibatkan massa produk metil ester yang terbentuk pada reaksi interesterifikasi menjadi berkurang. Reaksi pemecahan metil oleat oleh misalkan dengan salah satu senyawa aromatic yaitu germacrene-D menjadi metil nonanoat dan 3,3-(ethylenedioxy) decanal dan reaksi pemecahan metil linoleate oleh misalkan dengan salah satu senyawa aromatic yaitu germacrene-D menjadi metil heksanoat dan 2,4-decadienal ditunjukkan pada gambar di bawah ini:



Gambar 5.7 Reaksi pemecahan metil oleat oleh bio-katalis germacrene-D menjadi metil nonanoat dan 3,3-(ethylenedioxy) decanal



Gambar 5.8 Reaksi pemecahan metil linoleate oleh bio-katalis germacrene-D menjadi metil heksanoat dan 2,4-decadienal

Tabel 5.6 Komposisi Produk Reaksi Hasil Analisa GC-MS pada Reaksi Interesterifikasi Minyak Kelapa Sawit dengan Bio-katalis Minyak Kayu Putih pada Waktu Reaksi 75 Menit

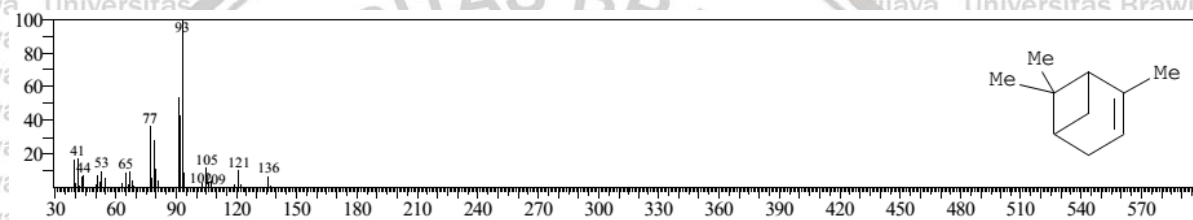
No.	Produk Reaksi	Komposisi (%)
1.	2-methyl-2,4-Pentanediol	19,538 %
2.	1-N-butoxy-2-Propanol	0,909 %
3.	Alpha-Pinene	17,029 %
4.	2-Betha-Pinene	1,230 %
5.	beta-Myrcene	0,587 %
6.	Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl	1,609 %
7.	Beta-Ocimene	2,171 %
8.	p-Cymene	1,920 %
9.	1,8-Cineole	29,596 %
10.	Gamma-Terpinene	0,848 %
11.	Alpha-Terpinene	0,411 %
12.	Camphor	0,533 %
13.	4-Terpineol	0,395 %
14.	Alpha-Terpineol	4,056 %
15.	2,4-Decadienal	1,272 %
16.	2,4-Decadienal	2,457 %
17.	Phenol	1,150 %
18.	Alpha-Terpinyl Acetate	0,823 %
19.	trans-Caryophyllene	1,430 %
20.	alpha.-Humulene	0,917 %
21.	Beta-Chamigrene	0,303 %
22.	Tetradecamethylcycloheptasiloxane	1,325 %
23.	Cyclohexasiloxane, dodecamethyl	0,369 %
24.	9-Oxabicyclo[6.1.0] nonane	0,641 %
25.	9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) Oleic acid	0,166 %
26.	Cyclodecasiloxane, eicosamethyl	0,261 %
27.	Tetracosamethylcyclododecasiloxane	0,226 %
28.	Glyceril 2-palmitate	0,337 %
29.	Glyceril 1,3-dipalmitate	0,803 %
30.	Octadecanoic acid (Stearic acid)	0,860 %

31.	1H-Purin-6-amine, [(2-fluorophenyl)methyl]	0,238 %
32.	Oleic acid, 3-hydroxypropyl ester	0,342 %
33.	11-Dodecen-1-al	1,006 %
34.	9-Octadecenoic acid (Z) Oleic acid	0,942 %
35.	Hexadecanoic acid, 3-[(trimethylsilyl)oxy]propyl ester	1,460 %
36.	Methyl Esters	0,831 %
37.	Hexadecanoic acid (Palmitic Acid)	1,004 %

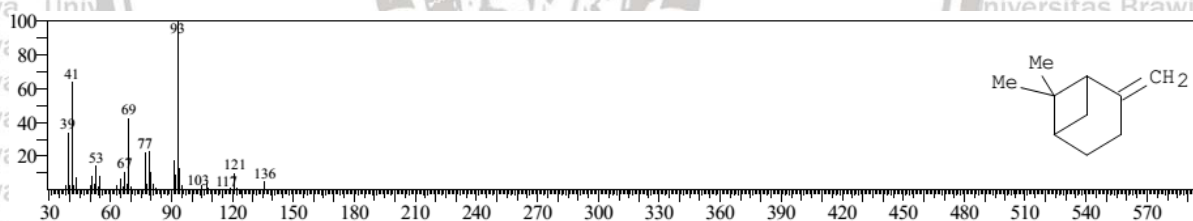
Tabel 5.6 menunjukkan komposisi hasil dan sisa reaksi interesterifikasi minyak kelapa sawit dengan bio-katalis minyak kayu putih yang terbagi atas:

Komponen penyusun minyak kayu putih:

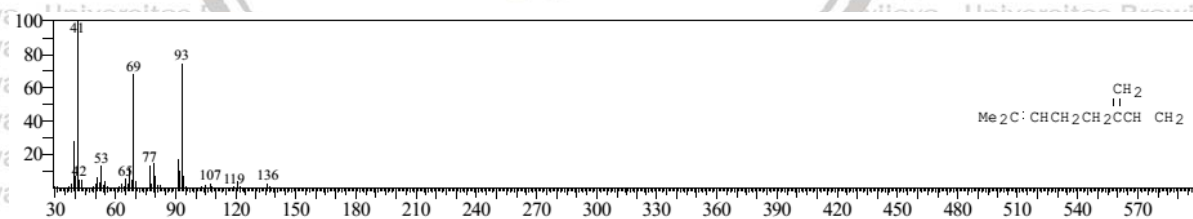
Alpha-Pinene = $C_{10}H_{16}$



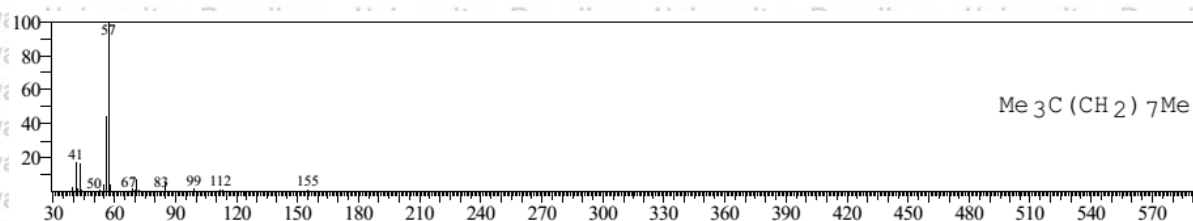
2-beta-Pinene = $C_{10}H_{16}$



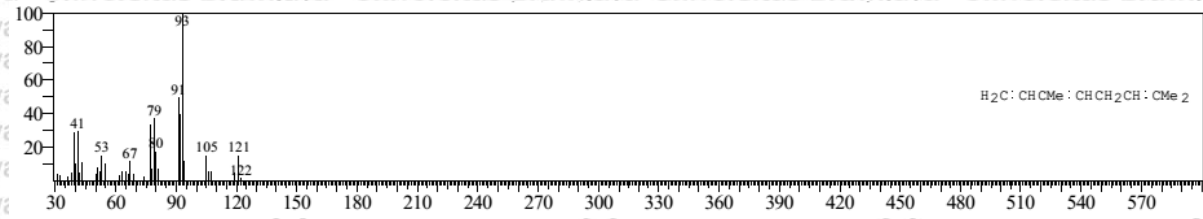
Beta-Myrcene = $C_{10}H_{16}$



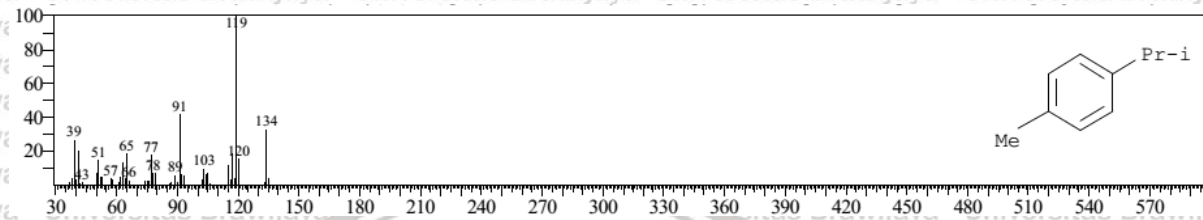
Dodecane = $C_{12}H_{26}$



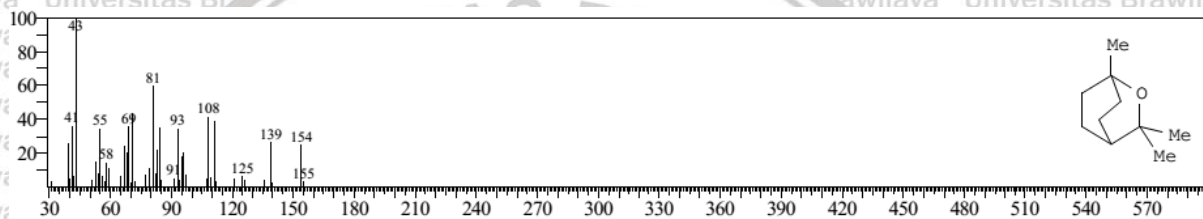
Beta-Ocimene = C₁₀H₁₆



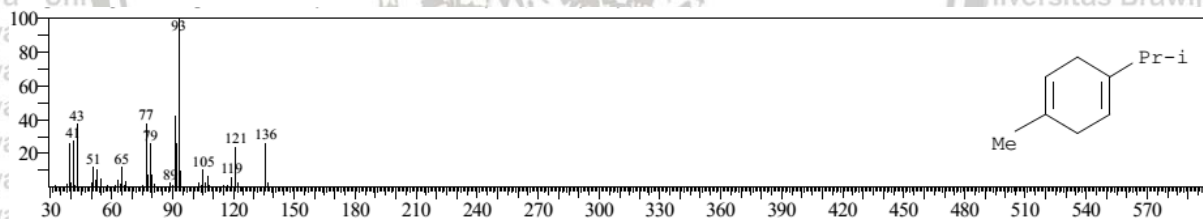
p-Cymene = C₁₀H₁₄



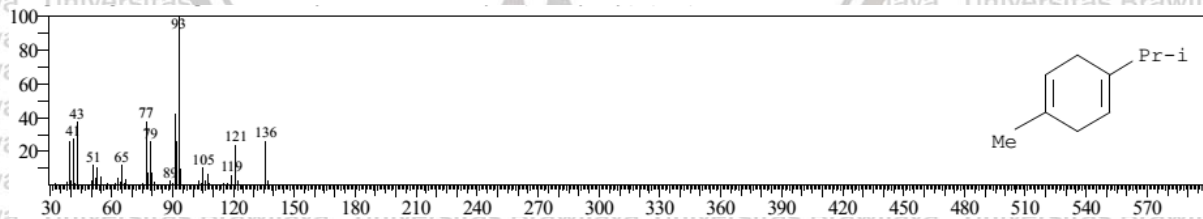
1,8-Cineole = C₁₀H₁₈O



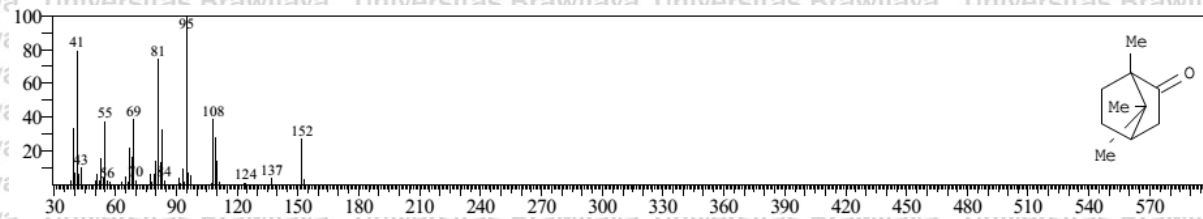
Gamma-Terpinene = C₁₀H₁₆



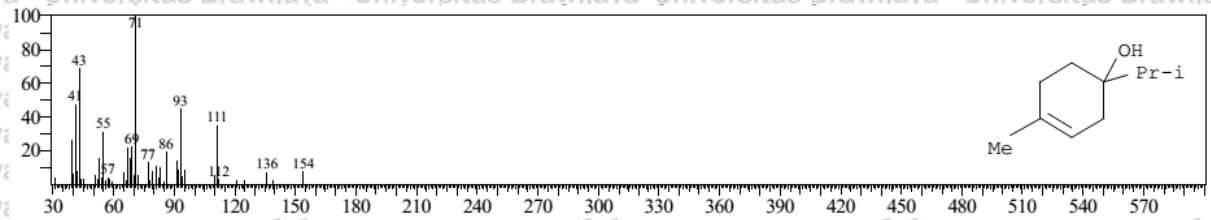
alpha-Terpinene = C₁₀H₁₆



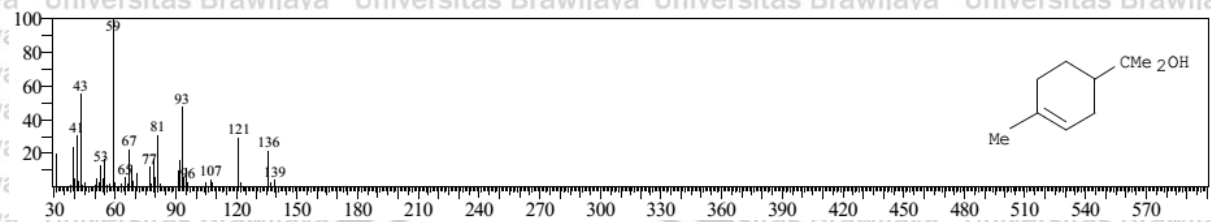
Camphor = C₁₀H₁₆O



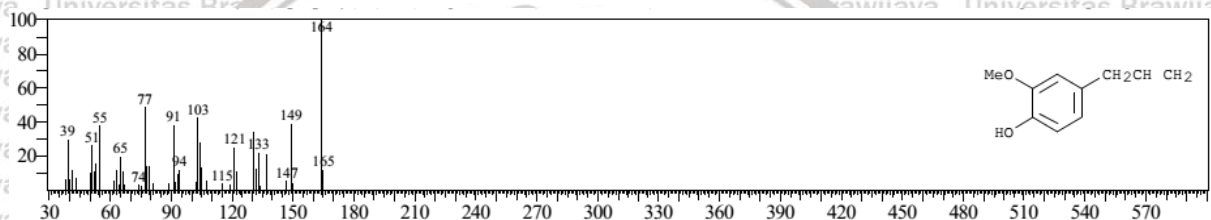
3-Cyclohexen-1-ol = C₁₀H₁₈O



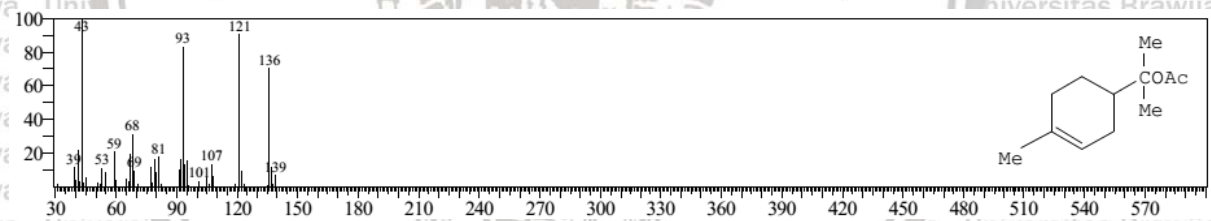
3-Cyclohexene-1-methanol = C₁₀H₁₈O



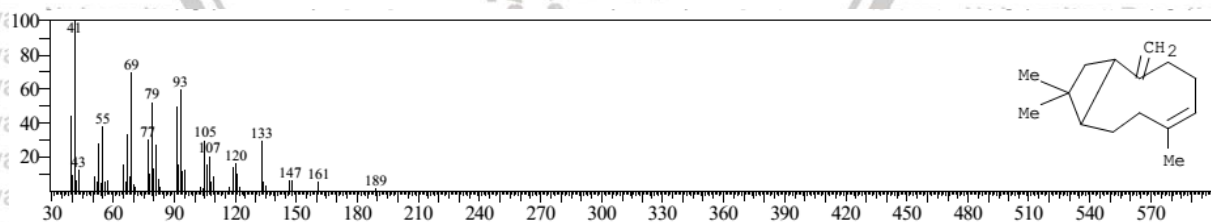
Phenol = C₁₀H₁₂O₂



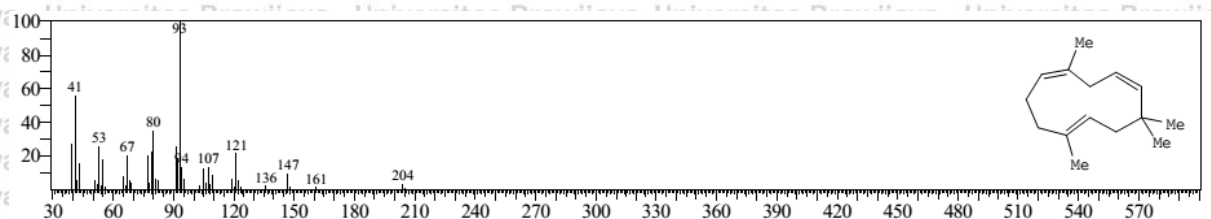
1-P-Menthen-8-yl acetate = C₁₂H₂₀O₂



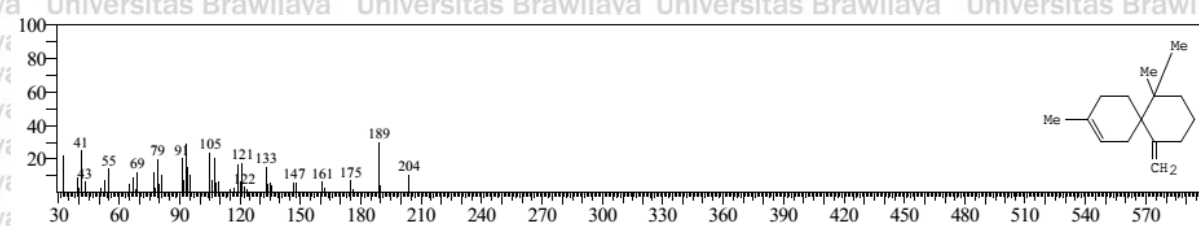
Trans-Caryophyllene = C₁₅H₂₄



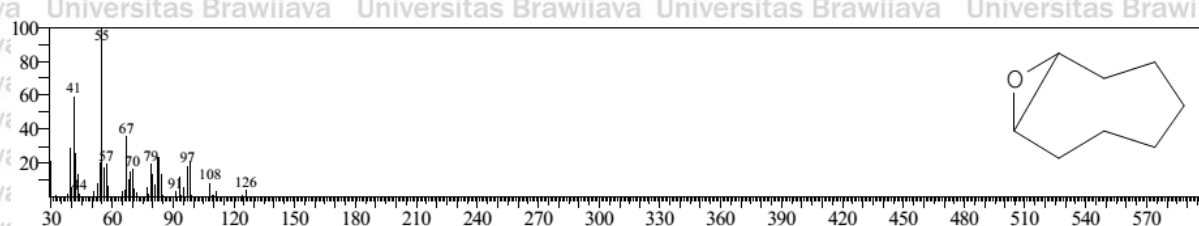
Alpha-Humulene = C₁₅H₂₄



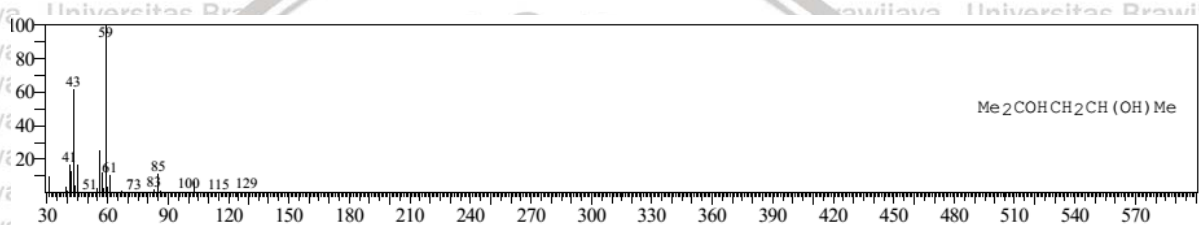
Beta-Chamigrene = C₁₅H₂₄



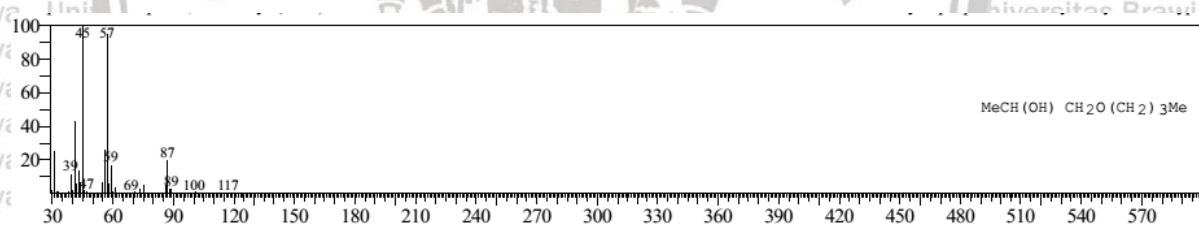
9-Oxabicyclo = C₈H₁₄O



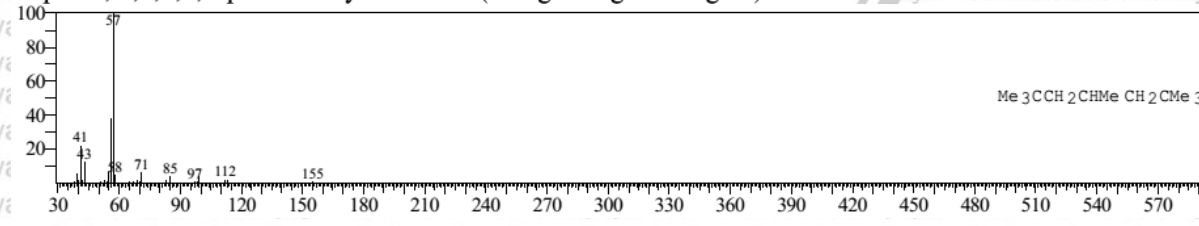
2-methyl-2,4-pentandiol = C₆H₁₄O₂ (solvent)



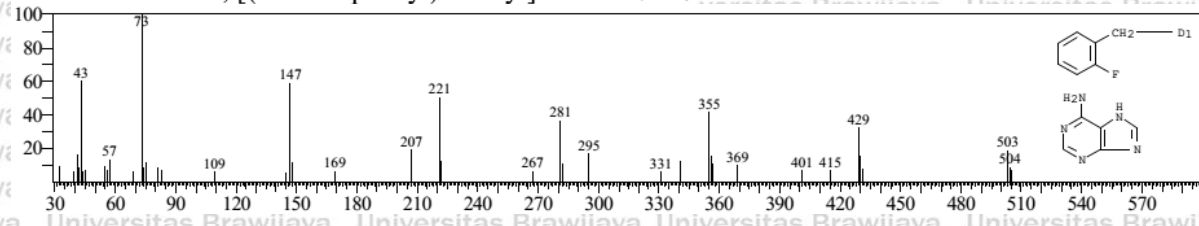
2-propanol, 1-butoxy = C₇H₁₆O₂ (sebagai solvent)



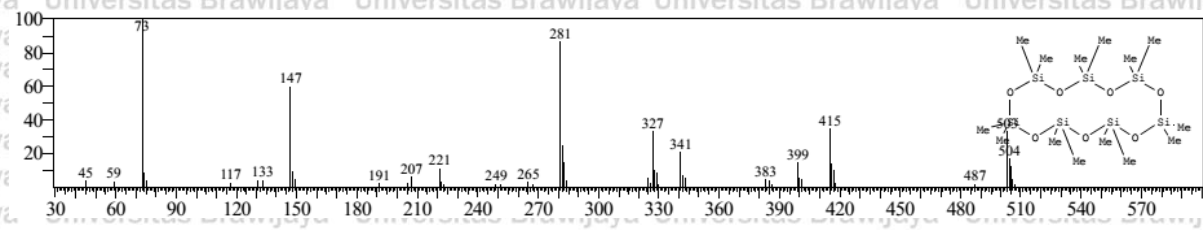
Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl = C₁₂H₂₆ (sebagai fragrance agent)



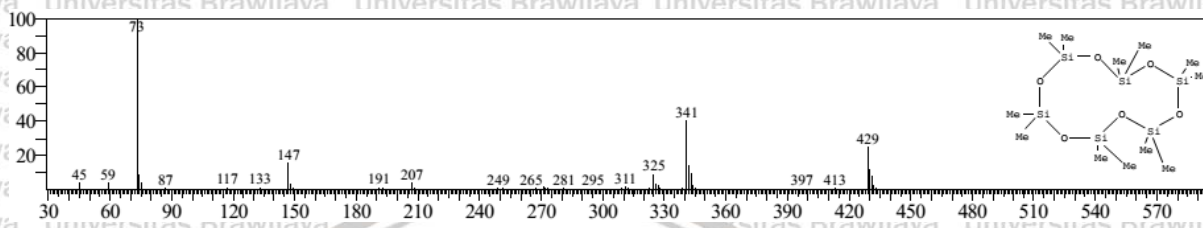
1H-Purin-6-amine, [(2-fluorophenyl) methyl] = C₁₂H₁₀FN₅



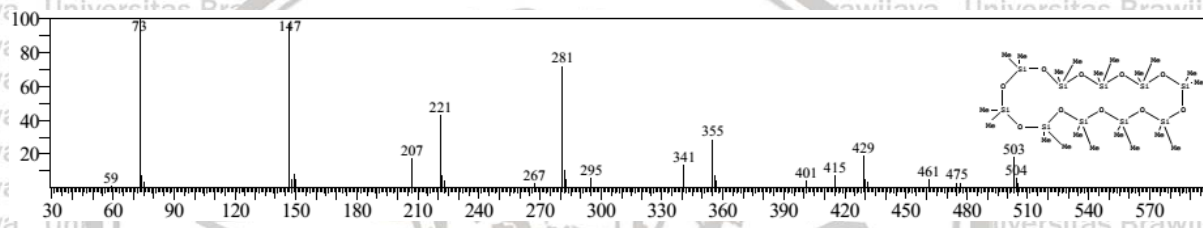
Tetradecamethylcycloheptasiloxane = $C_{14}H_{24}O_7Si_7$



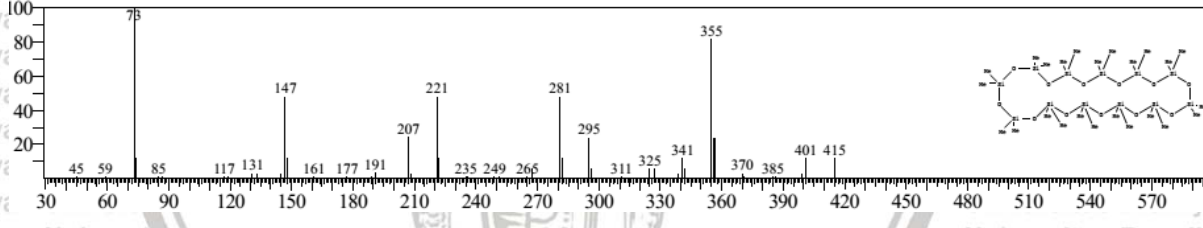
Cyclohexasiloxane, dodecamethyl = $C_{12}H_{36}O_6Si_6$



Cyclodecasiloxane, eicosamethyl = $C_{20}H_{60}O_{10}Si_{10}$

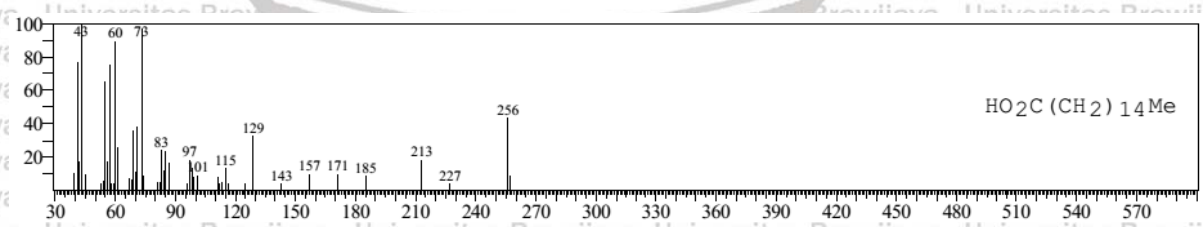


Tetracosamethylcyclododecasiloxane = $C_{24}H_{72}O_{12}Si_{12}$

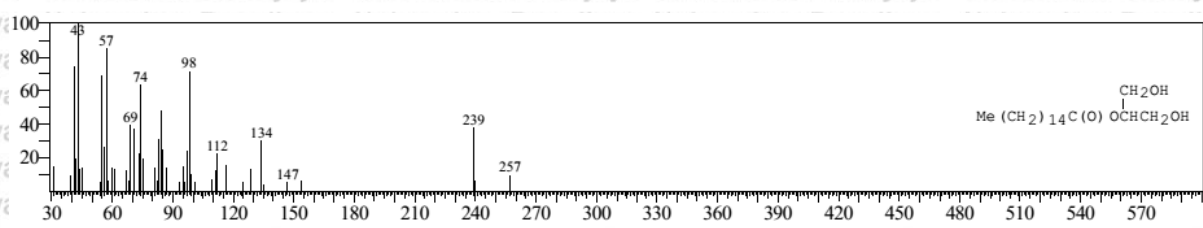


Diglisericida dan asam lemak

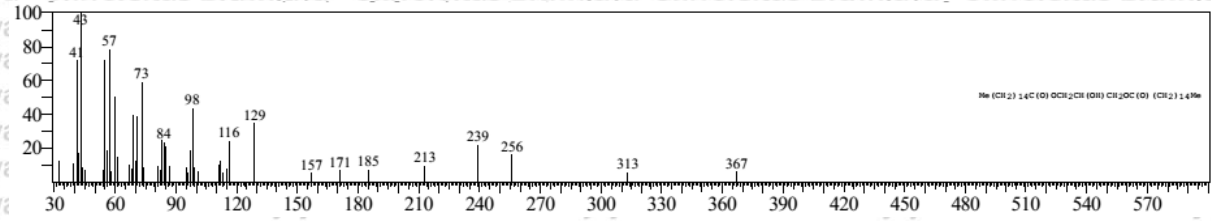
Hexadecanoic acid = palmitic acid = $C_{16}H_{32}O_2$



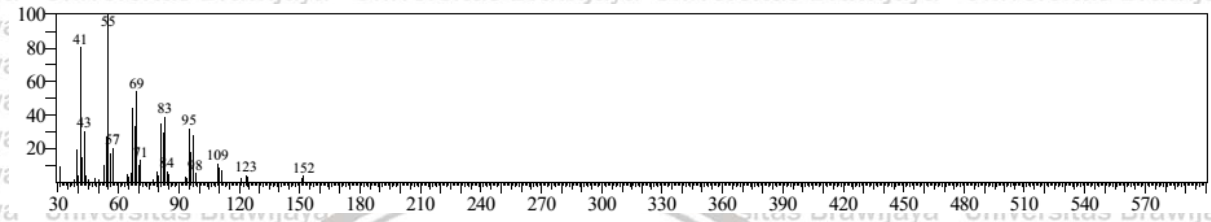
Glyceril 2-palmitate = $C_{19}H_{38}O_4$



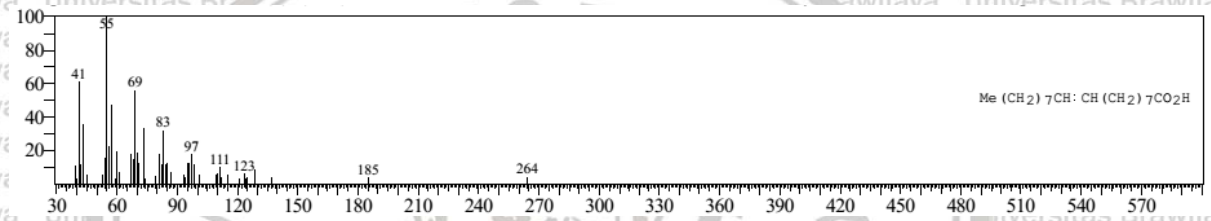
Glyceril 1,3-dipalmitate = $C_{35}H_{68}O_5$



Palmitoleic acid = $C_{16}H_{30}O_2$

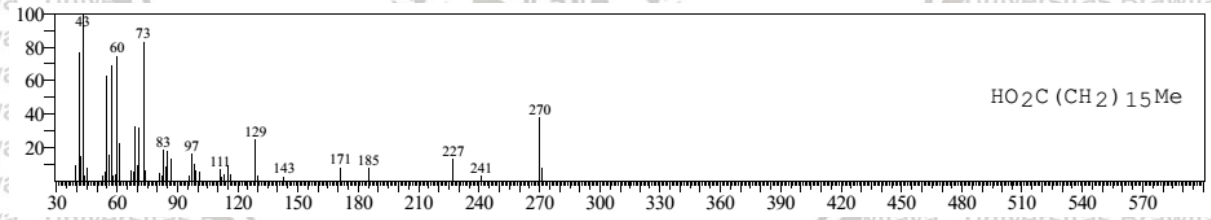


Oleic acid = $C_{18}H_{34}O_2$

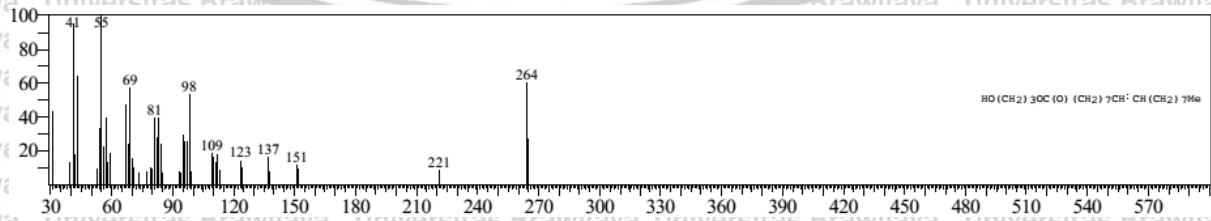


FAME (Fatty Acid Methyl Esters)

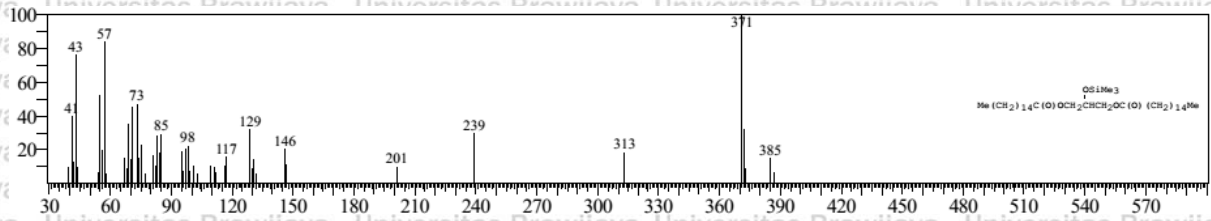
Methyl Palmitate = $C_{17}H_{34}O_2$

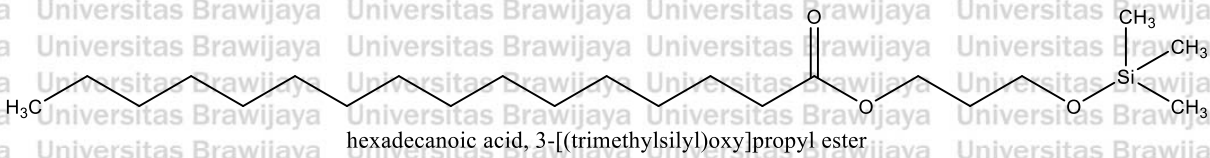


Oleic acid, 3-hydroxypropyl ester = $C_{21}H_{40}O_3$



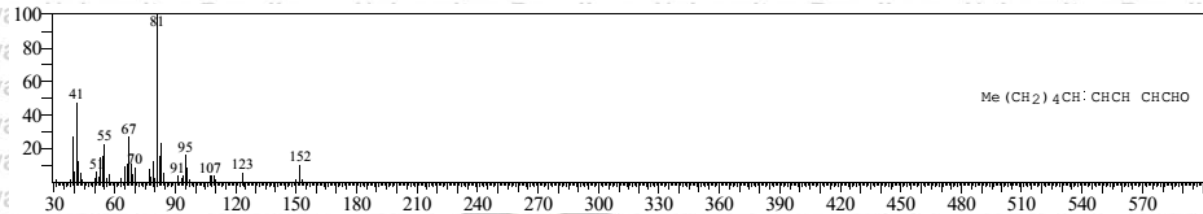
Hexadecanoic acid, 3-[(trimethylsilyl)oxy]propyl ester = $C_{22}H_{46}O_3Si$



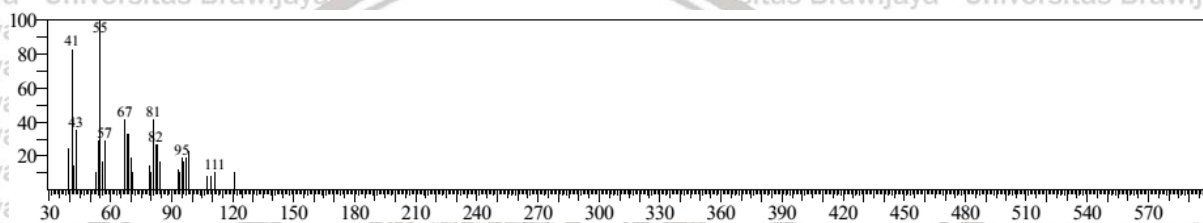


Senyawa aldehida

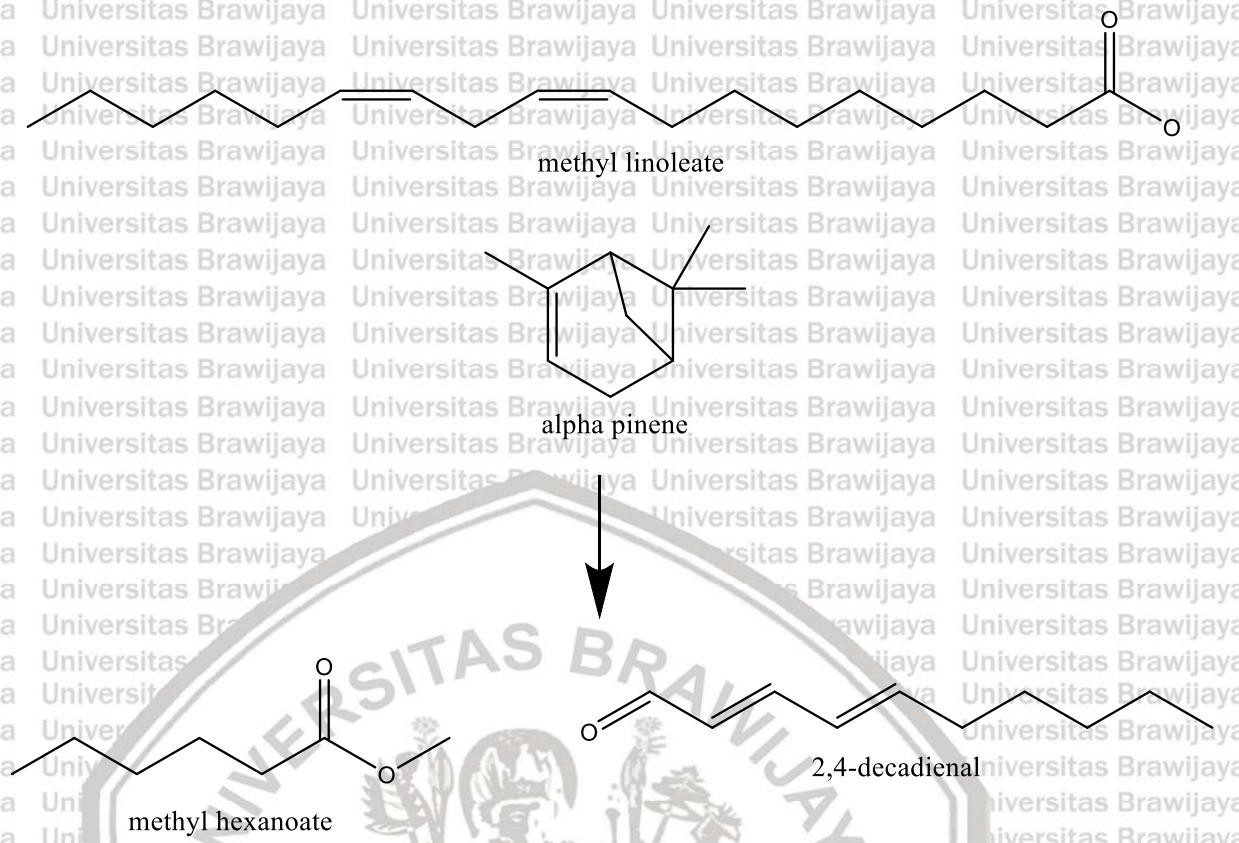
2,4-decadienal = $C_{10}H_{16}O$



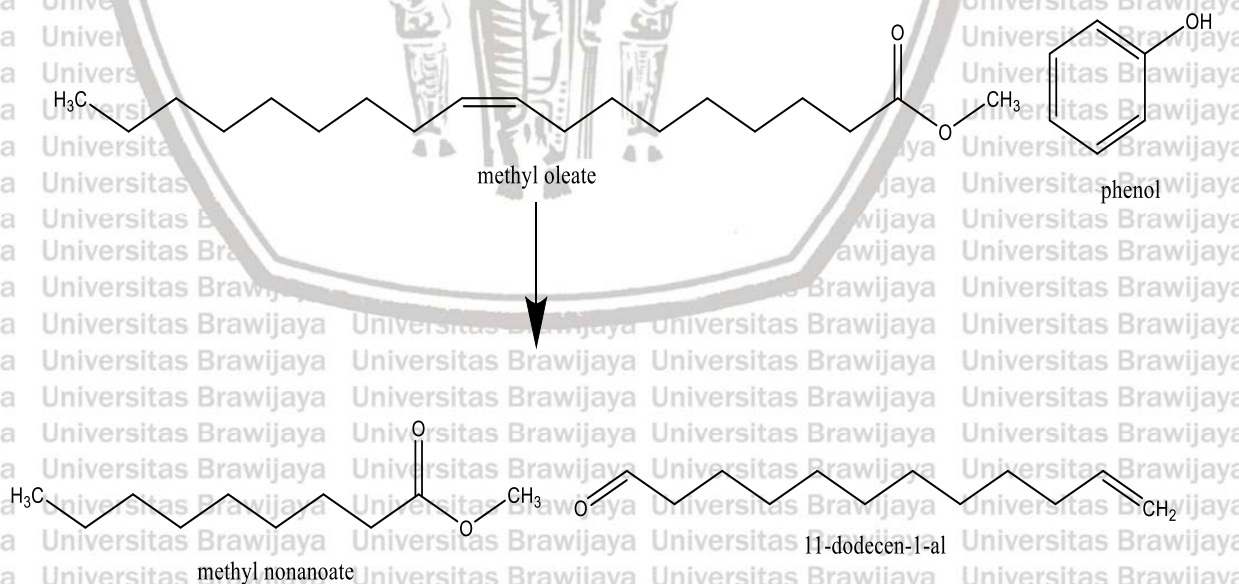
11-dodecen-1-al = $C_{12}H_{22}O$



Senyawa aldehida terbentuk dari pemecahan *unsaturated methyl esters* yaitu metil oleat dan metil linoleat (Baber *et al.*, 2005). Hal ini terjadi karena banyaknya komponen pada minyak kayu putih yang mempunyai gugus aromatic yaitu alpha-pinene, 2-betha-pinene, beta-myrcene, beta-ocimene, gamma-terpinene, alpha-terpinene, camphor, 4-terpineol, alpha-terpineol, phenol, alpha-terpinyl acetate, trans-caryophyllene, alpha-humulene dan alpha-selina, dan lain-lain sehingga menimbulkan medan magnet yang juga besar. Besarnya medan magnet inilah yang memicu terjadinya reaksi pemecahan dari metil ester yang terbentuk. Metil oleat akan pecah menjadi metil nonanoat dan 11-dodecen-1-al sedangkan metil linoleate akan pecah menjadi metil heksanoat dan 2,4-decadienal (Baber *et al.*, 2005). Reaksi pemecahan metil linoleat oleh alpha pinene menjadi metil heksanoat dan 2,4-decadienal serta pemecahan metil oleat oleh phenol menjadi metil nonanoat dan 11-dodecen-1-al ditunjukkan pada gambar di bawah ini:



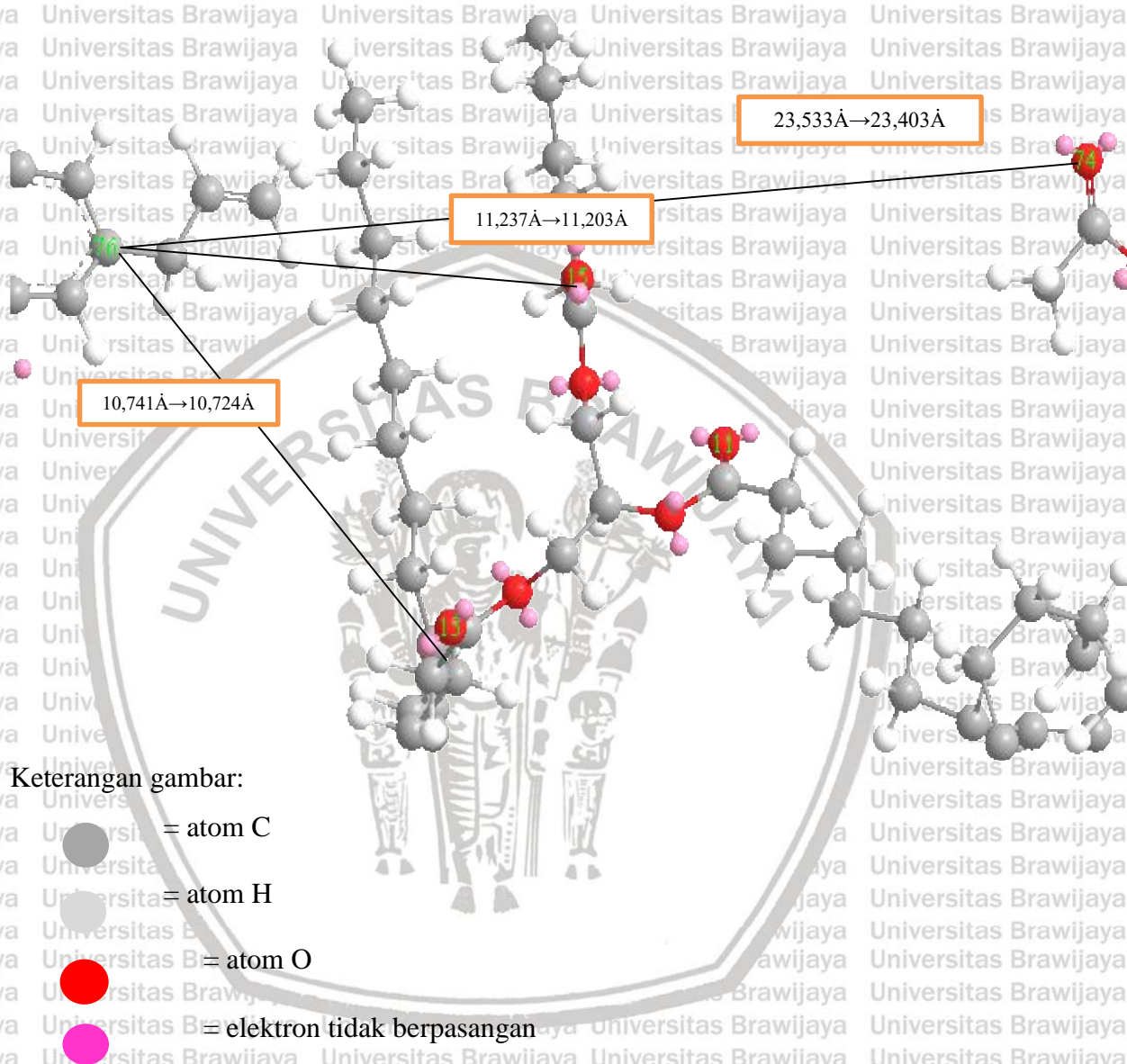
Gambar 5.9 Reaksi pemecahan metil linoleat oleh alpha pinene menjadi metil heksanoat dan 2,4-decadienal



Gambar 5.10 Reaksi pemecahan metil oleat oleh phenol menjadi metil nonanoat dan 11-dodecen-1-al

5.6 Simulasi Perilaku Molekuler dengan Software ChemDraw Professional 15.0

Dengan ditariknya atom O oleh medan magnet, maka terjadi perbedaan jarak atom O dan medan magnet (senyawa aromatic) sebelum dan sesudah terinduksi oleh medan magnet seperti ditunjukkan pada Gambar 5.11 dan Gambar 5.12.



Gambar 5.11 Jarak atom O pada trigliserida dan metil asetat terhadap atom C pada eugenol

Pada Gambar 5.11 terlihat perbedaan jarak antara atom O pada trigliserida maupun metil asetat dengan gugus aromatic/aril pada eugenol (C_{76}). Jarak antara atom C_{76} dengan atom O_{13} (R1 pada trigliserida) berubah dari 10,741Å menjadi 10,724Å, lebih pendek 0,02Å.

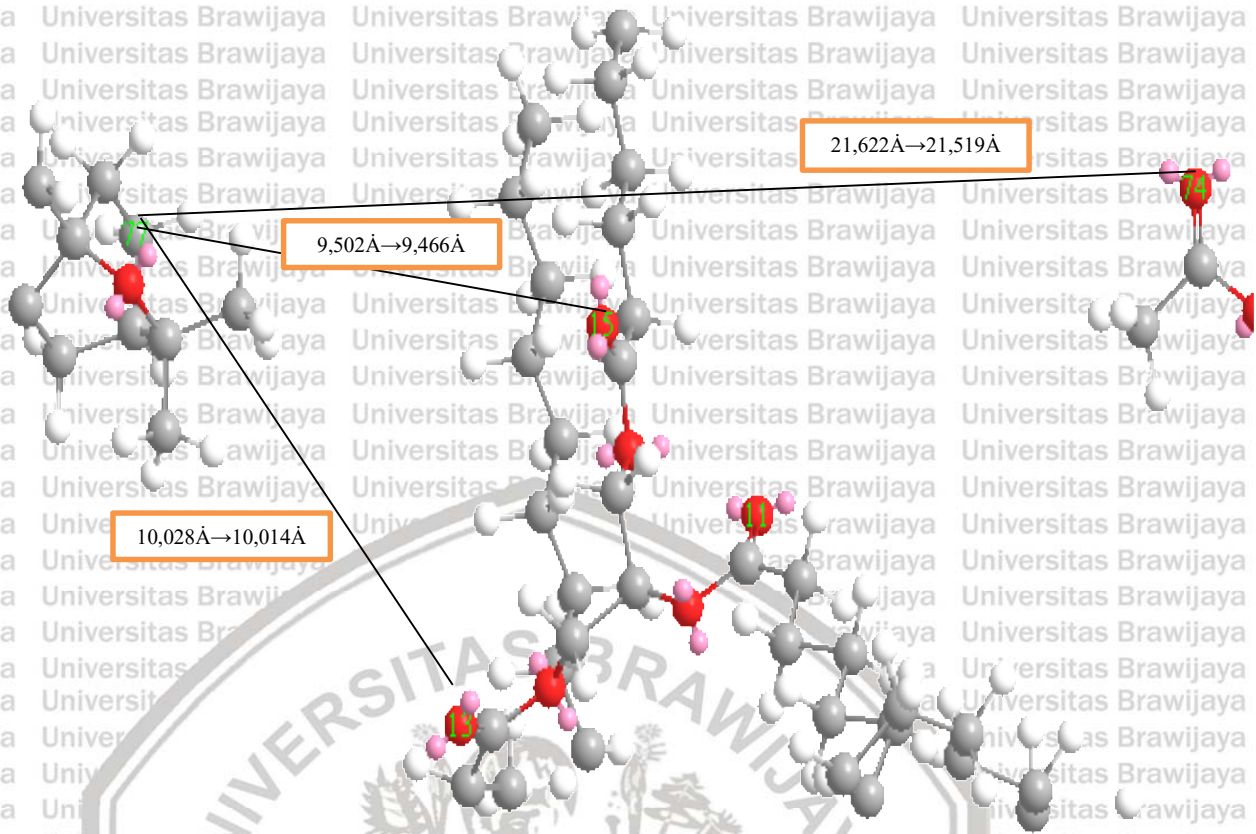
Hal ini menunjukkan bahwa atom O yang mempunyai 2 elektron bebas bersifat paramagnetic yang ditarik oleh medan magnet pada gugus aromatic eugenol. Kondisi ini juga terjadi pada

atom O₁₅ (R₂ pada trigliserida) dimana jarak dengan atom C₇₆ berubah dari 11,237Å menjadi 11,203Å, lebih pendek 0,03Å. Demikian juga jarak antara atom C₇₆ dengan atom O₇₄ (R pada metil asetat) berubah dari 23,533Å menjadi 23,403Å, lebih pendek 0,13Å.

Dengan ditariknya atom O oleh medan magnet menyebabkan juga lemahnya ikatan antara atom C yang berdekatan dengan atom O. Lemahnya ikatan C-C ditunjukkan dengan bertambahnya jarak ikatan C-C seperti ditunjukkan pada Tabel 5.7. Dengan lemahnya ikatan C-C maka akan mempermudah putusnya ikatan yang pada akhirnya terjadi reaksi substitusi antara gugus R (alkil) pada trigliserida dengan gugus R pada metil asetat.

Tabel 5.7 Panjang ikatan C-C sebelum dan sesudah penambahan bio-katalis eugenol

Ikatan C-C	Aktual (Å) akhir	Optimal (Å) awal
C(70) – C(71) → R pada metil asetat	1,783	1,509
C(8) – C(12) → R ₂ (asam oleat)	1,521	1,509
C(7) – C(10) → R ₁ (asam palmitat)	1,548	1,509
C(9) – C(14) → R ₃ (asam linoleat)	1,529	1,509
C(87) – C(88) → R pada metil asetat	1,830	1,509
C(92) – C(93) → R pada metil asetat	1,771	1,509
Jarak ikatan rata-rata	1,664	



Keterangan gambar:

- = atom C
- = atom H
- = atom O
- = elektron tidak berpasangan

Gambar 5.12 Jarak atom O pada trigliserida dan metil asetat terhadap atom C pada sineol (minyak kayu putih)

Penjelasan Gambar 5.12 kurang lebih sama dengan Gambar 5.11 dimana terlihat perbedaan jarak antara atom O pada trigliserida maupun metil asetat dengan gugus aromatic/aryl pada sineol (C_{76}). Jarak antara atom C_{76} dengan atom O_{13} (R1 pada trigliserida) berubah dari 10,028Å menjadi 10,014Å, lebih pendek 0,014Å. Pada atom O_{15} (R2 pada trigliserida) dimana jarak dengan atom C_{76} berubah dari 9,502Å menjadi 9,466Å, lebih pendek 0,036Å. Demikian juga jarak antara atom C_{76} dengan atom O_{74} (R pada metil asetat) berubah dari 21,622Å menjadi 21,519Å, lebih pendek 0,103Å. Dengan ditariknya atom O oleh medan magnet menyebabkan juga lemahnya ikatan antara atom C yang berdekatan

dengan atom O. Lemahnya ikatan C-C ditunjukkan dengan bertambahnya panjang ikatan C-C seperti ditunjukkan pada Tabel 5.8. Dengan lemahnya ikatan C-C maka akan mempermudah putusannya ikatan yang pada akhirnya terjadi reaksi substitusi antara gugus R (alkil) pada trigliserida dengan gugus R pada metil asetat.

Tabel 5.8 Panjang ikatan C-C sebelum dan sesudah penambahan sineol (minyak kayu putih)

Ikatan C-C	Aktual (Å)	Optimal
	akhir	(Å) awal
C(69) – C(70) → R pada metil asetat	1,518	1,509
C(8) – C(12) → R ₁ (asam palmitat)	1,520	1,509
C(7) – C(10) → R ₂ (asam oleat)	1,508	1,509
C(9) – C(14) → R ₃ (asam linoleat)	1,531	1,509
C(74) – C(75) → R pada metil asetat	1,510	1,509
C(79) – C(80) → R pada metil asetat	1,518	1,509
Panjang ikatan rata-rata	1,5175	

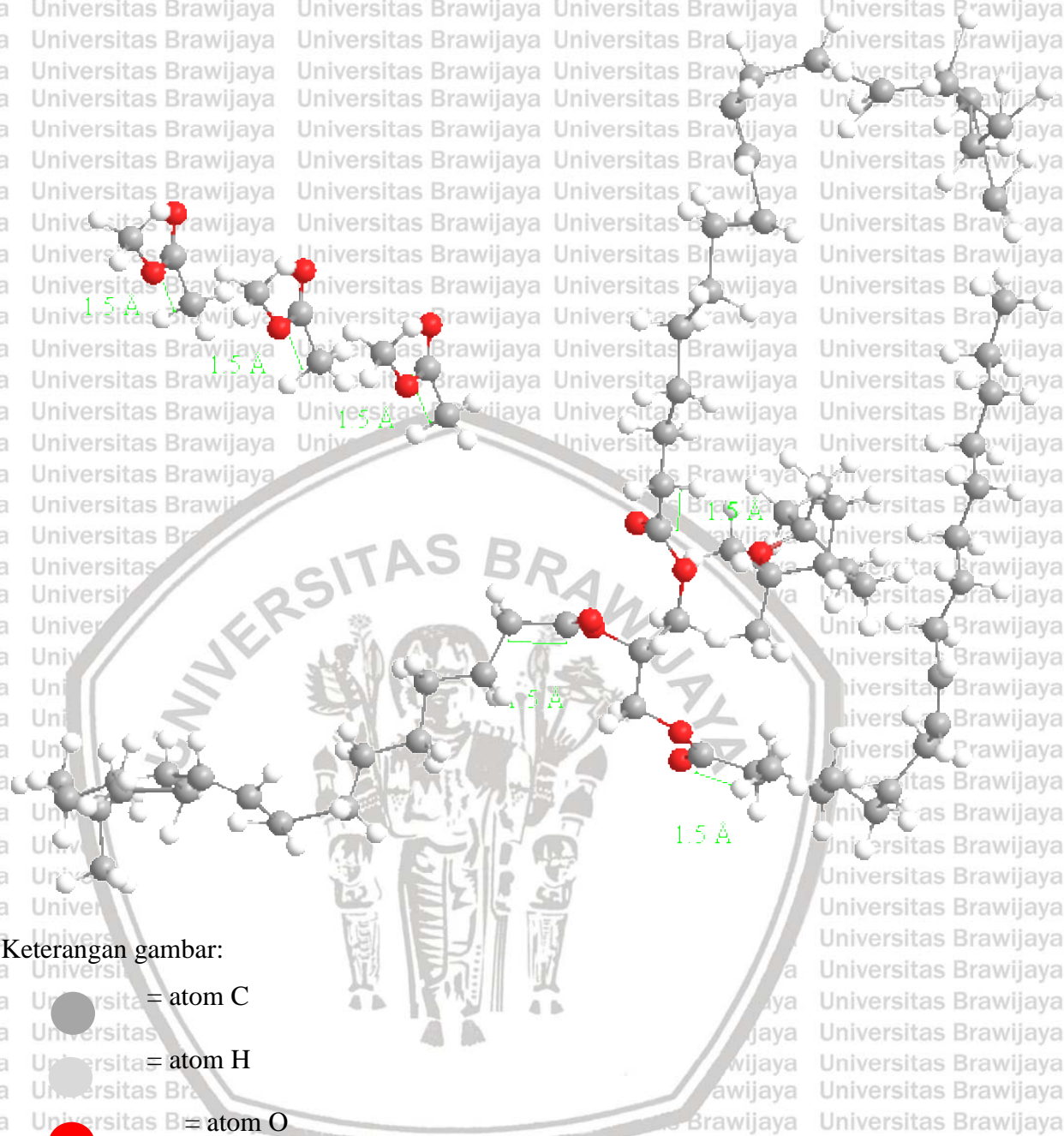
Tabel 5.9 Panjang Ikatan C-C Sebelum dan Sesudah Penambahan Katalis NaOH

Ikatan C-C	Aktual (Å)	Optimal
	akhir	(Å) awal
C(69) – C(70) → R pada metil asetat	1,536	1,509
C(8) – C(12) → R ₁ (asam palmitat)	1,506	1,509
C(7) – C(10) → R ₂ (asam oleat)	1,490	1,509
C(9) – C(14) → R ₃ (asam linoleat)	1,490	1,509
C(74) – C(75) → R pada metil asetat	1,513	1,509
C(79) – C(80) → R pada metil asetat	1,516	1,509
Panjang ikatan rata-rata	1,5085	

Pada reaksi interesterifikasi dengan katalis NaOH tidak dilakukan perhitungan jarak antara atom O yang bersifat paramagnetic dengan katalis NaOH karena NaOH tidak mempunyai medan magnet. Dilakukan simulasi perhitungan panjang ikatan C-C sebelum dan sesudah ditambahkan katalis NaOH untuk melihat perbedaannya dengan katalis eugenol maupun sineol seperti ditunjukkan pada Tabel 5.9.

Dari perhitungan panjang ikatan C-C rata-rata setelah ditambahkan katalis didapatkan hasil untuk bio-katalis eugenol panjang ikatan C-C berubah dari 1,509Å menjadi 1,644Å lebih panjang 0,135Å. Untuk bio-katalis sineol panjang ikatan C-C berubah dari 1,509Å menjadi 1,5175Å lebih panjang 0,0085Å dan untuk katalis NaOH panjang ikatan C-C berubah dari 1,509Å menjadi 1,5085Å lebih pendek 0,005Å. Hal ini menunjukkan bahwa dengan penggunaan bio-katalis eugenol ikatan C-C pada molekul trigliserida dan metil asetat paling aktif bergerak untuk melepaskan diri dari ikatannya untuk bereaksi.

Pada simulasi perilaku molecular dengan ChemDraw menunjukkan bahwa semakin pendek jarak atom C pada gugus aril/aromatic eugenol maupun sineol, maka panjang ikatan C-C pada trigliserida dan metil asetat semakin panjang. Hal ini berhubungan dengan hukum I Newton merupakan gambaran dari kondisi yang menyatakan bahwa untuk material yang bergerak pada umumnya selalu bergerak dan untuk material sangat diam pada umumnya tetap tidak bergerak, dengan kata lain semua benda akan cenderung mempertahankan posisinya (diam atau bergerak). Dalam hal ini gugus aromatic pada bio-katalis eugenol/sineol sebagai benda diam yang kita asumsikan sama dengan bumi yang mempunyai medan magnet dan benda yang bergerak adalah gugus karbonil dan gugus alkil pada trigliserida dan metil asetat. Karena gugus karbonil (C-O, C=O) pada trigliserida dan metil asetat bersifat paramagnetic dan polar maka akan bergerak mendekati medan magnet, sebaliknya ikatan C-C yang bersifat non polar dan diamagnetic akan menjauhi medan magnet.



Keterangan gambar:

- = atom C
- = atom H
- = atom O

Gambar 5.13 Molekular dinamik trigliserida dan metil asetat dengan penambahan sineol (minyak kayu putih)

Gambar 5.13 menunjukkan perilaku molekular trigliserida dan metil asetat pada waktu ditambahkan bio-katalis sineol. Warna merah adalah atom O, putih adalah atom H, abu-abu adalah atom C dan warna hijau muda adalah jarak ikatan.

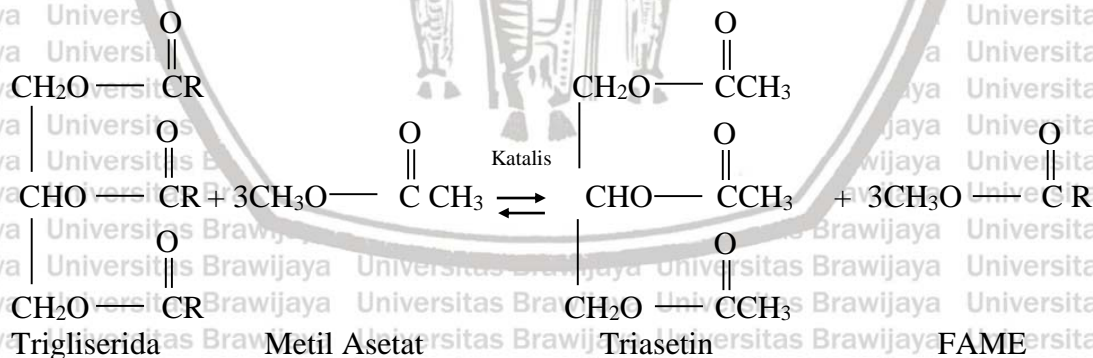
5.7 Perhitungan Energi Kinetik dan Energi Potensial dengan Software ChemDraw Professional 15.0

Tabel 5.10 Perhitungan energi total komponen dengan software Chemdraw

Komponen	Energi Potensial	Energi Kinetik	Energi Total
Trigliserida	-5302,2164	2646,6728	-2652,5436
Metil Asetat	-529,7984	264,4740	-265,3244
Metil Palmitat	-1615,4885	806,7643	-808,7242
Metil Heksanoat	-839,9967	419,3990	-420,5977
Metil Nonanoat	-1072,7100	535,6662	-537,0438
Triasetin	-1585,6890	792,0908	-793,5950
Eugenol	-1063,6630	531,3799	-532,2833
Sineol	-921,965	460,5306	-461,4350

Energy pada system mempunyai 2 bagian, khususnya *kinetic energy* serta *potential energy*, dimana: $E_{total} = E_{potensial} + E_{kinetic}$

Bagian dari *kinetic energy* adalah bermacam gerakan atom serta perkembangan elektron pada partikel. *Potential energy* berdasarkan hubungan elektron serta inti, serta hubungan antara elektron, serta antara inti pada atom tunggal, juga hubungan antara partikel.



Gambar 5.14 Reaksi interesterifikasi overall trigliserida dan metil asetat

Dari analisa GC susunan FAME yang terbentuk yaitu metil heksanoat, metil palmitate serta metil nonanoat. Untuk menentukan perubahan energy reaksi ditentukan dengan persamaan berikut:

$$\Delta E = E \text{ total (produk)} - E \text{ total (reaktan)}$$

Energi total masing-masing komponen yang terlibat dalam reaksi interesterifikasi ditentukan dengan software ChemDraw Professional 15.0, sehingga perhitungan untuk perubahan energy pada reaksi interesterifikasi adalah:

$$\Delta E = E \text{ total (produk)} - E \text{ total (reaktan)}$$

$$= [\text{energy dalam 1 mol triasetin} + (\text{energy dalam 1 mol metil heksanoat} + \text{energy dalam 1 mol metil palmitat} + \text{energy dalam 1 mol metil nonanoat}) -$$

$$[\text{energy dalam 1 mol trigliserida} + \text{energy dalam 3 mol metil asetat}]$$

$$= [(-793,5950) + ((-420,5977) + (-808,7242) + (-537,0438))] - [(-2652,5436) + (3 \cdot -265,3244)]$$

$$= [(-2550,9607) + (3448,5168)]$$

$$= 888,5561 \text{ kJ/mol}$$

Tabel 5.11 Perhitungan energi kinetik dan moment dipole pada komponen dengan ChemDraw

Komponen	E Potensial (kJ/mol)	E Kinetik (kJ/mol)	Moment Dipole (debye)
Trigliserida+metil asetat+ eugenol	-6895,0140	3445,6577	4,7175
Trigliserida + metil asetat + sineol	-6754,7527	3376,2807	5,3944
Trigliserida + metil asetat	-5832,3952	2914,6673	3,9504

Dari Tabel 5.11 diketahui bahwa penambahan bio-katalis senyawa aromatic membuat reaktan yaitu trigliserida dan metil asetat lebih reaktif dibandingkan tanpa penambahan bio-katalis. Hal ini diketahui dari nilai energy kinetic mula-mula reaktan yaitu 2914,6673 kJ/mol naik menjadi 3445,6577 kJ/mol setelah ditambahkan bio-katalis eugenol. Penambahan bio-katalis eugenol pada trigliserida dan metil asetat membuat komponen ini lebih aktif bergerak dibandingkan dengan penambahan bio-katalis sineol. Hal itu diketahui dari energy kinetic dan panjang ikatan C-C rata-rata yang lebih besar dari sineol. Semakin tinggi energy kinetic maka komponen semakin aktif bergerak (Marlina *et al.*, 2020). Faktor inilah yang paling berpengaruh untuk kestabilan suatu molekul, karena semakin tinggi energy kinetic maka semakin tidak stabil suatu molekul dan lebih mudah membuat elektron berpindah dari pita valensi ke pita konduksi.

Dari Tabel 5.11 juga diketahui dengan penambahan bio-katalis senyawa aromatic menghasilkan moment dipole yang lebih besar dibandingkan tanpa penambahan bio-katalis.

Moment dipole mula-mula reaktan adalah 3,9504 debye, tetapi setelah ditambahkan bio-katalis eugenol moment dipole naik menjadi 4,7175 debye. Dari perhitungan moment dipole diketahui bahwa dengan penambahan sineol menghasilkan moment dipole lebih besar dibanding dengan penambahan eugenol, sehingga trigliserida dan metil asetat lebih larut dengan penambahan sineol. Semakin besar nilai moment dipole maka interaksi molekul di dalam komponen semakin tinggi (Waluyo *et al.*, 2020). Hal ini membuktikan bahwa fungsi senyawa aromatic selain sebagai bio-katalis adalah juga sebagai pelarut reaktan.

Dari Gambar 5.2 yaitu gambar hubungan antara waktu reaksi (menit) dengan yield (%) diketahui bahwa pemakaian bio-katalis minyak kayu putih (sineol) membutuhkan waktu yang cukup lama untuk menghasilkan yield yang tinggi. Hal ini disebabkan karena konsentrasi sineol pada minyak kayu putih komersial kecil yaitu 28,84%. Dengan kecilnya kadar sineol maka akan memengaruhi kelarutannya dengan trigliserida dan metil asetat pada proses interesterifikasi. Pada simulasi dengan ChemDraw untuk menentukan moment dipole menggunakan parameter sineol 100%. Konsentrasi bio-katalis eugenol yang digunakan yaitu 95%, sehingga mempunyai kelarutan yang besar terhadap trigliserida dan metil asetat pada proses interesterifikasi.

Energi gap atau celah energy adalah energy yang dibutuhkan oleh elektron loncat dari orbital valensi ke orbital konduksi. Celah energi hampir sama dengan energy total yaitu merupakan jumlah dari energy potensial dan energy kinetik.

Tabel 5.12 Energi Gap untuk Trigliserida dan Metil Asetat

Komponen	Energi Potensial (kJ/mol)	Energi Kinetik (kJ/mol)	Energi Total = Energi Gap bernilai + (kJ/mol)
Trigliserida	-5302,2164	2646,6728	-2652,5436
Metil Asetat	-529,7984	264,4740	-265,3244

Dari Tabel 5.12 dapat dilihat bahwa energy total untuk trigliserida adalah -2652,5436 kJ/mol, artinya kita membutuhkan energy gap minimal 2652,5436 kJ/mol untuk membuat elektron pada trigliserida berpindah dari pita valensi ke pita konduksi. Energy total untuk metil asetat adalah -265,3244 kJ/mol, artinya kita membutuhkan energy gap minimal 265,3244 kJ/mol untuk membuat elektron pada metil asetat berpindah dari orbital valensi ke orbital konduksi. Jika energy yang ditambahkan besar maka elektron akan semakin reaktif.

5.8 Perhitungan $\Delta H^{\circ}_{\text{reaksi}}$ untuk Menentukan Reaksi Eksotermis atau Endotermis

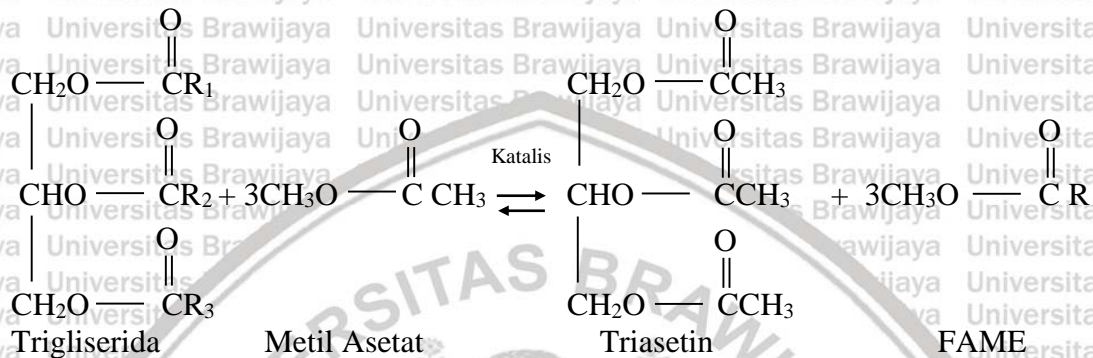
Persamaan reaksi: $eE + fF \rightarrow gG + hH$

Untuk e, f, g serta h merupakan konstanta stoikiometri. Pada reaksi tersebut $\Delta H^{\circ}_{\text{reaksi}}$ adalah:

$$\Delta H^{\circ}_{\text{reaksi}} = [g\Delta H^{\circ}_f(G) + h\Delta H^{\circ}_f(H)] - [e\Delta H^{\circ}_f(E) + f\Delta H^{\circ}_f(F)]$$

Dengan e, f, g dan h dalam mol. Kita dapat menggeneralisasi persamaan tersebut menjadi:

$$\Delta H^{\circ}_{\text{reaksi}} = \sum n\Delta H^{\circ}_f(\text{produk}) - \sum m\Delta H^{\circ}_f(\text{reaktan})$$



Gambar 5.15 Overall Reaction Interesterification

Gugus Alkil (R) pada Trigliserida

$R_1 = \text{palmitat}$	$-(\text{CH}_2)_{14}-\text{CH}_3$
$R_2 = \text{oleat}$	$-(\text{CH}_2)_7\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{CH}_3$
$R_3 = \text{linoleat}$	$-(\text{CH}_2)_7\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$

Tiga Molekul FAME

Metil heksanoat	$\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_4-\text{COO}-\text{CH}_3$
Metil palmitat	$\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_{14}-\text{COO}-\text{CH}_3$
Metil nonanoat	$\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_7-\text{COO}-\text{CH}_3$

Untuk menentukan ΔH°_f dengan menggunakan Metode Joback yaitu dengan persamaan: $\Delta H^{\circ}_f(298,15\text{K}) = 68,29 + \sum N_k\Delta h_{fk}$ (kJ/mol) (Poling *et al.*, 2001)

h_{fk} = panas pembentukan untuk masing-masing bagian komponen (Appendix C. Tabel C-1.

“The Properties of Gases and Liquids”, Poling *et al.*, 2001).

1. Menentukan Δh_{fk} untuk reaktan. Trigliserida

Group k	N_k	Δh_{fk} (kJ/mol)	$N_k \Delta h_{fk}$ (kJ/mol)
O	3	-132,22	-396,66
C=O	3	-133,22	-399,66
CH ₂	42	-20,64	-866,88
CH ₃	3	-76,45	-229,35
=CH	3	37,97	113,91
CH	3	29,89	89,67
		$\Sigma N_k \Delta h_{fk}$ (kJ/mol)	-1.688,97

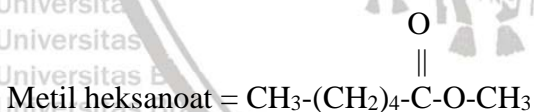
Tiga molekul metil asetat

Group k	N_k	Δh_{fk} (kJ/mol)	$N_k \Delta h_{fk}$ (kJ/mol)
O	3x1	-132,22	-396,66
C=O	3x1	-133,22	-399,66
CH ₃	3x2	-76,45	-458,7
		$\Sigma N_k \Delta h_{fk}$ (kJ/mol)	-1.255,02

Sehingga $\Sigma N_k \Delta h_{fk}$ reaktan = -2.943,99 kJ/mol

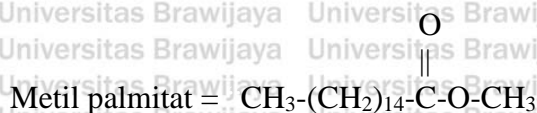
2. Menentukan Δh_{fk} untuk produk.

Tiga molekul metil ester yaitu metil heksanoat, metil palmitate dan metil nonanoat

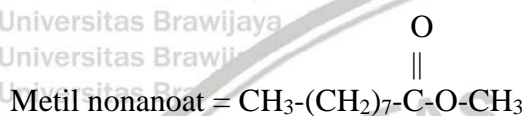


Group k	N_k	Δh_{fk} (kJ/mol)	$N_k \Delta h_{fk}$ (kJ/mol)
O	1	-132,22	-132,22
C=O	1	-133,22	-133,22
CH ₂	4	-20,64	-82,56
CH ₃	2	-76,45	-152,9
		$\Sigma N_k \Delta h_{fk}$ (kJ/mol)	-500,9





Group k	N _k	Δh _{fk} (kJ/mol)	N _k Δh _{fk} (kJ/mol)
O	1	-132,22	-132,22
C=O	1	-133,22	-133,22
CH ₂	14	-20,64	-288,96
CH ₃	2	-76,45	-152,9
ΣN _k Δh _{fk} (kJ/mol)			-707,3



Group k	N _k	Δh _{fk} (kJ/mol)	N _k Δh _{fk} (kJ/mol)
O	1	-132,22	-132,22
C=O	1	-133,22	-133,22
CH ₂	7	-20,64	-144,48
CH ₃	2	-76,45	-152,9
ΣN _k Δh _{fk} (kJ/mol)			-562,82

Triasetin

Group k	N _k	Δh _{fk} (kJ/mol)	N _k Δh _{fk} (kJ/mol)
O	3	-132,22	-396,66
C=O	3	-133,22	-399,66
CH ₂	2	-20,64	-41,28
CH ₃	3	-76,45	-229,35
CH	1	29,89	29,89
ΣN _k Δh _{fk} (kJ/mol)			-1.037,03

Sehingga ΣN_kΔh_{fk} produk = -2.808,05 kJ/mol



Menentukan $\Delta H^{\circ}_{\text{reaksi}}$

$$\Delta H^{\circ}_{\text{reaksi}} = \Delta H^{\circ}_{\text{f}}(\text{product}) - \Delta H^{\circ}_{\text{f}}(\text{reactant})$$

$$\Delta H^{\circ}_{\text{f reaktan}} = 68,29 + \sum N_k \Delta h_{\text{fk reaktan}} = 68,29 + (-2.943,99) = -2.875,7 \text{ kJ/mol}$$

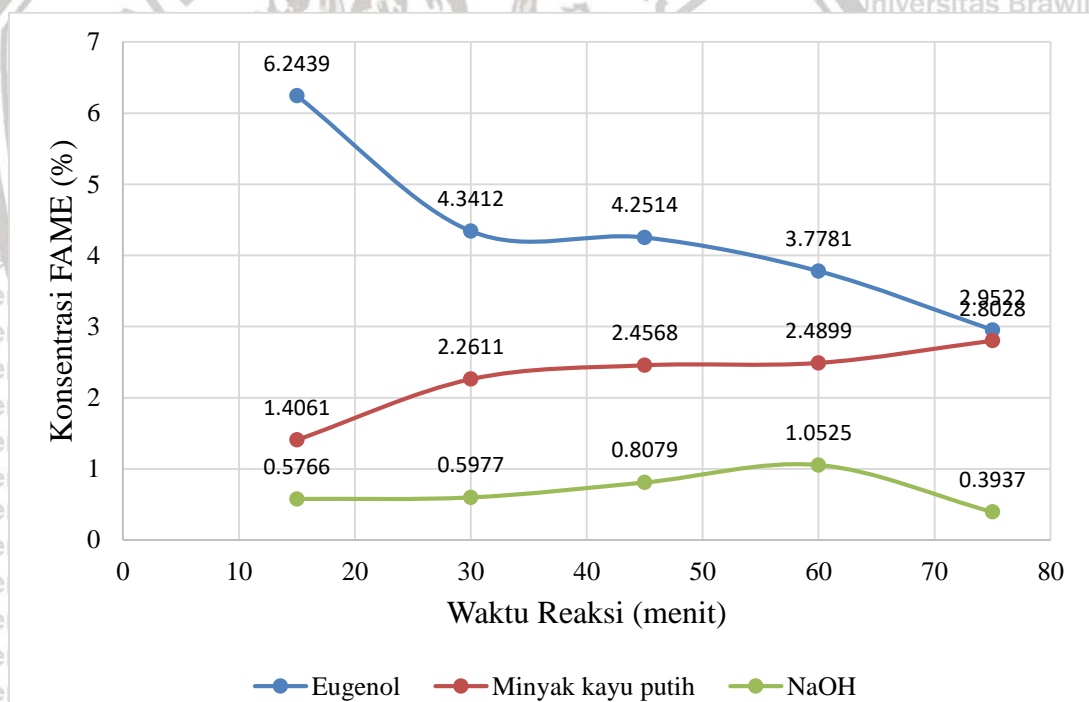
$$\Delta H^{\circ}_{\text{f produk}} = 68,29 + \sum N_k \Delta h_{\text{fk produk}} = 68,29 + (-2.808,05) = -2.739,76 \text{ kJ/mol}$$

Sehingga:

$$\Delta H^{\circ}_{\text{reaksi}} = -2.739,79 - (-2.875,7) = 135,91 \text{ kJ/mol (reaksi endotermis = membutuhkan panas)}$$

5.8 Konversi Reaksi Trigliserida

Konversi reaksi trigliserida ditentukan berdasarkan berapa banyak mol produk yang terbentuk. Hasil yang didapatkan pada reaksi adalah metil ester dan triasetin. Untuk menentukan mol produk yang terbentuk, langkah pertama adalah merubah satuan hasil analisa GC konsentrasi FAME yang terbentuk dari ppm menjadi % massa seperti ditunjukkan pada Gambar 5.16.



Gambar 5.16 Hubungan waktu reaksi (menit) terhadap konsentrasi FAME (%) dengan variasi jenis katalis

Pada Gambar 5.16 terlihat bahwa untuk reaksi interesterifikasi dengan bio-katalis eugenol pada waktu reaksi 15 menit didapatkan konsentrasi FAME = 6,2439%, sehingga jika

dihubungkan dengan *crude yield* = $\frac{207,9}{250} = 83,16\%$ maka massa metil ester dalam produk = $0,062423 \times 207,9 = 12,9811$ gram.

Menentukan massa masing-masing metil ester:

$$\text{Massa metil heksanoat} = \text{massa FAME} \times \text{fraksi massa metil heksanoat} = 0,8087 \times 12,9811 = 10,4978 \text{ gram}$$

$$\text{Massa metil palmitat} = \text{massa FAME} \times \text{fraksi massa metil palmitat} = 0,1659 \times 12,9811 = 2,1536 \text{ gram}$$

$$\text{Massa metil nonanoat} = \text{massa FAME} \times \text{fraksi massa metil nonanoat} = 0,0109 \times 12,9811 = 0,1415 \text{ gram}$$

$$\text{Massa metil laurat} = \text{massa FAME} \times \text{fraksi massa metil laurat} = 0,0072 \times 12,9811 = 0,0935 \text{ gram}$$

$$\text{Massa metil oktanoat} = \text{massa FAME} \times \text{fraksi massa metil oktanoat} = 0,0072 \times 12,9811 = 0,0935 \text{ gram}$$

Menentukan mol masing-masing metil ester:

$$\text{Mol metil heksanoat} = \frac{\text{massa metil heksanoat}}{\text{BM metil heksanoat}} = \frac{10,4978}{130} = 0,0808 \text{ mol}$$

$$\text{Mol metil palmitat} = \frac{\text{massa metil palmitat}}{\text{BM metil palmitat}} = \frac{2,1536}{270} = 0,0080 \text{ mol}$$

$$\text{Mol metil nonanoat} = \frac{\text{massa metil nonanoat}}{\text{BM metil nonanoat}} = \frac{0,1415}{171} = 0,0008 \text{ mol}$$

$$\text{Mol metil laurat} = \frac{\text{massa metil laurat}}{\text{BM metil laurat}} = \frac{0,0935}{214} = 0,0004 \text{ mol}$$

$$\text{Mol metil oktanoat} = \frac{\text{massa metil oktanoat}}{\text{BM metil oktanoat}} = \frac{0,0935}{157} = 0,0006 \text{ mol}$$

Menentukan fraksi mol masing-masing metil ester:

$$\text{Fraksi mol metil heksanoat} = \frac{\text{mol metil heksanoat}}{\text{mol total}} = \frac{0,0808}{0,0906} = 0,8918$$

$$\text{Fraksi mol metil palmitat} = \frac{\text{mol metil palmitat}}{\text{mol total}} = \frac{0,0080}{0,0906} = 0,0883$$

$$\text{Fraksi mol metil nonanoat} = \frac{\text{mol metil nonanoat}}{\text{mol total}} = \frac{0,0008}{0,0906} = 0,0088$$

$$\text{Fraksi mol metil laurat} = \frac{\text{mol metil laurat}}{\text{mol total}} = \frac{0,0004}{0,0906} = 0,0044$$

$$\text{Fraksi mol metil oktanoat} = \frac{\text{mol metil oktanoat}}{\text{mol total}} = \frac{0,0006}{0,0906} = 0,0066$$

Menentukan BM rata-rata:

$$\text{BM rata-rata} = \Sigma (n \cdot \text{BM})$$

Dimana : n = fraksi mol

BM = Berat molekul masing-masing

$$\text{BM rata-rata}$$

$$= (0,8918 \times 130) + (0,0883 \times 270) + (0,0088 \times 171) + (0,0044 \times 214) \\ + (0,0066 \times 157) = 143,2576$$

Menentukan konversi trigliserida:

Menentukan mol metil ester yang terbentuk dengan persamaan:

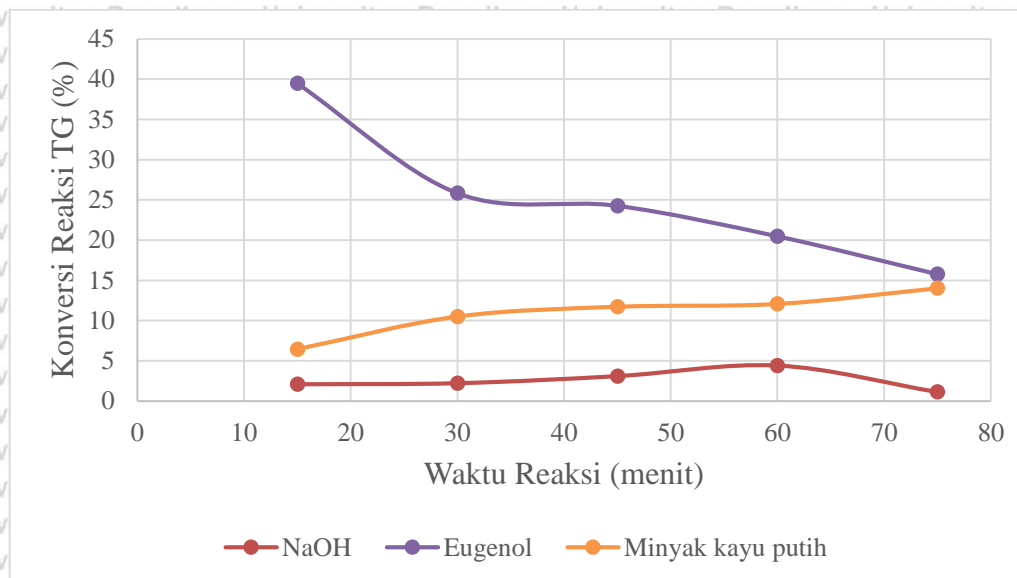
$$\text{Mol metil ester} = \frac{\text{Massa metil ester}}{\text{BM rata-rata}} = \frac{12,9811}{143,2576} = 0,0906 \text{ mol}$$

Mol triasetin yang terbentuk = $1/3 \times$ mol metil ester yang terbentuk (sesuai stoikiometri reaksi) = $1/3 \times 0,0906 \text{ mol} = 0,0302 \text{ mol}$

$$\text{Mol trigliserida mula-mula} = \frac{\text{Massa trigliserida}}{\text{BM trigliserida}} = \frac{250}{817} = 0,306 \text{ mol}$$

Mol trigliserida yang bereaksi = mol produk yang terbentuk = mol metil ester + mol triasetin = $0,0906 + 0,0302 = 0,1208 \text{ mol}$

$$\text{Konversi reaksi trigliserida} = \frac{\text{TG yang bereaksi}}{\text{TG mula-mula}} = \frac{0,1208}{0,306} \times 100\% = 39,4771\%$$



Gambar 5.17 Hubungan waktu reaksi (menit) terhadap konversi reaksi trigliserida (%) dengan variasi jenis katalis

Pada Gambar 5.17 terlihat bahwa kondisi optimum tercapai pada waktu reaksi 15 menit dengan penggunaan bio-katalis eugenol yaitu mendapatkan konversi reaksi trigliserida tertinggi 39,4771%. Pada penggunaan bio-katalis minyak kayu putih menunjukkan jika waktu reaksi diperlama maka konversi reaksi trigliserida didapatkan semakin tinggi. Pada penggunaan bio-katalis minyak kayu putih belum tercapai waktu reaksi optimum dan konversi reaksi trigliserida tertinggi 14,0196% didapatkan pada waktu reaksi 75 menit. Pada penggunaan katalis NaOH kondisi optimum tercapai pada waktu reaksi 60 menit yaitu mendapatkan konversi reaksi trigliserida tertinggi 4,4009%. Tercapainya waktu reaksi optimum pada penggunaan katalis NaOH dan eugenol disebabkan karena reaksi interesterifikasi sudah mencapai kesetimbangan, sehingga jika waktu reaksi ditambah justru akan menggeser kesetimbangan reaksi ke kiri atau ke arah reaktan karena reaksi interesterifikasi bersifat *reversible* atau reaksi bolak-balik (Eevera *et al.*, 2008; Chuepeng dan Komintarachat, 2018; Ali *et al.*, 2020). Semakin lama waktu reaksi akan memicu terjadinya reaksi hidrolisis ester dengan air membentuk asam lemak bebas dan juga reaksi saponifikasi NaOH dengan asam lemak bebas membentuk sabun (Eevera *et al.*, 2008).

Reaksi interesterifikasi yang bersifat *reversible* menjadi pembatas konversi raksi maksimal apabila kesetimbangan reaksi tercapai. Penggunaan katalis hanya akan mempercepat terjadinya kesetimbangan reaksi tetapi tidak dapat menggeser posisi kesetimbangan reaksi. Berdasarkan perhitungan $\Delta H^{\circ}_{\text{reaksi}}$ menunjukkan bahwa reaksi

interesterifikasi trigliserida dengan metil asetat adalah reaksi endotermis yaitu reaksi yang membutuhkan panas. Pada reaksi endotermis, kenaikan temperature akan menggeser kesetimbangan reaksi kearah produk, seperti dilakukan pada penelitian ini suhu reaksi adalah 60°C.

Konversi reaksi trigliserida yang dicapai pada proses interesterifikasi dengan bio-katalis minyak kayu putih/sineol relative kecil. Kondisi ini karena bio-katalis minyak kayu putih yang digunakan mengandung senyawa 1,8-cineole kecil yaitu sekitar 29%. Dengan kecilnya kandungan 1,8-cineole yang merupakan sumber medan magnet untuk mengaktifkan molekul-molekul yang bereaksi, maka semakin kecil juga interaksi antar molekul yang bereaksi untuk menghasilkan produk.

Kecilnya metil ester yang terbentuk juga karena adanya reaksi degradasi metil ester rantai panjang menjadi metil ester rantai pendek dan senyawa aldehida. Senyawa aldehida terbentuk dari pemecahan *unsaturated methyl esters* yaitu metil oleat dan metil linoleat (Baber *et al.*, 2005). Hal ini terjadi karena banyaknya komponen pada minyak kayu putih yang mempunyai gugus aromatic yaitu alpha-pinene, 2-betha-pinene, beta-myrcene, beta-ocimene, gamma-terpinene, alpha-terpinene, camphor, 4-terpineol, alpha-terpineol, phenol, alpha-terpinyl acetate, trans-caryophyllene, alpha-humulene dan alpha-selina, dan lain-lain sehingga menimbulkan medan magnet. Medan magnet inilah yang memicu terjadinya reaksi pemecahan dari metil ester yang terbentuk.

BAB VI

KESIMPULAN DAN SARAN

6.1 Kesimpulan

Berdasarkan pengamatan, analisis, penghitungan dan simulasi pemakaian katalis NaOH dan bio-katalis senyawa aromatic (eugenol dan minyak kayu putih/sineol) pada proses interesterifikasi minyak kelapa sawit didapatkan kesimpulan sebagai berikut:

1. Bio-katalis eugenol paling efektif digunakan sebagai katalis pada proses interesterifikasi minyak kelapa sawit dibandingkan katalis NaOH dan bio-katalis minyak kayu putih. Hal ini diketahui dari yield dan konsentrasi FAME yang dihasilkan paling tinggi dibandingkan dua katalis lainnya.
2. Yield tertinggi yaitu 83,16% dan konsentrasi FAME tertinggi yaitu 55.695,4 ppm dihasilkan dari reaksi menggunakan bio-katalis eugenol dengan waktu reaksi 15 menit dibandingkan dengan katalis NaOH dan bio-katalis minyak kayu putih.
3. Dari simulasi dengan software ChemDraw diketahui bahwa pemakaian bio-katalis eugenol menyebabkan pergerakan molekul trigliserida dan metil asetat paling reaktif. Hal ini diketahui dari panjang ikatan C-C rata-rata yaitu 1,664 Å dan energy kinetic yaitu 3.448,1504 kJ/mol yang dihasilkan lebih besar dari katalis NaOH dan bio-katalis sineol (minyak kayu putih).

6.2 Saran-saran

Supaya riset berikutnya mendapatkan hasil yang lebih baik, disarankan

1. Menambahkan variabel-variabel penelitian lain yang lebih komprehensif sehingga akan didapatkan kondisi optimum yang lebih lengkap.
2. Analisa SNI 7182-2015 dilakukan secara menyeluruh sehingga akan dihasilkan biodiesel yang siap diaplikasikan.
3. Produk reaksi adalah campuran metil ester, triasetin dan bio-katalis yang nilai densitasnya tidak memenuhi SNI 7182:2015. Perlu dilakukan analisa walaupun nilai densitas tidak memenuhi tetapi parameter yang lain memenuhi.
4. Pada reaksi interesterifikasi *excess* metil asetat yang digunakan 100%. Perlu ditambahkan variable % *excess* yang lain untuk melihat pengaruhnya terhadap proses.

5. Menggunakan bio-katalis minyak kayu putih dengan kadar 1,8 cineole yang tinggi, sehingga impurities tidak memengaruhi proses interesterifikasi.



DAFTAR PUSTAKA

- Agarwal, A. K. (2007). Biofuels (alcohols and biodiesel) applications as fuels for internal combustion engines. *Progress in Energy and Combustion Science*, 33(3), 233–271. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2006.08.003>
- Ali, E. N., & Tay, C. I. (2013). Characterization of biodiesel produced from palm oil via base catalyzed transesterification. *Procedia Engineering*, 53, 7–12. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2013.02.002>
- Ali, R. M., Elkatory, M. R., & Hamad, H. A. (2020). Highly active and stable magnetically recyclable CuFe₂O₄ as a heterogenous catalyst for efficient conversion of waste frying oil to biodiesel. *Fuel*, 268(January), 117297. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.117297>
- Baber, T. M., Graiver, D., Lira, C. T., & Narayan, R. (2005). Application of catalytic ozone chemistry for improving biodiesel product performance. *Biomacromolecules*, 6(3), 1334–1344. <https://doi.org/10.1021/bm049397f>
- Badan Standarisasi Nasional. (2015). Standar Nasional Indonesia 7182:2015 Biodiesel. In *Badan Standarisasi Nasional* (Issue 1).
- Calero, J., Luna, D., Sancho, E. D., Luna, C., Bautista, F. M., Romero, A. A., Posadillo, A., Berbel, J., & Verdugo-Escamilla, C. (2015). An overview on glycerol-free processes for the production of renewable liquid biofuels, applicable in diesel engines. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 42, 1437–1452. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2014.11.007>
- Casas, A., Ramos, M. J., & Pérez, Á. (2011). New trends in biodiesel production: Chemical interesterification of sunflower oil with methyl acetate. *Biomass and Bioenergy*, 35(5), 1702–1709. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2011.01.003>
- Casas, A., Ruiz, J. R., Ramos, M. J., & Pérez, Á. (2010). Effects of triacetin on biodiesel quality. *Energy and Fuels*, 24(8), 4481–4489. <https://doi.org/10.1021/ef100406b>
- Chaieb, K., Zmantar, T., Ksouri, R., Hajlaoui, H., Mahdouani, K., Abdelly, C., & Bakhrouf, A. (2007). Antioxidant properties of the essential oil of *Eugenia caryophyllata* and its antifungal activity against a large number of clinical *Candida* species. *Mycoses*, 50(5), 403–406. <https://doi.org/10.1111/j.1439-0507.2007.01391.x>
- Chuepeng, S., & Komintarachat, C. (2018). Interesterification optimization of waste cooking oil and ethyl acetate over homogeneous catalyst for biofuel production with engine validation. *Applied Energy*, 232(July), 728–739. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2018.09.085>

Daryono, E. D. (2015). Reactive extraction process in isolation of eugenol of clove essential oil (*Syzygium aromaticum*) based on temperature and time process. *International Journal of ChemTech Research*, 8(11), 564–569.

Directorate General of Plantation. (2015). Statistik Perkebunan Indonesia 2014-2016: Kelapa sawit. *Tree Crop Estate Statistics of Indonesia, December 2015*, 79. http://ditjenbun.pertanian.go.id/tinymcpuk/gambar/file/statistik/2016/SAWIT_2014-2016.pdf

dos Santos Ribeiro, J., Celante, D., Simões, S. S., Bassaco, M. M., da Silva, C., & de Castilhos, F. (2017). Efficiency of heterogeneous catalysts in interesterification reaction from macaw oil (*Acrocomia aculeata*) and methyl acetate. *Fuel*, 200, 499–505. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.04.003>

Du, W., Xu, Y., Liu, D., & Zeng, J. (2004). Comparative study on lipase-catalyzed transformation of soybean oil for biodiesel production with different acyl acceptors. *Journal of Molecular Catalysis B: Enzymatic*, 30(3–4), 125–129. <https://doi.org/10.1016/j.molcatb.2004.04.004>

Evera, T., Rajendran, K., & Saradha, S. (2009). Biodiesel production process optimization and characterization to assess the suitability of the product for varied environmental conditions. *Renewable Energy*, 34(3), 762–765. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2008.04.006>

Frankel, E. N., Neff, W. E., Selke, E., & Brooks, D. D. (1987). Thermal and metal-catalyzed decomposition of methyl linolenate hydroperoxides. *Lipids*, 22(5), 322–327. <https://doi.org/10.1007/BF02534000>

Galia, A., Centineo, A., Saracco, G., Schiavo, B., & Scialdone, O. (2014). Interesterification of rapeseed oil catalyzed by tin octoate. *Biomass and Bioenergy*, 67(0), 193–200. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2014.04.025>

Gerpen, J. Van, Shanks, B., Pruszko, R., Clements, D., & Knothe, G. (2004). Biodiesel Production Technology. In *National Renewable Energy Laboratory*. <https://doi.org/10.3934/energy.2017.3.425>

Goembira, F., Matsuura, K., & Saka, S. (2012). Biodiesel production from rapeseed oil by various supercritical carboxylate esters. *Fuel*, 97, 373–378. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2012.02.051>

Goembira, F., & Saka, S. (2013). Optimization of biodiesel production by supercritical methyl acetate. *Bioresource Technology*, 131, 47–52.

<https://doi.org/10.1016/j.biortech.2012.12.130>

Goembira, F., & Saka, S. (2014). Effect of additives to supercritical methyl acetate on biodiesel production. *Fuel Processing Technology*, 125, 114–118.

<https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2014.03.035>

Interrante, L., Bensaid, S., Galletti, C., Pirone, R., Schiavo, B., Scialdone, O., & Galia, A. (2018). Interesterification of rapeseed oil catalysed by a low surface area tin (II) oxide heterogeneous catalyst. *Fuel Processing Technology*, 177(May), 336–344.

<https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2018.05.017>

Jansri, S. (2015). Preparation of Vegetable Oil as Biodiesel Feedstock Via Re-Esterification: A Suitable Catalyst. In *Energy Procedia* (Vol. 79). Elsevier B.V.

<https://doi.org/10.1016/j.egypro.2015.11.451>

Jia, C., Cao, D., Ji, S., Zhang, X., & Muhoza, B. (2020). Tannic acid-assisted cross-linked nanoparticles as a delivery system of eugenol: The characterization, thermal degradation and antioxidant properties. *Food Hydrocolloids*, 104.

<https://doi.org/10.1016/j.foodhyd.2020.105717>

Kadarohman, A. (2015). Eksplorasi Minyak Atsiri Sebagai Bioaditif Bahan Bakar Solar. *Jurnal Pengajaran Matematika Dan Ilmu Pengetahuan Alam*, 14(2), 121.

<https://doi.org/10.18269/jpmipa.v14i2.366>

Kadarohman, A., Hernani, Khoerunisa, F., & Astuti, R. M. (2010). A potential study on clove oil, eugenol and eugenyl acetate as diesel fuel bio-additives and their performance on one cylinder engine. *Transport*, 25(1), 66–76. <https://doi.org/10.3846/transport.2010.09>

Kadarohman, A., Hernani, Rohman, I., Kusri, R., & Astuti, R. M. (2012). Combustion characteristics of diesel fuel on one cylinder diesel engine using clove oil, eugenol, and eugenyl acetate as fuel bio-additives. *Fuel*, 98, 73–79.

<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2012.03.037>

Knothe, G., & Gerpen, Jon Van, J. K. (2005). The Biodiesel Handbook. In *The Biodiesel Handbook*. <https://doi.org/10.1201/9781003040262>

Knothe, G., & Steidley, K. R. (2007). Kinematic viscosity of biodiesel components (fatty acid alkyl esters) and related compounds at low temperatures. *Fuel*, 86(16), 2560–2567.

<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2007.02.006>

Kumar, A., & Sharma, S. (2008). An evaluation of multipurpose oil seed crop for industrial uses (*Jatropha curcas* L.): A review. *Industrial Crops and Products*, 28(1), 1–10.

<https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2008.01.001>

Kusumaningtyas, R. D., Pristiyani, R., & Dewajani, H. (2016). A new route of biodiesel production through chemical interesterification of jatropha oil using ethyl acetate. *International Journal of ChemTech Research*, 9(6), 627–634.

Leung, D. Y. C., Wu, X., & Leung, M. K. H. (2010). A review on biodiesel production using catalyzed transesterification. *Applied Energy*, 87(4), 1083–1095. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2009.10.006>

Maddikeri, G. L., Gogate, P. R., & Pandit, A. B. (2014). Intensified synthesis of biodiesel using hydrodynamic cavitation reactors based on the interesterification of waste cooking oil. *Fuel*, 137, 285–292. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2014.08.013>

Maddikeri, G. L., Pandit, A. B., & Gogate, P. R. (2013). Ultrasound assisted interesterification of waste cooking oil and methyl acetate for biodiesel and triacetin production. *Fuel Processing Technology*, 116, 241–249. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2013.07.004>

Mancini, A., Imperlini, E., Nigro, E., Montagnese, C., Daniele, A., Orrù, S., & Buono, P. (2015). Biological and nutritional properties of palm oil and palmitic acid: Effects on health. *Molecules*, 20(9), 17339–17361. <https://doi.org/10.3390/molecules200917339>

Marlina, E., Basjir, M., Ichyanagi, M., Suzuki, T., Gotama, G. J., & Anggono, W. (2020). The Role of Eucalyptus Oil in Crude Palm Oil As Biodiesel Fuel. *Automotive Experiences*, 3(1), 33–38. <https://doi.org/10.31603/ae.v3i1.3257>

Marlina, E., Wijayanti, W., Yulianti, L., & Wardana, I. N. G. (2020). The role of pole and molecular geometry of fatty acids in vegetable oils droplet on ignition and boiling characteristics. *Renewable Energy*, 145, 596–603. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2019.06.064>

Mcdonald, G., & Rahmanulloh, A. (2018). *THIS REPORT CONTAINS ASSESSMENTS OF COMMODITY AND TRADE ISSUES MADE BY USDA STAFF AND NOT NECESSARILY STATEMENTS OF OFFICIAL U.S. GOVERNMENT POLICY* Voluntary-Public Indonesia Expands Biodiesel Mandate Report Categories: Biofuels Approved By. [https://gain.fas.usda.gov/Recent GAIN Publications/Indonesia Expands Biodiesel Mandate_Jakarta_Indonesia_9-18-2018.pdf](https://gain.fas.usda.gov/Recent%20GAIN%20Publications/Indonesia%20Expands%20Biodiesel%20Mandate_Jakarta_Indonesia_9-18-2018.pdf)

Melero, J. A., Vicente, G., Morales, G., Paniagua, M., & Bustamante, J. (2010). Oxygenated compounds derived from glycerol for biodiesel formulation: Influence on en 14214 quality parameters. *Fuel*, 89(8), 2011–2018. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2010.03.042>

Ministry of Energy and Mineral Resources. (2017). *Presidential Regulation Number 22 of*

2017 on the General Planning for National Energy (RUEN).

- Muyassaroh. (2016). Distilasi Daun Kayu Putih Dengan Variasi Tekanan Operasi Dan Kekeringan Bahan Untuk Mengoptimalkan Kadar Sineol Dalam Minyak Kayu Putih. *Jurnal Teknik Kimia*, 10(2), 36–41.
- Nguyen, H. C., Liang, S. H., Chen, S. S., Su, C. H., Lin, J. H., & Chien, C. C. (2018). Enzymatic production of biodiesel from insect fat using methyl acetate as an acyl acceptor: Optimization by using response surface methodology. *Energy Conversion and Management*, 158(December 2017), 168–175. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2017.12.068>
- Nunes, A. L. B., & Castilhos, F. (2020). Chemical interesterification of soybean oil and methyl acetate to FAME using CaO as catalyst. *Fuel*, 267(October 2019), 117264. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.117264>
- Ogata, M., Hoshi, M., Urano, S., & Endo, T. (2000). Antioxidant activity of eugenol and related monomeric and dimeric compounds. *Chemical and Pharmaceutical Bulletin*, 48(10), 1467–1469. <https://doi.org/10.1248/cpb.48.1467>
- Om Tapanes, N. C., Gomes Aranda, D. A., de Mesquita Carneiro, J. W., & Ceva Antunes, O. A. (2008). Transesterification of Jatropha curcas oil glycerides: Theoretical and experimental studies of biodiesel reaction. *Fuel*, 87(10–11), 2286–2295. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2007.12.006>
- Ott, L. S., Huber, M. L., & Bruno, T. J. (2008). Density and speed of sound measurements on five fatty acid methyl esters at 83 kPa and temperatures from (278.15 to 338.15) K. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 53(10), 2412–2416. <https://doi.org/10.1021/je8003854>
- Pullen, J., & Saeed, K. (2015). Investigation of the factors affecting the progress of base-catalyzed transesterification of rapeseed oil to biodiesel FAME. *Fuel Processing Technology*, 130(C), 127–135. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2014.09.013>
- Purnami, Hamidi, N., Sasongko, M. N., Widhiyanuriyawan, D., & Wardana, I. N. G. (2020). Strengthening external magnetic fields with activated carbon graphene for increasing hydrogen production in water electrolysis. *International Journal of Hydrogen Energy*, xxxx. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.05.148>
- Purnami, Wardana, I. N. G., Hamidi, N., Sasongko, M. N., & Darmadi, D. B. (2019). The effect of rhodium (III) sulfate and clove oil catalysts on the droplet combustion characteristics of castor oil. *International Journal of Integrated Engineering*, 11(5), 66–

71. <https://doi.org/10.30880/ijie.2019.11.05.009>
- Ramos, M. J., Fernández, C. M., Casas, A., Rodríguez, L., & Pérez, Á. (2009). Influence of fatty acid composition of raw materials on biodiesel properties. *Bioresource Technology*, *100*(1), 261–268. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2008.06.039>
- Riadi, L., Purwanto, E., & Chandra, Y. (2012). Ash Base-Catalysed in Promoting Ozonolysis of Used Cooking Oil. *International Journal of Engineering & Technology*, *12*(06), 87–90.
- Riadi, L., Sapei, L., Kristiani, Y., & Sugianto, O. (2014). Pemanfaatan Abu Sekam Padi pada Ozonisasi Minyak Goreng Bekas untuk Menghasilkan Biodiesel. *Jurnal Rekayasa Proses*, *8*(1), 25–32. <https://doi.org/10.22146/jrekpros.5020>
- Sajjadi, B., Abdul Aziz, A. R., & Ibrahim, S. (2014). Investigation, modelling and reviewing the effective parameters in microwave-assisted transesterification. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, *37*, 762–777. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2014.05.021>
- Saka, S., & Isayama, Y. (2009). A new process for catalyst-free production of biodiesel using supercritical methyl acetate. *Fuel*, *88*(7), 1307–1313. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2008.12.028>
- Setyaningsih, D., Faiziin, M. N., & Muna, N. (2018). Pemanfaatan minyak atsiri sebagai bioaditif penghemat bahan bakar biosolar. *Indonesian Journal of Essential Oil*, *3*(1), 45–54.
- Sharif, Z. M., Kamal, A. F., & Jalil, N. J. (2019). Chemical composition of melaleuca cajuputi powell. *International Journal of Engineering and Advanced Technology*, *9*(1), 3479–3483. <https://doi.org/10.35940/ijeat.A2668.109119>
- Silveira Junior, E. G., Justo, O. R., Perez, V. H., Reyero, I., Serrano-Lotina, A., Campos Ramirez, L., & Dos Santos Dias, D. F. (2018). Extruded Catalysts with Magnetic Properties for Biodiesel Production. *Advances in Materials Science and Engineering*, *2018*, 1–11. <https://doi.org/10.1155/2018/3980967>
- Simatupang, R. A., Ramli, & Mahrizal. (2016). Optimasi kecepatan putar pengadukan dan waktu pengadukan terhadap kualitas fisika biodiesel dari minyak kelapa. *Pillar of Physics*, *7*(April), 89–96.
- Simões, S. S., Ribeiro, J. S., Celante, D., Brondani, E. N., & Castilhos, F. (2020). Heterogeneous catalyst screening for fatty acid methyl esters production through interesterification reaction. *Renewable Energy*, *146*, 719–726. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2019.07.023>
- Soebiyakto, G., Wardana, I. N. G., Hamidi, N., & Yuliati, L. (2020). Addition of bio-additive

as a catalyst of burning vegetable oil influenced by 4 pole magnetic field. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*, 2/6((104)), 46–55.

<https://doi.org/10.15587/1729-4061.2020.198308>

Sofi'i, Y. K., Siswanto, E., Winarto, Ueda, T., & Wardana, I. N. G. (2020). The role of activated carbon in boosting the activity of clitoria ternatea powder photocatalyst for hydrogen production. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45(43), 22613–22628.

<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.05.103>

Sugiyono, A., Anindhita, Wahid, L., & Adiarso. (2016). Outlook Energi Indonesia 2016. In *Kimia, Pusat Teknologi Sumber Daya Energi dan Industri Teknologi, Badan Pengkajian dan Penerapan*.

Suprianto, T., Winarto, Wijayanti, W., & Wardana, I. N. G. (2021). Synergistic effect of curcumin and activated carbon catalyst enhancing hydrogen production from biomass pyrolysis. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(10), 7147–7164.

<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.11.211>

Sustere, Z., Murnieks, R., & Kampars, V. (2016). Chemical interesterification of rapeseed oil with methyl, ethyl, propyl and isopropyl acetates and fuel properties of obtained mixtures. *Fuel Processing Technology*, 149, 320–325.

<https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2016.04.033>

Tan, K. T., Lee, K. T., & Mohamed, A. R. (2010). A glycerol-free process to produce biodiesel by supercritical methyl acetate technology: An optimization study via Response Surface Methodology. *Bioresource Technology*, 101(3), 965–969.

<https://doi.org/10.1016/j.biortech.2009.09.004>

Tan, K. T., Lee, K. T., & Mohamed, A. R. (2011). Prospects of non-catalytic supercritical methyl acetate process in biodiesel production. *Fuel Processing Technology*, 92(10), 1905–1909. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2011.05.009>

Tavares, G. R., Gonçalves, J. E., dos Santos, W. D., & da Silva, C. (2017). Enzymatic interesterification of crambe oil assisted by ultrasound. *Industrial Crops and Products*, 97, 218–223. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2016.12.022>

Tian, Y., Xiang, J., Verni, C. C., & Soh, L. (2018). Fatty acid methyl ester production via ferric sulfate catalyzed interesterification. *Biomass and Bioenergy*, 115(November 2017), 82–87. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2018.04.013>

Towaha, J. (2012). Manfaat Eugenol Cengkeh dalam Berbagai Industri di Indonesia. *Perspektif*, 11(2), 79–90. <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-800097-7.00008-7>

- Usai, E. M., Gualdi, E., Solinas, V., & Battistel, E. (2010). Simultaneous enzymatic synthesis of FAME and triacetyl glycerol from triglycerides and methyl acetate. *Bioresource Technology*, *101*(20), 7707–7712. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2010.05.044>
- Waluyo, B., Setiyo, M., Saifudin, & Wardana, I. N. G. (2020). The role of ethanol as a cosolvent for isooctane-methanol blend. *Fuel*, *262*(October), 116465. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116465>
- Willy Satrio, N., Winarto, Sugiono, & Wardana, I. N. G. (2020). Hydrogen production from instant noodle wastewater by organic electrocatalyst coated on PVC surface. *International Journal of Hydrogen Energy*, *45*(23), 12859–12873. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.03.002>
- Wright, T., & Rahmanulloh, A. (2017). *Indonesia Biofuels Annual Report 2017 Biofuels Annual Indonesia ID1714*. [https://gain.fas.usda.gov/Recent GAIN Publications/Biofuels Annual_Jakarta_Indonesia_6-20-2017.pdf](https://gain.fas.usda.gov/Recent%20GAIN%20Publications/Biofuels%20Annual%20Jakarta%20Indonesia_6-20-2017.pdf)
- Xie, W., & Wang, H. (2020). Immobilized polymeric sulfonated ionic liquid on core-shell structured Fe₃O₄/SiO₂ composites: A magnetically recyclable catalyst for simultaneous transesterification and esterifications of low-cost oils to biodiesel. *Renewable Energy*, *145*, 1709–1719. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2019.07.092>

Lampiran 1: Menghitung % FFA pada minyak kelapa sawit

Standarisasi larutan KOH 0,1 N dengan H₂C₂O₄.2H₂O 0,1 N

mL liter H₂C₂O₄.2H₂O = 5 mL

Massa minyak kelapa sawit = 5 gram

BM asam lemak = 256,428

$$V_{KOH} \text{ rata - rata} = \frac{V_1 + V_2}{2} = \frac{6 + 6}{2} = 6 \text{ mL}$$

Menghitung normalitas KOH hasil standarisasi dengan asam oksalat

$$V_1 \times N_1 = V_2 \times N_2$$

$$5 \times 0,1 = 6 \times N_2$$

$$N_2 = 0,083 \text{ N}$$

Menghitung % FFA minyak kelapa sawit

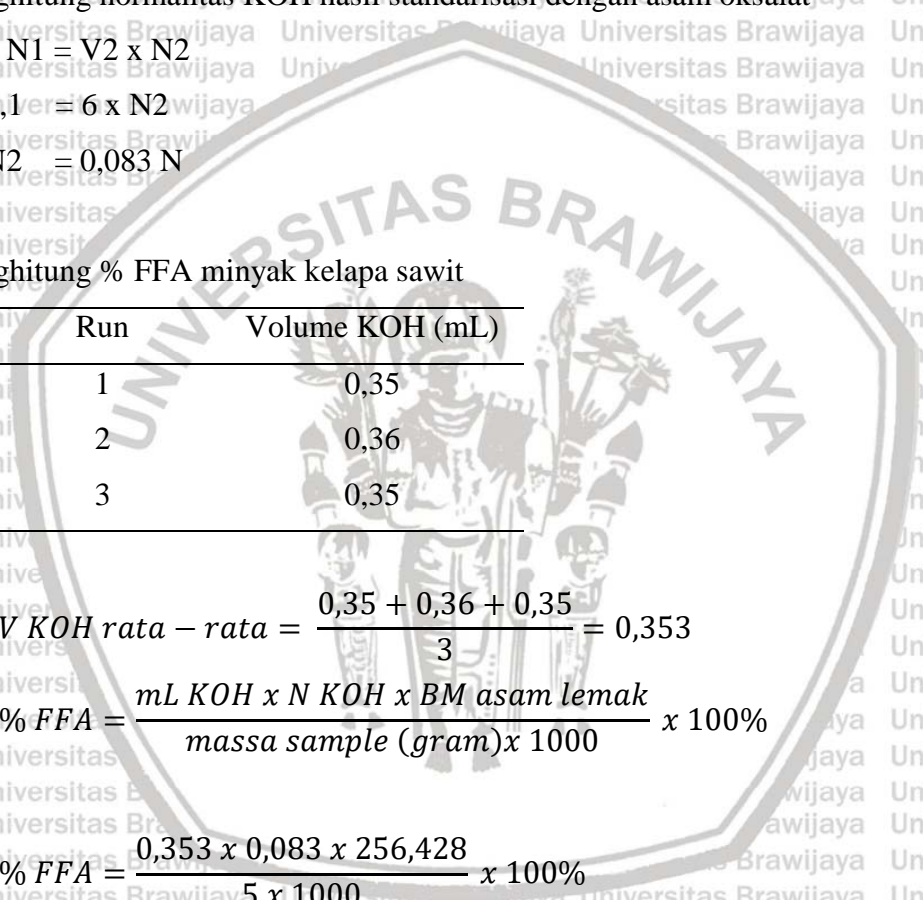
Run	Volume KOH (mL)
1	0,35
2	0,36
3	0,35

$$V_{KOH} \text{ rata - rata} = \frac{0,35 + 0,36 + 0,35}{3} = 0,353$$

$$\% \text{ FFA} = \frac{\text{mL KOH} \times N_{KOH} \times \text{BM asam lemak}}{\text{massa sample (gram)} \times 1000} \times 100\%$$

$$\% \text{ FFA} = \frac{0,353 \times 0,083 \times 256,428}{5 \times 1000} \times 100\%$$

$$\% \text{ FFA} = 0,15\%$$



Lampiran 2: Menghitung kadar air minyak kelapa sawit

Massa minyak kelapa sawit = 10 gram

$$\text{Kadar air} = \frac{\text{massa minyak awal} - \text{massa minyak akhir}}{\text{massa minyak awal}} \times 100\%$$

$$\text{Kadar air} = \frac{10 \text{ gr} - 9,9985 \text{ gr}}{10 \text{ gr}} \times 100\%$$

$$\text{Kadar air} = 0,015\%$$



Lampiran 3: Menghitung kebutuhan reaktan dan katalis untuk reaksi interesterifikasi

1. Minyak kelapa sawit (trigliserida)

$$\text{BM trigliserida} = 817,315$$

$$\text{Massa minyak kelapa sawit} = 250 \text{ gram}$$

$$\text{mol} = \frac{\text{massa minyak kelapa sawit}}{\text{BM}} = \frac{250}{817,315} = 0,305 \text{ mol}$$

2. Metil asetat

$$\text{Rasio molar minyak kelapa sawit : metil asetat} = 1 : 6$$

$$\text{BM metil asetat} = 74,08$$

$$\text{Mol metil asetat} = 0,305 \times 6 = 1,83 \text{ mol}$$

$$\text{Massa metil asetat} = 1,83 \text{ mol} \times 74,08 = 135,957 \text{ gram}$$

3. Katalis/bio-katalis

Massa katalis adalah 0,25%; 0,5% dan 0,75% massa minyak kelapa sawit

$$\text{Massa katalis 0,25\% massa minyak kelapa sawit} = 0,0025 \times 250 = 0,625 \text{ gram}$$

$$\text{Massa katalis 0,5\% massa minyak kelapa sawit} = 0,005 \times 250 = 1,25 \text{ gram}$$

$$\text{Massa katalis 0,75\% massa minyak kelapa sawit} = 0,0075 \times 250 = 1,875 \text{ gram}$$

Lampiran 4: Menghitung crude yield pada reaksi interesterifikasi dengan massa katalis KOH 0,25% pada kecepatan pengadukan 200 rpm

Massa minyak kelapa sawit = 250 gram

$$Crude\ Yield\ (\%) = \frac{Massa\ Produk\ (gram)}{Massa\ Minyak\ Awal\ (gram)} \times 100\%$$

$$Crude\ Yield\ (\%) = \frac{124,375}{250} \times 100\% = 49,75\%$$

Tabel lampiran 4. *Crude yield* pada proses interesterifikasi dengan katalis KOH

Massa KOH (% massa minyak)	Kecepatan pengadukan (rpm)	Massa produk (gram)	<i>Crude yield</i> (%)
0,25	200	124,375	49,75
	300	131,325	52,53
	400	128,875	51,55
	500	127,525	51,01
	600	93,925	37,57
0,5	200	125,45	50,18
	300	132,925	53,17
	400	132,1	52,84
	500	131,5	52,6
	600	94,325	37,73
0,75	200	127,75	51,1
	300	143,25	57,3
	400	137,175	54,87
	500	133,1	53,24
	600	104,95	41,98

Lampiran 5: Menghitung *crude yield* pada reaksi interesterifikasi dengan bio-katalis eugenol 0,75% massa minyak pada waktu reaksi 15 menit

Massa minyak kelapa sawit = 250 gram

$$\text{Crude Yield (\%)} = \frac{\text{Massa Produk (gram)}}{\text{Massa Minyak Awal (gram)}} \times 100\%$$

$$\text{Crude Yield (\%)} = \frac{124,375}{250} \times 100\% = 49,75\%$$

Tabel lampiran 5. *Crude yield* pada proses interesterifikasi dengan katalis NaOH dan bio-katalis senyawa aromatic (eugenol dan minyak kayu putih)

Jenis katalis	Waktu reaksi (menit)	Massa produk (gram)	<i>Crude yield</i> (%)
NaOH	15	120,425	48,17
	30	122,775	49,11
	45	125,55	50,22
	60	137,275	54,91
	75	94,275	37,71
Eugenol	15	207,9	83,16
	30	195,75	78,3
	45	187,65	75,06
	60	178,2	71,28
	75	175,5	70,2
Minyak kayu putih	15	151,2	60,48
	30	152,55	61,02
	45	156,6	62,64
	60	159,3	63,72
	75	164,7	65,88

Lampiran 6: Menghitung densitas sample pada interesterifikasi minyak kelapa sawit dengan bio-katalis minyak kayu putih pada waktu 15 menit

Massa FAME (gram) = massa piknometer isi – massa piknometer kosong

Volume piknometer = 5 mL

$$\text{Densitas} = \frac{\text{massa piknometer isi} - \text{massa piknometer kosong}}{\text{volume piknometer}}$$

$$\text{Densitas} = \frac{16,94 - 12,25}{5} = 0,938 \text{ gr/mL}$$

Tabel lampiran 6. Densitas sample

Jenis Katalis	Waktu Reaksi (menit)	Massa piknometer isi (gr)	Massa piknometer kosong (gr)	Densitas (gr/mL)
NaOH	15	16,625	12,25	0,875
	30	16,69	12,30	0,878
	45	16,73	12,33	0,880
	60	16,63	12,38	0,850
	75	16,835	12,40	0,887
	15	16,92	12,46	0,892
Eugenol	30	16,92	12,44	0,896
	45	16,91	12,43	0,896
	60	16,92	12,42	0,9
	75	16,94	12,42	0,904
	15	16,94	12,25	0,938
	30	16,93	12,37	0,912
Minyak kayu putih	45	16,94	12,39	0,91
	60	16,91	12,41	0,91
	75	16,94	12,40	0,908

Lampiran 7: Menghitung angka asam sample pada interesterifikasi minyak kelapa sawit dengan bio-katalis minyak kayu putih pada waktu 15 menit

Volume titrasi KOH 0,1N = 0,34 mL

Massa sample = 5 gram

$$\text{Angka asam} = \frac{56,1 \times V_{KOH} \times N_{KOH}}{\text{massa sample}}$$

$$\text{Angka asam} = \frac{56,1 \times 0,34 \times 0,1}{5}$$

$$\text{Angka asam} = 0,381 \text{ mg KOH/gr sample}$$

Tabel lampiran 7. Angka asam sample

Jenis Katalis	Waktu Reaksi (menit)	Volume titrasi KOH 0,1 N (mL)	Angka asam (mg KOH/gr sample)
NaOH	15	0,4	0,449
	30	0,4	0,449
	45	0,35	0,393
	60	0,4	0,449
	75	0,5	0,561
	15	0,3	0,337
	30	0,31	0,348
Eugenol	45	0,32	0,359
	60	0,32	0,359
	75	0,33	0,37
	15	0,34	0,381
	30	0,35	0,393
Minyak kayu putih	45	0,36	0,404
	60	0,37	0,415
	75	0,38	0,426

Lampiran 8: Menghitung konsentrasi FAME dari mg/L atau ppm menjadi % massa pada reaksi interesterifikasi dengan bio-katalis eugenol pada waktu reaksi 15 menit

Konsentrasi FAME = 55.695,4 mg/L

Densitas FAME = 0,892 gr/mL

$$\text{Konsentrasi FAME (\%)} = \frac{\text{Konsentrasi FAME (mg/L)}}{\text{Densitas FAME (gr/mL)}} \times 100\%$$

$$\text{Konsentrasi FAME (\%)} = \frac{55.695,4 \text{ (mg/L)}}{0,892 \text{ (gr/mL)}} \times 100\%$$

$$\text{Konsentrasi FAME (\%)} = \frac{55,6954 \text{ (gr/L)}}{892 \text{ (gr/L)}} \times 100\% = 6,2439\%$$

Tabel lampiran 8. Konsentrasi FAME dalam % massa

Jenis katalis	Waktu reaksi (menit)	Konsentrasi FAME (mg/L)	Densitas FAME (gr/mL)	Konsentrasi FAME (%)
NaOH	15	504,515	0,875	0,5766
	30	524,755	0,878	0,5977
	45	710,962	0,880	0,8079
	60	894,631	0,850	1,0525
	75	349,199	0,887	0,3937
	15	55.695,4	0,892	6,2439
Eugenol	30	38.897,5	0,896	4,3412
	45	38.092,1	0,896	4,2514
	60	34.002,5	0,9	3,7781
	75	26.687,6	0,904	2,9522
	15	13.189,3	0,938	1,4061
	30	20.621,3	0,912	2,2611
Minyak kayu putih	45	22.356,5	0,91	2,4568
	60	22.657,9	0,91	2,4899
	75	25.449,7	0,908	2,8028



Lampiran 9: Menghitung konversi reaksi trigliserida pada reaksi interesterifikasi dengan bio-katalis eugenol pada waktu reaksi 15 menit

Pada eugenol dengan waktu reaksi 15 menit didapatkan konsentrasi FAME = 6,2439%, sehingga jika dihubungkan dengan *crude yield* = $\frac{207,9}{250} = 83,16\%$ maka massa metil ester dalam produk = $0,062423 \times 207,9 = 12,9811$ gram.

Menentukan massa masing-masing metil ester:

$$\text{Massa metil heksanoat} = \text{massa FAME} \times \text{fraksi massa metil heksanoat} = 0,8087 \times 12,9811 = 10,4978 \text{ gram}$$

$$\text{Massa metil palmitat} = \text{massa FAME} \times \text{fraksi massa metil palmitat} = 0,1659 \times 12,9811 = 2,1536 \text{ gram}$$

$$\text{Massa metil nonanoat} = \text{massa FAME} \times \text{fraksi massa metil nonanoat} = 0,0109 \times 12,9811 = 0,1415 \text{ gram}$$

$$\text{Massa metil laurat} = \text{massa FAME} \times \text{fraksi massa metil laurat} = 0,0072 \times 12,9811 = 0,0935 \text{ gram}$$

$$\text{Massa metil oktanoat} = \text{massa FAME} \times \text{fraksi massa metil oktanoat} = 0,0072 \times 12,9811 = 0,0935 \text{ gram}$$

Menentukan mol masing-masing metil ester:

$$\text{Mol metil heksanoat} = \frac{\text{massa metil heksanoat}}{\text{BM metil heksanoat}} = \frac{10,4978}{130} = 0,0808 \text{ mol}$$

$$\text{Mol metil palmitat} = \frac{\text{massa metil palmitat}}{\text{BM metil palmitat}} = \frac{2,1536}{270} = 0,0080 \text{ mol}$$

$$\text{Mol metil nonanoat} = \frac{\text{massa metil nonanoat}}{\text{BM metil nonanoat}} = \frac{0,1415}{171} = 0,0008 \text{ mol}$$

$$\text{Mol metil laurat} = \frac{\text{massa metil laurat}}{\text{BM metil laurat}} = \frac{0,0935}{214} = 0,0004 \text{ mol}$$

$$\text{Mol metil oktanoat} = \frac{\text{massa metil oktanoat}}{\text{BM metil oktanoat}} = \frac{0,0935}{157} = 0,0006 \text{ mol}$$

Menentukan fraksi mol masing-masing metil ester:

$$\text{Fraksi mol metil heksanoat} = \frac{\text{mol metil heksanoat}}{\text{mol total}} = \frac{0,0808}{0,0906} = 0,8918$$

$$\text{Fraksi mol metil palmitat} = \frac{\text{mol metil palmitat}}{\text{mol total}} = \frac{0,0080}{0,0906} = 0,0883$$

$$\text{Fraksi mol metil nonanoat} = \frac{\text{mol metil nonanoat}}{\text{mol total}} = \frac{0,0008}{0,0906} = 0,0088$$

$$\text{Fraksi mol metil laurat} = \frac{\text{mol metil laurat}}{\text{mol total}} = \frac{0,0004}{0,0906} = 0,0044$$

$$\text{Fraksi mol metil oktanoat} = \frac{\text{mol metil oktanoat}}{\text{mol total}} = \frac{0,0006}{0,0906} = 0,0066$$

Menentukan BM rata-rata:

$$BM \text{ rata-rata} = \Sigma (n \cdot BM)$$

Dimana : n = fraksi mol

BM = Berat molekul masing-masing

BM rata-rata

$$= (0,8918 \times 130) + (0,0883 \times 270) + (0,0088 \times 171) + (0,0044 \times 214) + (0,0066 \times 157) = 143,2576$$

Menentukan konversi trigliserida:

Menentukan mol metil ester yang terbentuk dengan persamaan:

$$\text{Mol metil ester} = \frac{\text{Massa metil ester}}{BM \text{ rata-rata}} = \frac{12,9811}{143,2576} = 0,0906 \text{ mol}$$

Mol triasetin yang terbentuk = $\frac{1}{3}$ x mol metil ester yang terbentuk (sesuai stoikiometri reaksi) = $\frac{1}{3}$ x 0,0906 mol = 0,0302 mol

$$\text{Mol trigliserida mula-mula} = \frac{\text{Massa trigliserida}}{BM \text{ trigliserida}} = \frac{250}{817} = 0,306 \text{ mol}$$

Mol trigliserida yang bereaksi = mol produk yang terbentuk = mol metil ester + mol triasetin = 0,0906 + 0,0302 = 0,1208 mol

$$\text{Konversi reaksi trigliserida} = \frac{TG \text{ yang bereaksi}}{TG \text{ mula-mula}} = \frac{0,1208}{0,306} \times 100\% = 39,4771\%$$

Tabel lampiran 9. Konversi Reaksi Trigliserida

Jenis Katalis	Waktu Reaksi (menit)	Metil ester terbentuk (mol)	Triasetin terbentuk (mol)	Trigliserida yang bereaksi (mol)	Konversi Reaksi (%)
NaOH	15	0,0048	0,0016	0,0064	2,0915
	30	0,0051	0,0017	0,0068	2,2222
	45	0,0071	0,0024	0,0095	3,0937
	60	0,0101	0,0034	0,0134	4,4009
	75	0,0026	0,0009	0,0035	1,1329
Eugenol	15	0,0906	0,0302	0,1208	39,4771
	30	0,0593	0,0198	0,0791	25,8388
	45	0,0557	0,0186	0,0743	24,2702
	60	0,0470	0,0157	0,0627	20,4793
	75	0,0362	0,0121	0,0483	15,7734
Minyak kayu putih	15	0,0148	0,0049	0,0197	6,4488
	30	0,0241	0,0080	0,0321	10,5011
	45	0,0269	0,0090	0,0359	11,7211
	60	0,0277	0,0092	0,0369	12,0697
	75	0,0322	0,0107	0,0429	14,0196

Lampiran 10: Simulasi Perilaku Molekular dengan ChemDraw Professional 15.0

Menentukan Energi Potensial, Energi Kinetik dan Energi Total

- Membuat bentuk senyawa trigliserida, metil asetat dan eugenol/sineol di ChemDraw 2D
- Merubah tampilan gambar ChemDraw 2D ke ChemDraw 3D

3. Menentukan Energi Potensial

Energi potensial berada dalam system. Dalam system molekular, energy potensial adalah ikatan kimia dalam molekul dan juga kekuatan antara molekul.

Untuk menghitung energy potensial menggunakan **GAMESS**

- Masuk ke **Calculations > Compute Properties**
- Expand **GAMESS Interface** dan pilih **Potential Energy**

- Klik **RUN**

4. Menentukan Energi Kinetik

Persamaan untuk menghitung energy kinetik adalah:

$$K = p^2 / (2m)$$

Dimana K = energy kinetic, m = massa dan p adalah momentum yang berhubungan dengan massa produk dan kecepatan (v).

Untuk menghitung energy kinetik menggunakan **GAMESS**

- Masuk ke **Calculations > Compute Properties**
- Expand **GAMESS Interface** dan pilih **Kinetic Energy**

- Klik **RUN**

5. Menentukan Energi Total

Energi total = energi potensial + energi kinetik

Untuk menghitung energy total menggunakan **GAMESS**

- Masuk ke **Calculations > Compute Properties**
- Expand **GAMESS Interface** dan pilih **Total Energy**

- Klik **RUN**

Hasil perhitungan energi potensial, energi kinetik dan energi total untuk trigliserida + metil asetat + eugenol

ENERGY COMPONENTS

WAVEFUNCTION NORMALIZATION = 1.0000000000

ONE ELECTRON ENERGY = -27074.9722459042

TWO ELECTRON ENERGY = 12390.4366972188

NUCLEAR REPULSION ENERGY = 11235.1791601494

TOTAL ENERGY = -3449.3563885360

ELECTRON-ELECTRON POTENTIAL ENERGY = 12390.4366972188

NUCLEUS-ELECTRON POTENTIAL ENERGY = -30520.6299020036

NUCLEUS-NUCLEUS POTENTIAL ENERGY = 11235.1791601494

TOTAL POTENTIAL ENERGY = -6895.0140446354

TOTAL KINETIC ENERGY = 3445.6576560993

VIRIAL RATIO (V/T) = 2.0010734475

Hasil perhitungan energi potensial, energi kinetik dan energi total untuk trigliserida + metil asetat + sineol

ENERGY COMPONENTS

WAVEFUNCTION NORMALIZATION = 1.0000000000

ONE ELECTRON ENERGY = -26713.8618340880

TWO ELECTRON ENERGY = 12232.2060390716

NUCLEAR REPULSION ENERGY = 11103.1838616374

TOTAL ENERGY = -3378.4719333791

ELECTRON-ELECTRON POTENTIAL ENERGY = 12232.2060390716

NUCLEUS-ELECTRON POTENTIAL ENERGY = -30090.1425485949

NUCLEUS-NUCLEUS POTENTIAL ENERGY = 11103.1838616374

TOTAL POTENTIAL ENERGY = -6754.7526478860

$$\text{TOTAL KINETIC ENERGY} = 3376.2807145069$$

$$\text{VIRIAL RATIO (V/T)} = 2.0006490038$$

Hasil perhitungan energi potensial, energi kinetik dan energi total untuk trigliserida + metil asetat

ENERGY COMPONENTS

$$\text{WAVEFUNCTION NORMALIZATION} = 1.0000000000$$

$$\text{ONE ELECTRON ENERGY} = -21996.4239927819$$

$$\text{TWO ELECTRON ENERGY} = 10027.5191497615$$

$$\text{NUCLEAR REPULSION ENERGY} = 9051.1769932827$$

$$\text{TOTAL ENERGY} = -2917.7278497377$$

$$\text{ELECTRON-ELECTRON POTENTIAL ENERGY} = 10027.5191497615$$

$$\text{NUCLEUS-ELECTRON POTENTIAL ENERGY} = -24911.0912996300$$

$$\text{NUCLEUS-NUCLEUS POTENTIAL ENERGY} = 9051.1769932827$$

$$\text{TOTAL POTENTIAL ENERGY} = -5832.3951565858$$

$$\text{TOTAL KINETIC ENERGY} = 2914.6673068481$$

$$\text{VIRIAL RATIO (V/T)} = 2.0010500488$$

6. Menentukan Moment Dipole

Persamaan untuk menghitung moment dipole adalah:

$$\mu = qr$$

Dimana μ = moment dipole, q = *magnitude separated charge* dan r adalah vektor dari *site positive charge* ke *site negative charge*.

Untuk menghitung moment dipole menggunakan GAMESS

- Masuk ke **Calculations > GAMESS Interface > Compute Properties**

- Di properties tab, pilih **Dipole** dan klik **RUN**

Hasil perhitungan moment dipole untuk trigliserida + metil asetat + sineol

ELECTROSTATIC MOMENTS

POINT 1 X Y Z (BOHR) CHARGE

26.712446 -0.297628 0.194719 0.00 (A.U.)

DX DY DZ /D/ (DEBYE)

4.563578 -2.127120 -1.936224 **5.394428**

..... END OF PROPERTY EVALUATION

STEP CPU TIME = 86.42 TOTAL CPU TIME = 11560.1 (192.7 MIN)

TOTAL WALL CLOCK TIME= 11560.1 SECONDS, CPU UTILIZATION IS 100.00%

Hasil perhitungan moment dipole untuk trigliserida + metil asetat + eugenol

ELECTROSTATIC MOMENTS

POINT 1 X Y Z (BOHR) CHARGE

18.517475 -0.219106 0.235953 0.00 (A.U.)

DX DY DZ /D/ (DEBYE)

-3.243809 -0.996382 -3.277099 **4.717463**

..... END OF PROPERTY EVALUATION

STEP CPU TIME = 55.26 TOTAL CPU TIME = 13820.1 (230.3 MIN)

TOTAL WALL CLOCK TIME= 13820.1 SECONDS, CPU UTILIZATION IS 100.00%

Hasil perhitungan moment dipole untuk trigliserida + metil asetat

ELECTROSTATIC MOMENTS

POINT 1 X Y Z (BOHR) CHARGE

5.729644 -0.349166 0.221101 0.00 (A.U.)

DX DY DZ /D/ (DEBYE)

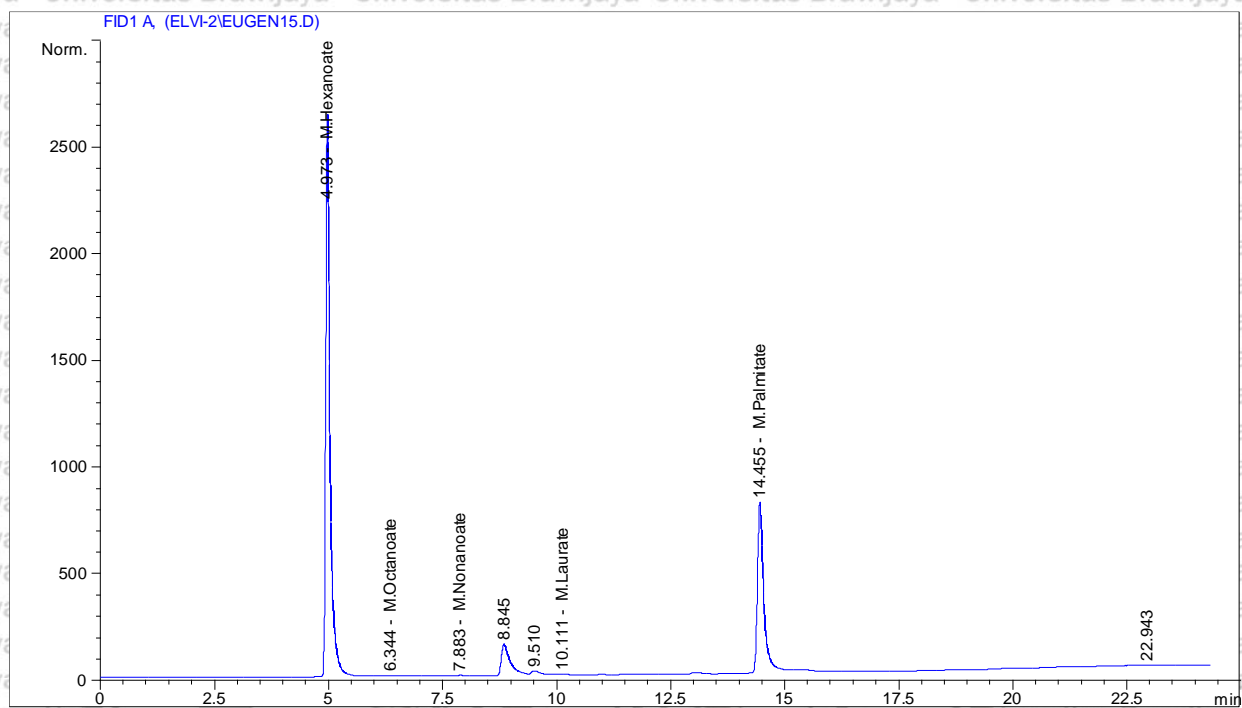
2.573355 -2.806268 -1.052731 **3.950385**

..... END OF PROPERTY EVALUATION

STEP CPU TIME = 48.69 TOTAL CPU TIME = 7438.0 (124.0 MIN)

TOTAL WALL CLOCK TIME= 7438.0 SECONDS, CPU UTILIZATION IS 100.00%

Lampiran 11: Hasil analisa GC (Gas Chromatography) dan GC-MS (Gas Chromatography – Mass Spectrum)



Data File C:\HPCHEM\1\DATA\ELVI-2\EUGEN15.D Sample Name: EUGENOL-15MENIT
 Instrument 1 7/26/2019 1:47:47 PM

INNOWAX-1uL

```

=====
Injection Date   : 7/25/2019 3:21:19 PM
Sample Name     : EUGENOL-15MENIT           Vial : 1
Acq. Operator   :                          Inj  : 1
                                           Inj Volume : Manually
Acq. Method     : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed    : 7/25/2019 10:19:14 AM
                  (modified after loading)
Analysis Method : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed    : 7/26/2019 1:47:46 PM
                  (modified after loading)
=====
    
```

External Standard Report (Sample Amount is 0!)

```

Sorted By       : Signal
Calib. Data Modified : 7/26/2019 1:47:31 PM
Multiplier      : 1.0000
Dilution        : 1.0000
    
```

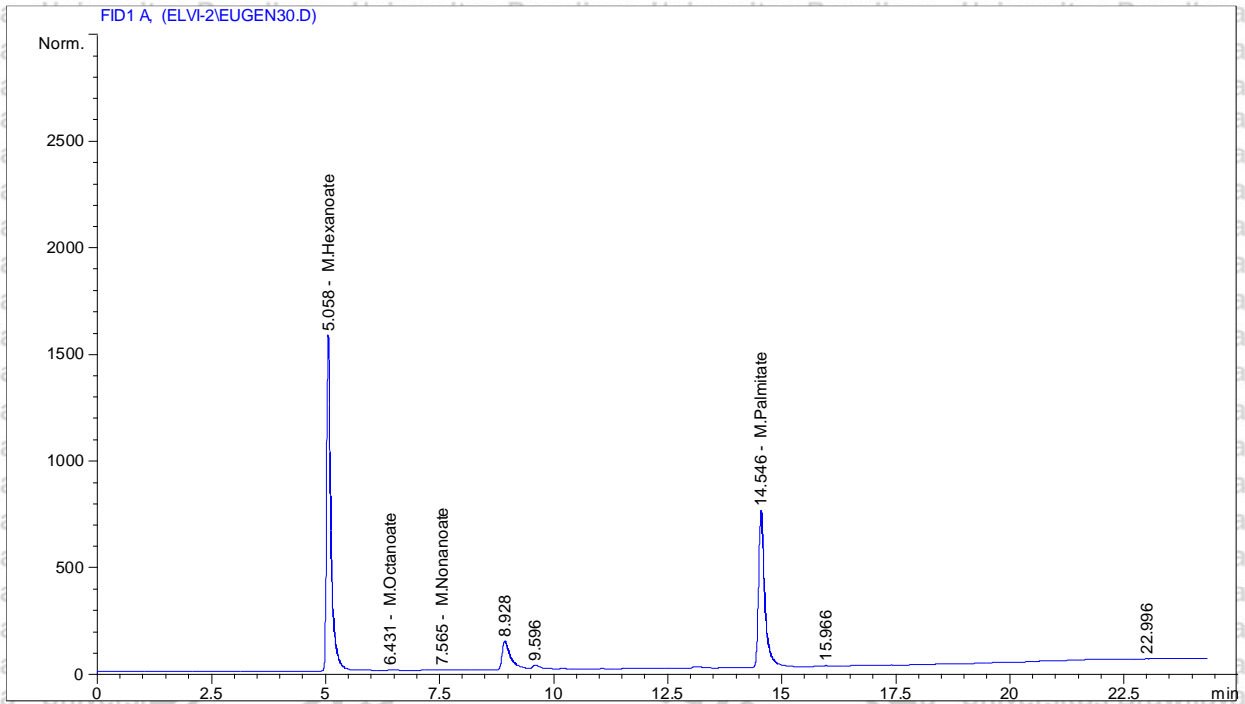
Signal 1: FID1 A,

RetTime [min]	Type	Area [pA*s]	Amt/Area	Amount [(mg/L)]	Grp Name
4.973	PV +	1.73162e4	2.60121	4.50430e4	M.Hexanoate

6.344	VB	+	39.05063	10.22719	399.37823	M.Octanoate
7.883	VV	+	41.88820	14.52249	608.32104	M.Nonanoate
10.111	VV	+	54.34328	7.42395	403.44197	M.Laurate
11.522		-				M.Myristate
14.455	VB	+	7404.92236	1.24800	9241.32263	M.Palmitate
19.803		-				M.Oleat
20.296		-				M.Linoleat
21.443		-				M.Stearate
26.717		-				M.Arachidate
Totals :					5.56954e4	

*** End of Report ***





Data File C:\HPCHEM\1\DATA\ELVI-2\EUGEN30.D Sample Name: EUGENOL-30MENIT
Instrument 1 7/26/2019 1:48:48 PM

INNOWAX-1uL

```

=====
Injection Date   : 7/26/2019 10:39:57 AM
Sample Name     : EUGENOL-30MENIT
Acq. Operator   :
Vial            : 1
Inj            : 1
Inj Volume     : Manually

Acq. Method    : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed   : 7/26/2019 10:03:03 AM
                (modified after loading)
Analysis Method : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed   : 7/26/2019 1:48:01 PM
                (modified after loading)
=====
    
```

External Standard Report (Sample Amount is 0!)

```

=====
Sorted By       : Signal
Calib. Data Modified : 7/26/2019 1:47:58 PM
Multiplier     : 1.0000
Dilution       : 1.0000
    
```

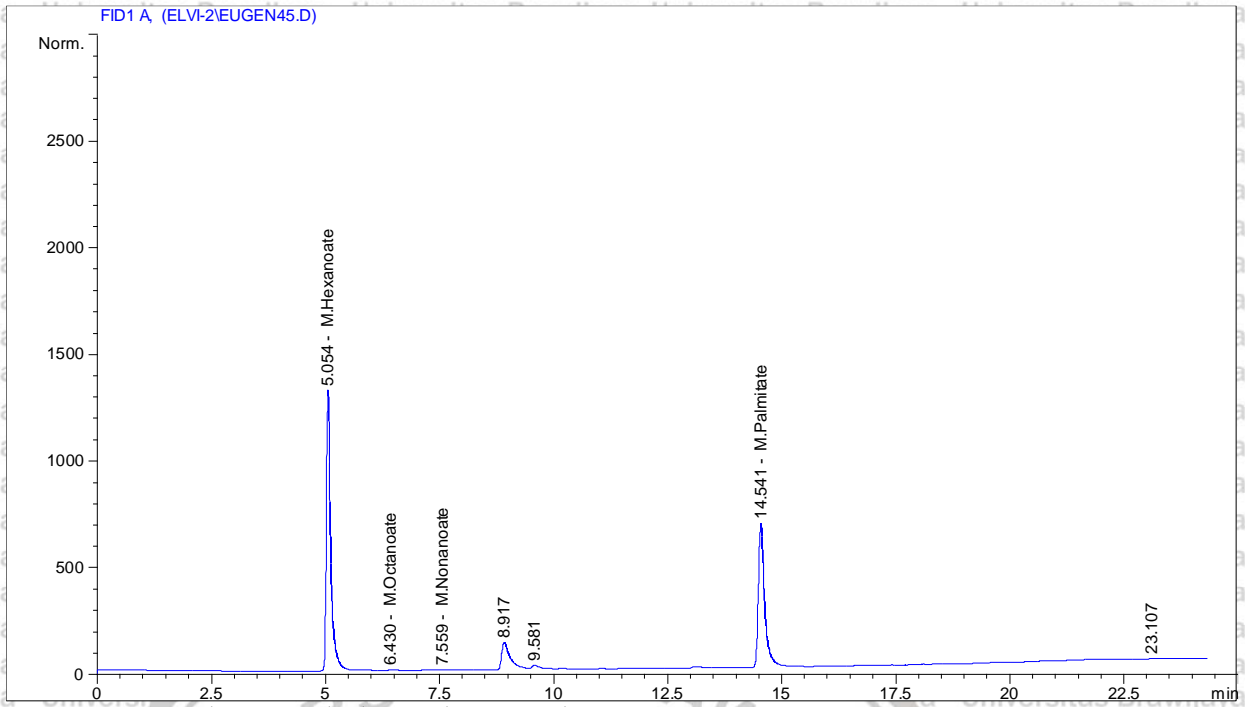
Signal 1: FID1 A,

RetTime [min]	Type	Area [pA*s]	Amt/Area	Amount [(mg/L)]	Grp	Name
5.058	PB	+ 1.05032e4	2.62021	2.75207e4		M.Hexanoate
6.431	PP	+ 18.32740	18.62082	341.27134		M.Octanoate
7.565	BV	+ 34.82691	16.95084	590.34527		M.Nonanoate
9.901		-	-	-		M.Laurate
11.522		-	-	-		M.Myristate

14.546	v	+	8418.81543	1.24070	1.04452e4	M.Palmitate
19.803						M.Oleat
20.296						M.Linoleat
21.443						M.Stearate
26.717						M.Arachidate
Totals :				3.88975e4		

*** End of Report ***





Data File C:\HPCHEM\1\DATA\ELVI-2\EUGEN45.D Sample Name: EUGENOL-45MENIT
Instrument 1 7/26/2019 1:49:12 PM

INNOWAX-1uL

```

=====
Injection Date   : 7/26/2019 10:04:21 AM
Sample Name     : EUGENOL-45MENIT
Acq. Operator   :
Vial            : 1
Inj             : 1
Inj Volume      : Manually

Acq. Method     : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed    : 7/26/2019 10:03:03 AM
                  (modified after loading)
Analysis Method : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed    : 7/26/2019 1:48:01 PM
                  (modified after loading)
=====
    
```

External Standard Report (Sample Amount is 0!)

```

=====
Sorted By       : Signal
Calib. Data Modified : 7/26/2019 1:47:58 PM
Multiplier      : 1.0000
Dilution        : 1.0000
    
```

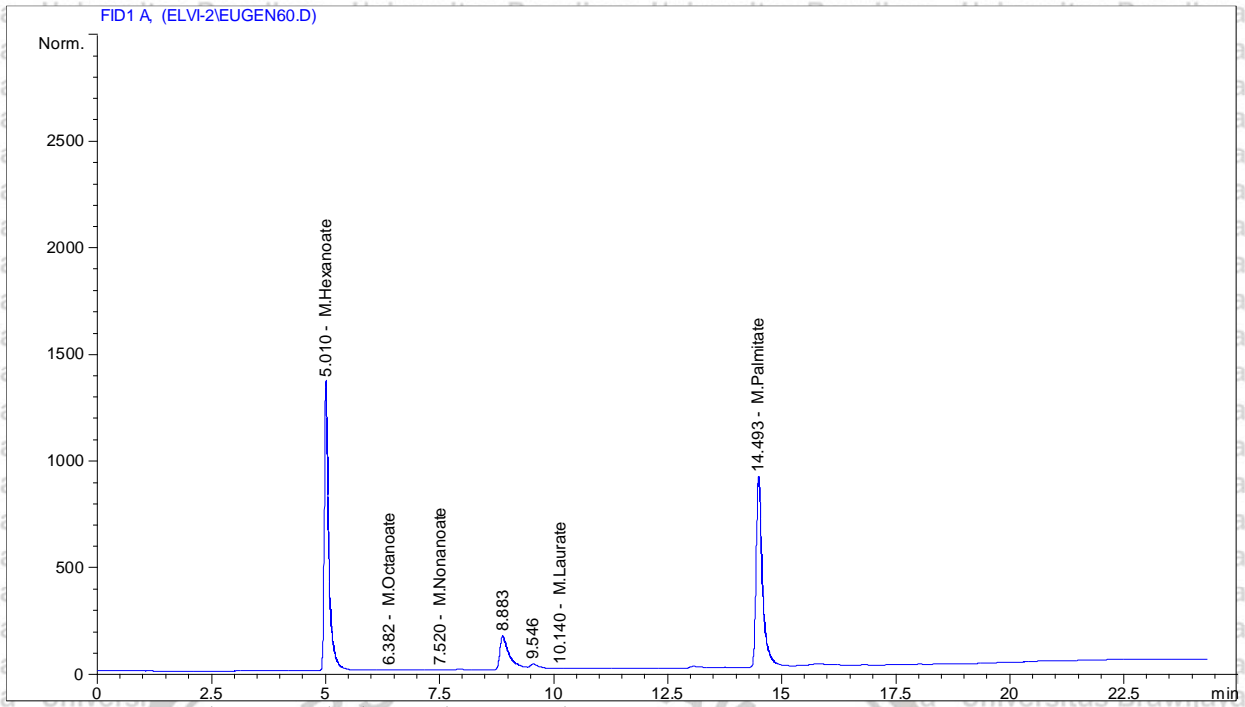
Signal 1: FID1 A,

RetTime [min]	Type	Area [pA*s]	Amt/Area	Amount [(mg/L)]	Grp	Name
5.054	PV	8882.44629	2.62902	2.33521e4		M.Hexanoate
6.430	VB	30.71264	12.24248	375.99891		M.Octanoate
7.559	BV	34.95627	16.89753	590.67459		M.Nonanoate
9.901						M.Laurate
11.522						M.Myristate

14.541	v	+ 7777.48047	1.24509	9683.69392	M.Palmitate
19.803					M.Oleat
20.296					M.Linoleat
21.443					M.Stearate
26.717					M.Arachidate
Totals :			3.40025e4		

*** End of Report ***





Data File C:\HPCHEM\1\DATA\ELVI-2\EUGEN60.D Sample Name: EUGENOL-60MENIT
Instrument 1 7/26/2019 1:49:33 PM

INNOWAX-1uL

```

=====
Injection Date   : 7/25/2019 3:49:49 PM
Sample Name     : EUGENOL-60MENIT
Acq. Operator   :
Vial            : 1
Inj             : 1
Inj Volume      : Manually

Acq. Method     : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed    : 7/25/2019 10:19:14 AM
                 (modified after loading)
Analysis Method : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed    : 7/26/2019 1:48:01 PM
                 (modified after loading)
=====
    
```

External Standard Report (Sample Amount is 0!)

```

=====
Sorted By       : Signal
Calib. Data Modified : 7/26/2019 1:47:58 PM
Multiplier     : 1.0000
Dilution       : 1.0000
    
```

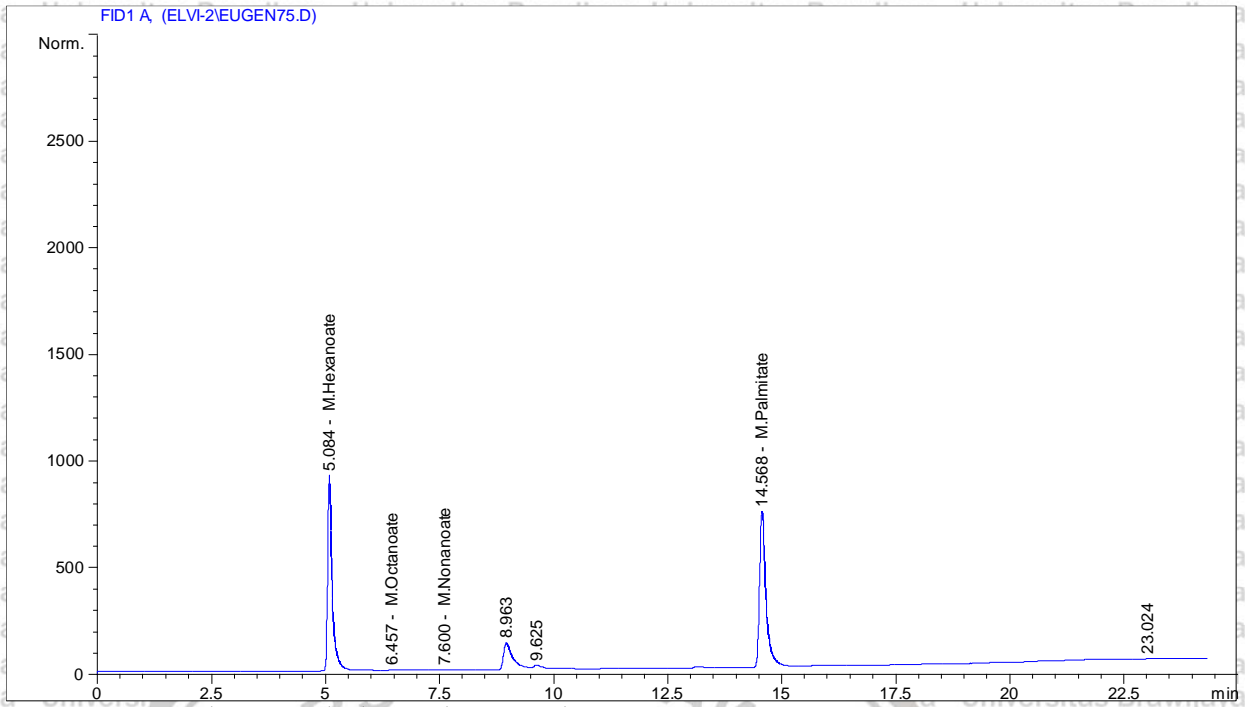
Signal 1: FID1 A,

RetTime [min]	Type	Area [pA*s]	Amt/Area	Amount [(mg/L)]	Grp	Name
5.010	PV	+ 9294.35938	2.62649	2.44116e4		M.Hexanoate
6.382	VB	+ 35.10991	11.06037	388.32863		M.Octanoate
7.520	BV	+ 40.58333	14.90758	604.99926		M.Nonanoate
10.140	VV	+ 212.60255	2.97853	633.24343		M.Laurate
11.522	-	-	-	-		M.Myristate

14.493	v	+ 9773.72656	1.23331	1.20540e4	M.Palmitate
19.803					M.Oleat
20.296					M.Linoleat
21.443					M.Stearate
26.717					M.Arachidate
Totals :				3.80921e4	

*** End of Report ***





Data File C:\HPCHEM\1\DATA\ELVI-2\EUGEN75.D Sample Name: EUGENOL-75MENIT
Instrument 1 7/26/2019 1:49:56 PM

INNOWAX-1uL

```

=====
Injection Date   : 7/26/2019 11:16:17 AM
Sample Name     : EUGENOL-75MENIT
Acq. Operator   :
Vial            : 1
Inj            : 1
Inj Volume     : Manually

Acq. Method     : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed    : 7/26/2019 10:03:03 AM
                 (modified after loading)
Analysis Method : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed    : 7/26/2019 1:48:01 PM
                 (modified after loading)
=====
    
```

External Standard Report (Sample Amount is 0!)

```

=====
Sorted By       : Signal
Calib. Data Modified : 7/26/2019 1:47:58 PM
Multiplier     : 1.0000
Dilution       : 1.0000
    
```

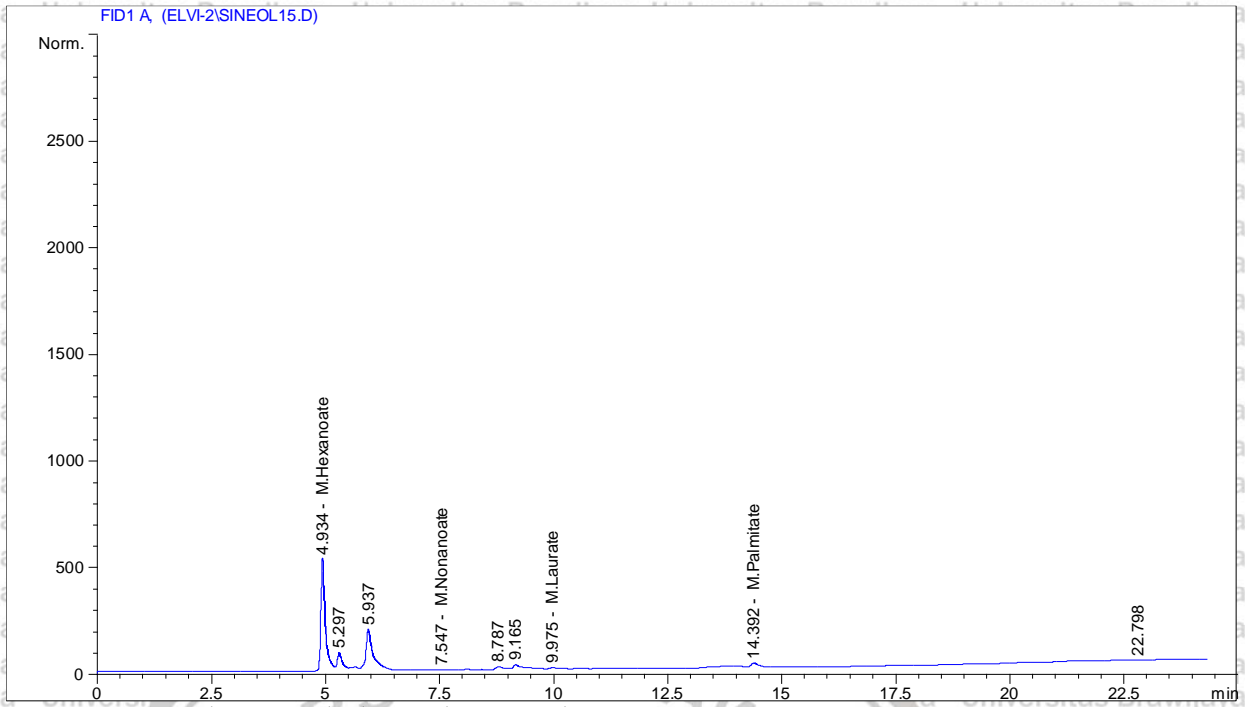
Signal 1: FID1 A,

RetTime [min]	Type	Area [pA*s]	Amt/Area	Amount [(mg/L)]	Grp	Name
5.084	PB +	6338.20752	2.65195	1.68086e4		M.Hexanoate
6.457	PB +	16.87889	19.97820	337.20976		M.Octanoate
7.600	PV +	16.83736	32.34176	544.54969		M.Nonanoate
9.901						M.Laurate
11.522						M.Myristate

14.568	v	+ 7199.33643	1.24973	8997.21220	M.Palmitate
19.803					M.Oleat
20.296					M.Linoleat
21.443					M.Stearate
26.717					M.Arachidate
Totals :				2.66876e4	

*** End of Report ***





Data File C:\HPCHEM\1\DATA\ELVI-2\SINEOL15.D Sample Name: SINEOL-15MENIT
Instrument 1 7/26/2019 1:52:39 PM

INNOWAX-1uL

```

=====
Injection Date   : 7/25/2019 2:47:03 PM
Sample Name     : SINEOL-15MENIT
Acq. Operator   :
Vial            : 1
Inj             : 1
Inj Volume     : Manually

Acq. Method     : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed    : 7/25/2019 10:19:14 AM
                 (modified after loading)
Analysis Method : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed    : 7/26/2019 1:52:29 PM
                 (modified after loading)
=====
    
```

External Standard Report (Sample Amount is 0!)

```

=====
Sorted By       : Signal
Calib. Data Modified : 7/26/2019 1:52:25 PM
Multiplier     : 1.0000
Dilution       : 1.0000
    
```

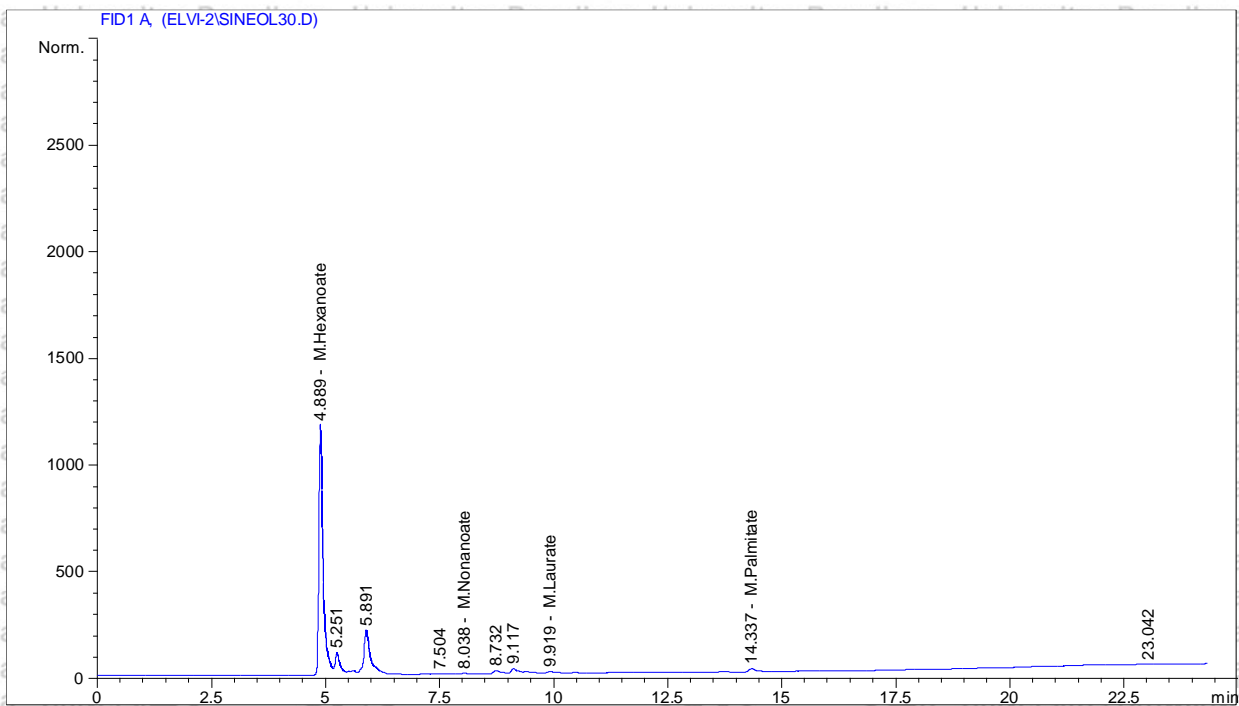
Signal 1: FID1 A,

RetTime [min]	Type	Area [pA*s]	Amt/Area	Amount [(mg/L)]	Grp	Name
4.934	BV +	3559.19434	2.71443	9661.20130		M.Hexanoate
6.381						M.Octanoate
7.547	BV +	137.08870	6.20526	850.67074		M.Nonanoate
9.975	VV +	387.18277	2.29025	886.74382		M.Laurate
11.522						M.Myristate

14.392	v	+	1130.13989	1.58451	1790.71664	M.Palmitate
19.803						M.Oleat
20.296						M.Linoleat
21.443						M.Stearate
26.717						M.Arachidate
Totals :				1.31893e4		

*** End of Report ***





Data File C:\HPCHEM\1\DATA\ELVI-2\SINEOL30.D Sample Name: SINEOL-30MENIT
Instrument 1 7/26/2019 1:53:03 PM

INNOWAX-1uL

```

=====
Injection Date   : 7/25/2019 11:15:47 AM
Sample Name     : SINEOL-30MENIT
Acq. Operator   :
Vial            : 1
Inj             : 1
Inj Volume     : Manually

Acq. Method     : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed    : 7/25/2019 10:19:14 AM
                 (modified after loading)
Analysis Method : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed    : 7/26/2019 1:52:29 PM
                 (modified after loading)
=====
    
```

External Standard Report (Sample Amount is 0!)

```

Sorted By       : Signal
Calib. Data Modified : 7/26/2019 1:52:25 PM
Multiplier     : 1.0000
Dilution       : 1.0000
    
```

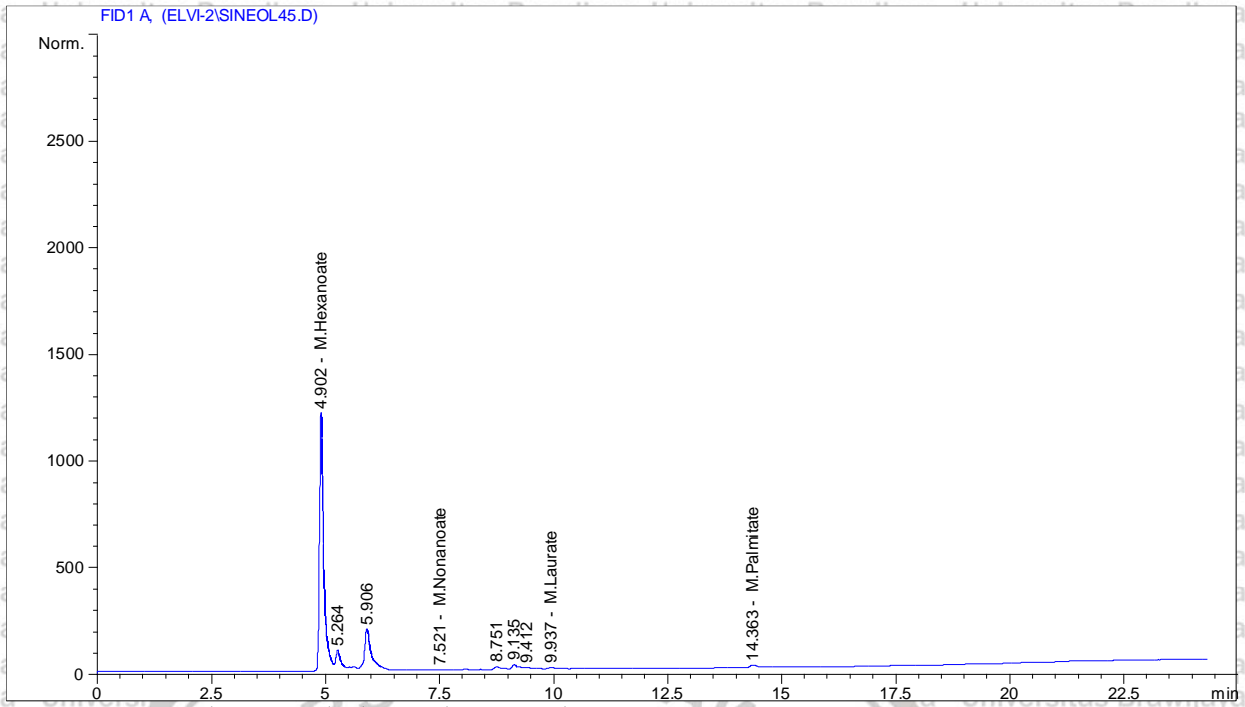
Signal 1: FID1 A,

RetTime [min]	Type	Area [pA*s]	Amt/Area	Amount [(mg/L)]	Grp	Name
4.889	PV +	7553.92139	2.63907	1.99353e4		M.Hexanoate
6.381						M.Octanoate
8.038	VV +	101.20831	7.50265	759.33088		M.Nonanoate
9.919	VV +	286.58182	2.58448	740.66552		M.Laurate
11.522						M.Myristate

14.337	v	+	651.68518	1.87607	1222.60491	M.Palmitate
19.803						M.Oleat
20.296						M.Linoleat
21.443						M.Stearate
26.717						M.Arachidate
Totals :				2.26579e4		

*** End of Report ***





Data File C:\HPCHEM\1\DATA\ELVI-2\SINEOL45.D Sample Name: SINEOL-45MENIT
 Instrument 1 7/26/2019 1:54:04 PM

INNOWAX-1uL

```

=====
Injection Date   : 7/25/2019 1:16:09 PM
Sample Name     : SINEOL-45MENIT
Acq. Operator   :
Vial           : 1
Inj            : 1
Inj Volume     : Manually

Acq. Method     : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed    : 7/25/2019 10:19:14 AM
                 (modified after loading)
Analysis Method : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed    : 7/26/2019 1:53:48 PM
                 (modified after loading)
=====
    
```

External Standard Report (Sample Amount is 0!)

```

Sorted By      : Signal
Calib. Data Modified : Friday, July 26, 2019 1:53:47 PM
Multiplier     : 1.0000
Dilution       : 1.0000
    
```

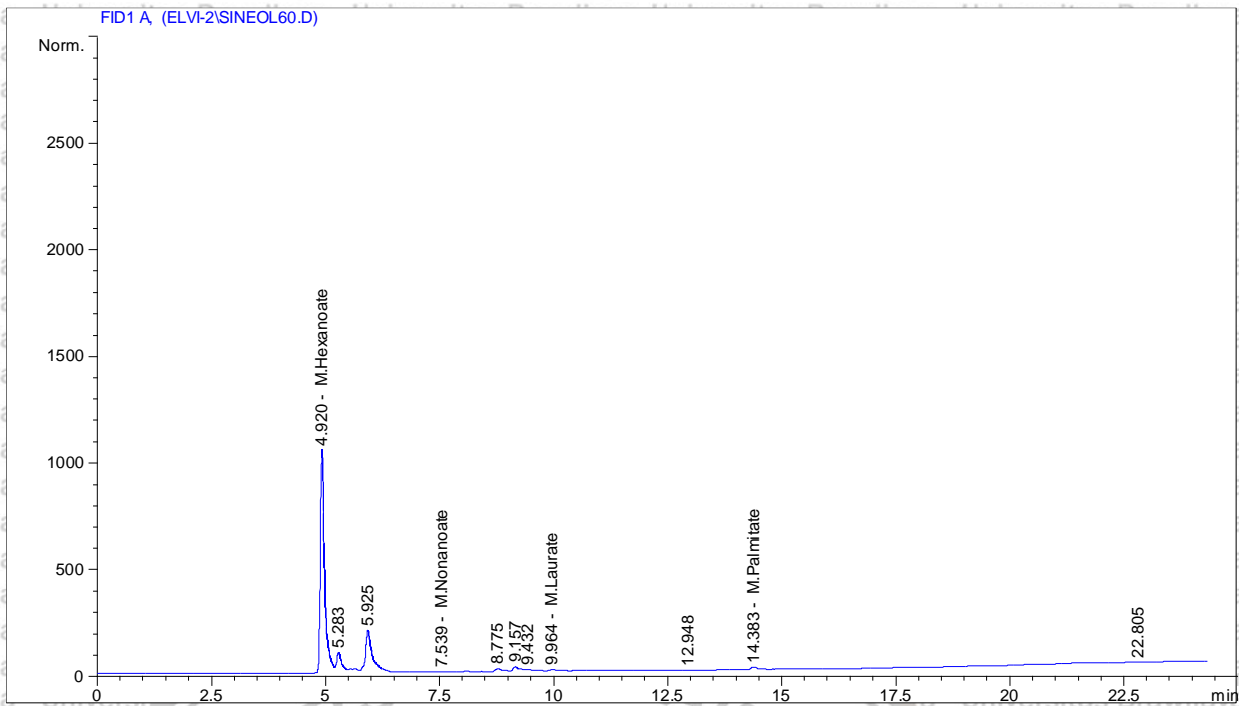
Signal 1: FID1 A,

RetTime [min]	Type	Area [pA*s]	Amt/Area	Amount [(mg/L)]	Grp	Name
4.902	PV +	7862.54639	2.63643	2.07291e4		M.Hexanoate
6.381						M.Octanoate
7.521	VV +	3.99789	128.03366	511.86456		M.Nonanoate
9.937	VV +	127.43198	3.99877	509.57091		M.Laurate
11.522						M.Myristate

14.363	vv	+	132.43608	4.57620	606.05438	M.Palmitate
19.803		-				M.Oleat
20.296		-				M.Linoleat
21.443		-				M.Stearate
26.717		-				M.Arachidate
Totals :				2.23565e4		

*** End of Report ***





Data File C:\HPCHEM\1\DATA\ELVI-2\SINEOL60.D Sample Name: SINEOL-60MENIT
 Instrument 1 7/26/2019 1:55:38 PM

INNOWAX-1uL

```

=====
Injection Date   : 7/25/2019 11:52:06 AM
Sample Name     : SINEOL-60MENIT
Acq. Operator   :
Vial            : 1
Inj            : 1
Inj Volume     : Manually

Acq. Method    : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed   : 7/25/2019 10:19:14 AM
                (modified after loading)
Analysis Method : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed   : 7/26/2019 1:53:48 PM
                (modified after loading)
=====
    
```

External Standard Report (Sample Amount is 0!)

```

Sorted By      : Signal
Calib. Data Modified : Friday, July 26, 2019 1:53:47 PM
Multiplier    : 1.0000
Dilution      : 1.0000
    
```

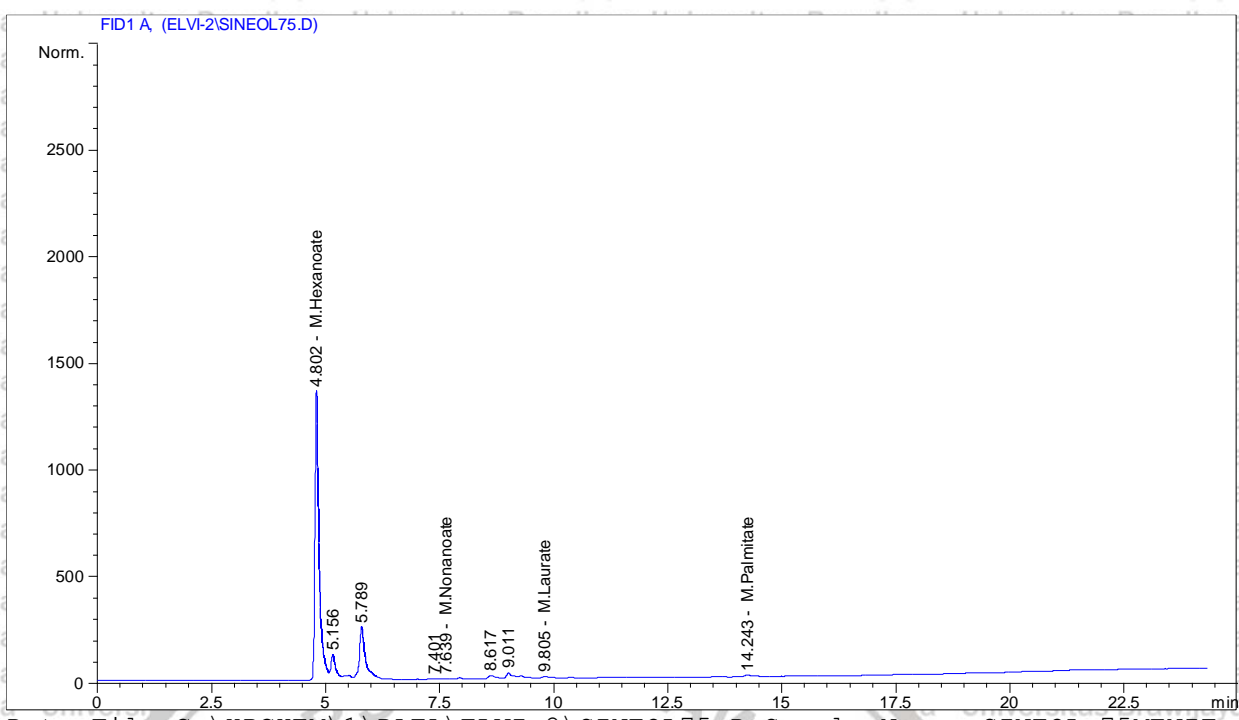
Signal 1: FID1 A,

RetTime [min]	Type	Area [pA*s]	Amt/Area	Amount [(mg/L)]	Grp	Name
4.920	PV	6861.04004	2.64585	1.81533e4		M.Hexanoate
6.381						M.Octanoate
7.539	BV	19.05835	28.86942	550.20363		M.Nonanoate
9.964	VV	285.55765	2.58854	739.17837		M.Laurate
11.522						M.Myristate

14.383	v	+	614.66718	1.91754	1178.65015	M.Palmitate
19.803						M.Oleat
20.296						M.Linoleat
21.443						M.Stearate
26.717						M.Arachidate
Totals :				2.06213e4		

*** End of Report ***





Data File C:\HPCHEM\1\DATA\ELVI-2\SINEOL75.D Sample Name: SINEOL-75MENIT
 Instrument 1 7/26/2019 1:59:15 PM

INNOWAX-1uL

```

=====
Injection Date   : 7/25/2019 10:23:50 AM
Sample Name     : SINEOL-75MENIT
Acq. Operator   :
Vial            : 1
Inj             : 1
Inj Volume     : Manually

Acq. Method     : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed    : 7/25/2019 10:19:14 AM
                 (modified after loading)
Analysis Method : C:\HPCHEM\1\METHODS\FAMEINOX.M
Last changed    : 7/26/2019 1:58:49 PM
                 (modified after loading)
=====
    
```

External Standard Report (Sample Amount is 0!)

```

Sorted By       : Signal
Calib. Data Modified : 7/26/2019 1:58:45 PM
Multiplier     : 1.0000
Dilution       : 1.0000
    
```

Signal 1: FID1 A,

RetTime [min]	Type	Area [pA*s]	Amt/Area	Amount [(mg/L)]	Grp	Name
4.802	PV	8644.20801	2.63060	2.27394e4		M.Hexanoate
6.381						M.Octanoate
7.639	VV	21.67446	25.69215	556.86339		M.Nonanoate
9.805	VV	293.16565	2.55905	750.22562		M.Laurate
11.522						M.Myristate

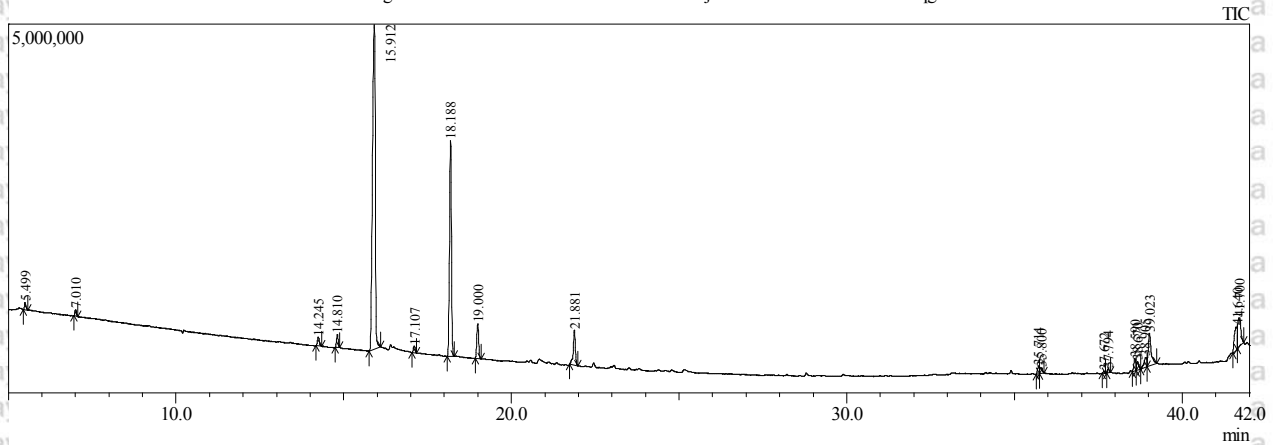
14.243	vv	+	803.74591	1.74578	1403.16011	M.Palmitate
19.803		-				M.Oleat
20.296		-				M.Linoleat
21.443		-				M.Stearate
26.717		-				M.Arachidate
Totals :					2.54497e4	

*** End of Report ***





Chromatogram Biodiesel 1 C:\GCMSsolution\Data\Project1\12082021\biodiesel 1-4.qgd



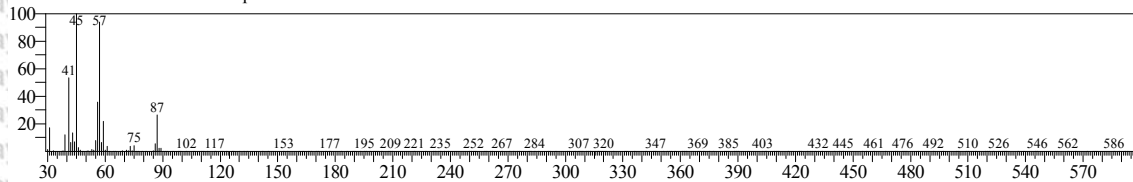
Quantitative Result Table

ID#	Name	R.Time	m/z	Area	Height	Conc.	Conc.Unit	R.Index
1	2-Propanol, 1-butoxy- (CAS) 1-N-BUTOXY-2-	5.497	45.00	90513	26390	1.227 %		0
2	Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl- (CAS) 2,2,4,6,	7.009	57.00	153172	47992	2.076 %		0
3	2,4-Decadienal, (E,E)- (CAS) trans,trans-2,4-D	14.243	81.00	129203	29723	1.751 %		0
4	2,4-Decadienal, (E,E)- (CAS) trans,trans-2,4-D	14.811	81.00	203398	55361	2.757 %		0
5	Phenol, 2-methoxy-4-(1-propenyl)- (CAS) Isoe	15.912	164.00	4179575	854383	56.645 %		0
6	Germacrene D	17.100	105.00	25257	6939	0.342 %		0
7	trans-Caryophyllene	18.187	41.00	1267425	303211	17.177 %		0
8	alpha-Humulene	19.001	93.00	295792	77992	4.009 %		0
9	(-)-Caryophyllene oxide	21.880	41.00	211847	44498	2.871 %		0
10	Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1,3-propanediyl	35.716	57.00	51821	13726	0.702 %		0
11	Eicosanoic acid (CAS) Arachidic acid	35.788	57.00	62535	11794	0.848 %		0
12	1H-Purin-6-amine, [(2-fluorophenyl)methyl]- (37.676	73.00	13322	3692	0.181 %		0
13	Oleic acid, 3-hydroxypropyl ester (CAS) 1-O-C	37.799	55.00	21922	6043	0.297 %		0
14	11-DODECEN-1-AL	38.586	55.00	69946	16469	0.948 %		0
15	9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) Oleic acid	38.671	55.00	64033	12913	0.868 %		0
16	Hexadecanoic acid, 2-[(trimethylsilyl)oxy]-1,3-	38.907	130.00	63339	11419	0.858 %		0
17	Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1-(hydroxymeth	39.021	43.00	152114	31087	2.062 %		0
18	[1R-[1.alpha.(R*),3a.beta.,4.alpha.(1R*,5R*),7	41.630	131.00	32213	22930	0.437 %		0
19	Oleic acid, 3-hydroxypropyl ester (CAS) 1-O-C	41.698	55.00	291143	35554	3.946 %		0

Library

<< Target >>

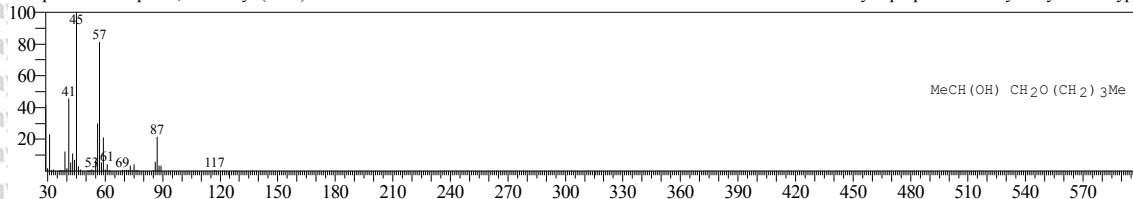
Line#: 1 R.Time: 5.500 (Scan#: 501) MassPeaks: 220
 RawMode: Averaged 5.495-5.505 (500-502) BasePeak: 44.95 (25169)
 BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



Hit#: 1 Entry: 23074 Library: WILEY7.LIB

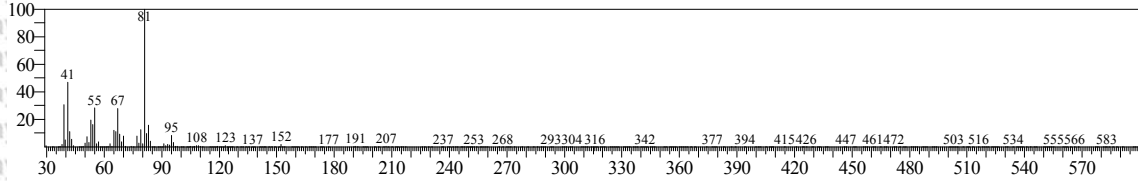
SI: 97 Formula: C7H16O2 CAS: 5131-66-8 MolWeight: 132 RetIndex: 0

CompName: 2-Propanol, 1-butoxy- (CAS) 1-N-BUTOXY-2-PROPANOL \$\$ 1-N-BUTOXYISOPROPANOL \$\$ 1-Butoxy-2-propanol \$\$ 2-Hydroxy-3-butoxypr

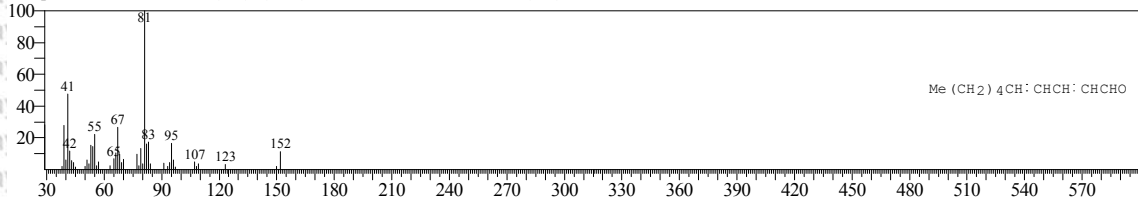


<< Target >>

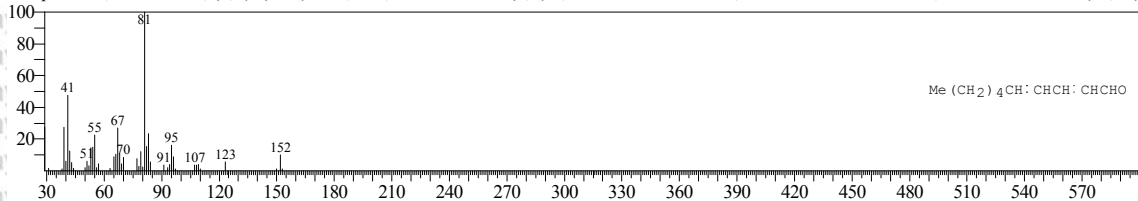
Line#:3 R.Time:14.245(Scan#:2250) MassPeaks:326
 RawMode:Averaged 14.240-14.250(2249-2251) BasePeak:81.00(27522)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



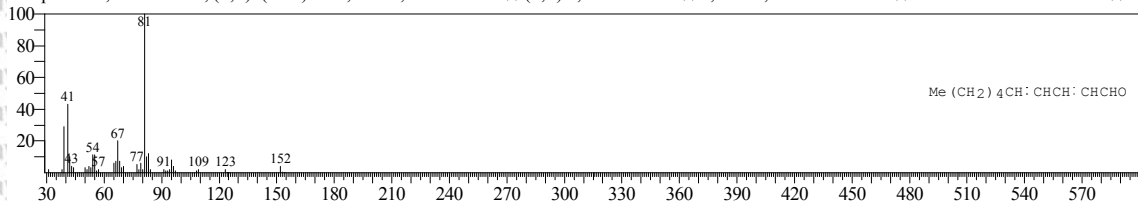
Hit#:1 Entry:40934 Library:WILEY7.LIB
 SI:95 Formula:C10 H16 O CAS:25152-84-5 MolWeight:152 RetIndex:0
 CompName:2,4-Decadienal, (E,E)- (CAS) trans,trans-2,4-Decadienal \$\$ (E,E)-2,4-Decadienal \$\$ 2,4-trans,trans-Decadienal \$\$ 2-trans-4-trans-Decadienal \$\$ tr



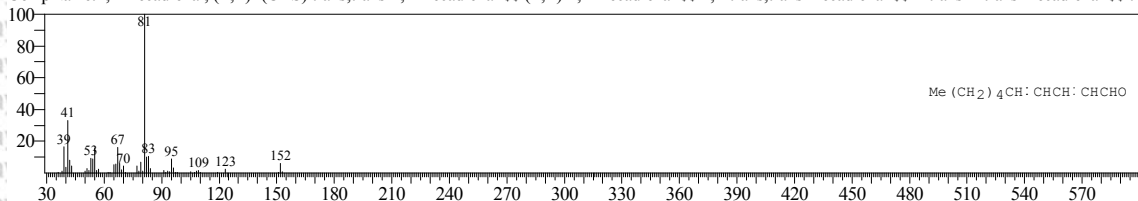
Hit#:2 Entry:40931 Library:WILEY7.LIB
 SI:94 Formula:C10 H16 O CAS:25152-83-4 MolWeight:152 RetIndex:0
 CompName:2,4-Decadienal, (E,Z)- (CAS) trans,cis-2,4-Decadienal \$\$ (E,Z)-2,4-Decadienal \$\$ trans-2,cis-4-Decadienal \$\$ 2-trans,4-cis-Decadienal \$\$ (2E,4Z)



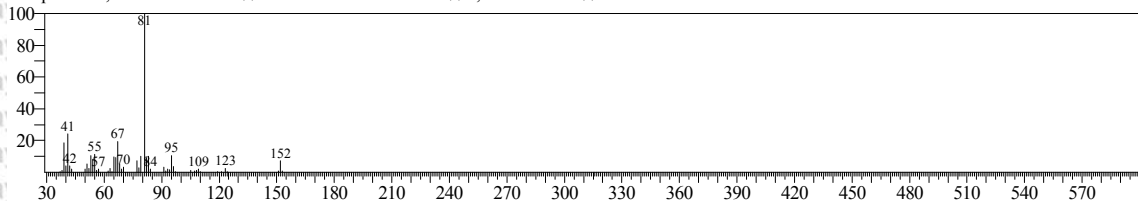
Hit#:3 Entry:40937 Library:WILEY7.LIB
 SI:91 Formula:C10 H16 O CAS:25152-84-5 MolWeight:152 RetIndex:0
 CompName:2,4-Decadienal, (E,E)- (CAS) trans,trans-2,4-Decadienal \$\$ (E,E)-2,4-Decadienal \$\$ 2,4-trans,trans-Decadienal \$\$ 2-trans-4-trans-Decadienal \$\$ tr



Hit#:4 Entry:40936 Library:WILEY7.LIB
 SI:90 Formula:C10 H16 O CAS:25152-84-5 MolWeight:152 RetIndex:0
 CompName:2,4-Decadienal, (E,E)- (CAS) trans,trans-2,4-Decadienal \$\$ (E,E)-2,4-Decadienal \$\$ 2,4-trans,trans-Decadienal \$\$ 2-trans-4-trans-Decadienal \$\$ tr

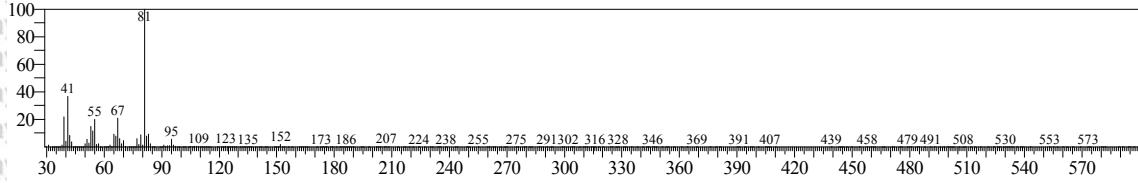


Hit#:5 Entry:40935 Library:WILEY7.LIB
 SI:90 Formula:C10 H16 O CAS:2363-88-4 MolWeight:152 RetIndex:0
 CompName:2,4-DECADIENAL \$\$ HEPTENYLACROLEIN \$\$ 2,4-Decadienal \$\$

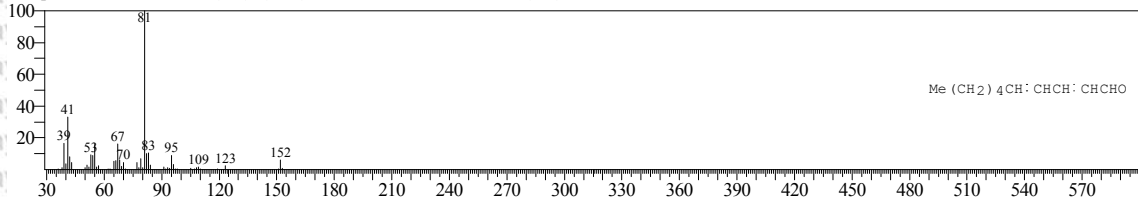


<< Target >>

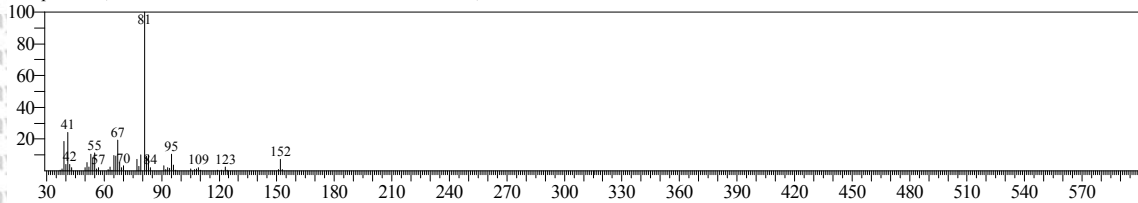
Line#:4 R.Time:14.810(Scan#:2363) MassPeaks:292
 RawMode:Averaged 14.805-14.815(2362-2364) BasePeak:81.00(53191)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



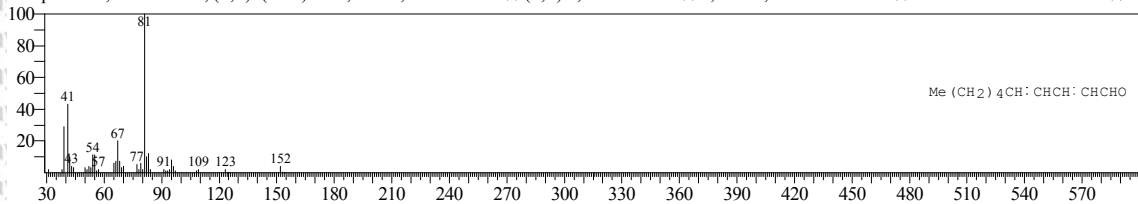
Hit#:1 Entry:40936 Library:WILEY7.LIB
 SI:94 Formula:C10 H16 O CAS:25152-84-5 MolWeight:152 RetIndex:0
 CompName:2,4-Decadienal, (E,E)- (CAS) trans,trans-2,4-Decadienal \$\$ (E,E)-2,4-Decadienal \$\$ 2,4-trans,trans-Decadienal \$\$ 2-trans-4-trans-Decadienal \$\$ tr



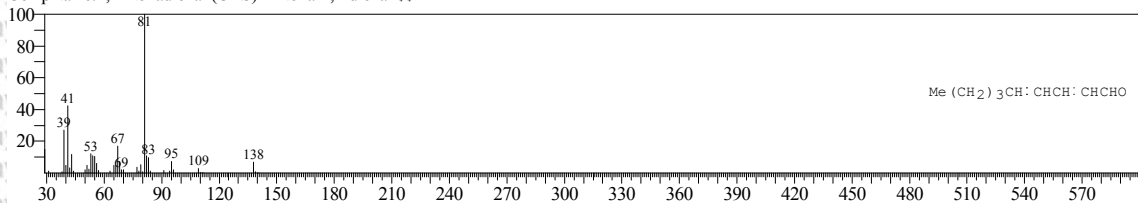
Hit#:2 Entry:40935 Library:WILEY7.LIB
 SI:93 Formula:C10 H16 O CAS:2363-88-4 MolWeight:152 RetIndex:0
 CompName:2,4 DECADIENAL \$\$ HEPTENYL ACROLEIN \$\$ 2,4-Decadienal \$\$



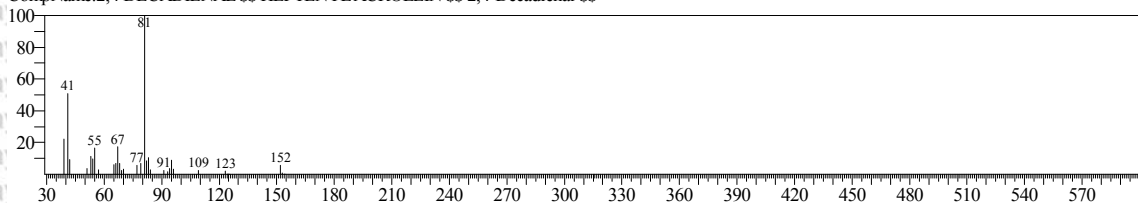
Hit#:3 Entry:40937 Library:WILEY7.LIB
 SI:93 Formula:C10 H16 O CAS:25152-84-5 MolWeight:152 RetIndex:0
 CompName:2,4-Decadienal, (E,E)- (CAS) trans,trans-2,4-Decadienal \$\$ (E,E)-2,4-Decadienal \$\$ 2,4-trans,trans-Decadienal \$\$ 2-trans-4-trans-Decadienal \$\$ tr



Hit#:4 Entry:27975 Library:WILEY7.LIB
 SI:92 Formula:C9 H14 O CAS:6750-03-4 MolWeight:138 RetIndex:0
 CompName:2,4-Nonadienal (CAS) n-Nona-2,4-dienal \$\$

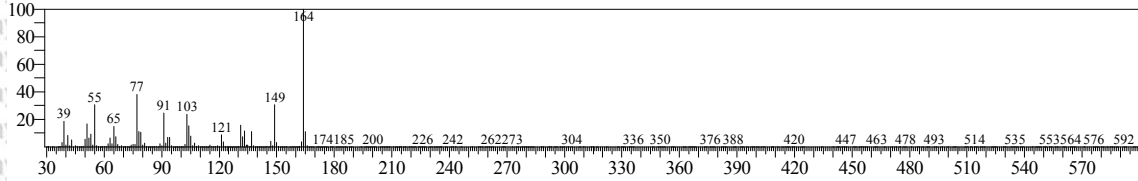


Hit#:5 Entry:40939 Library:WILEY7.LIB
 SI:92 Formula:C10 H16 O CAS:2363-88-4 MolWeight:152 RetIndex:0
 CompName:2,4 DECADIENAL \$\$ HEPTENYL ACROLEIN \$\$ 2,4-Decadienal \$\$

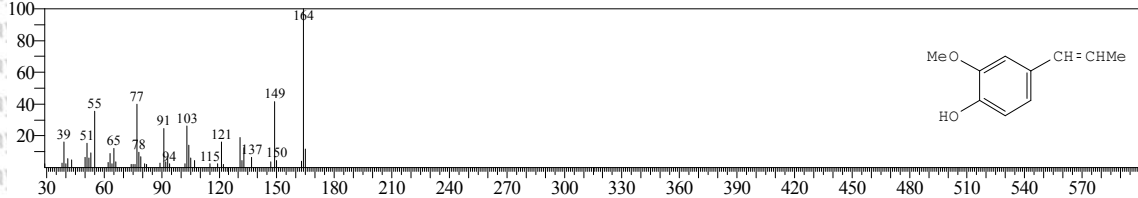


<< Target >>

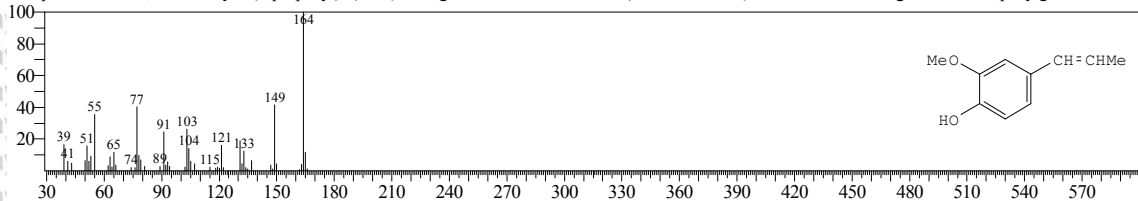
Line#:5 R.Time:15.910(Scan#:2583) MassPeaks:363
 RawMode:Averaged 15.905-15.915(2582-2584) BasePeak:163.95(848256)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



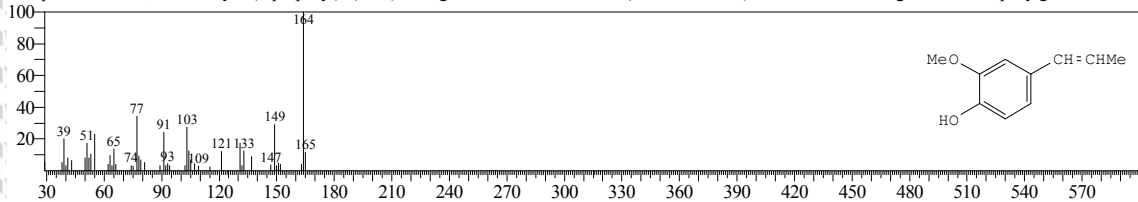
Hit#:1 Entry:53650 Library:WILEY7.LIB
 SI:95 Formula:C10 H12 O2 CAS:97-54-1 MolWeight:164 RetIndex:0
 CompName:Phenol, 2-methoxy-4-(1-propenyl)- (CAS) Isoeugenol \$\$ 2-METHOXY-4-(PROP-1-ENYL)-PHENOL \$\$ iso-Eugenol \$\$ 4-Propenylguaicol \$\$ 2-



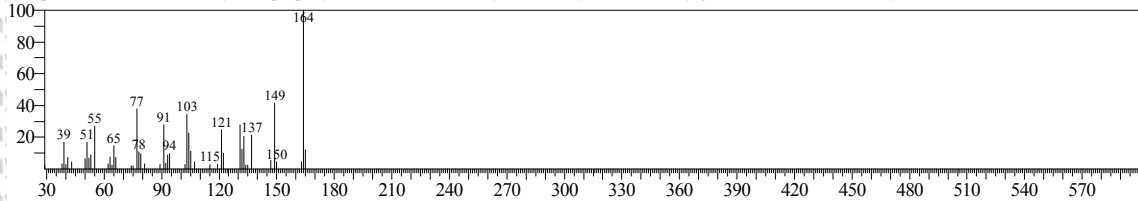
Hit#:2 Entry:53649 Library:WILEY7.LIB
 SI:94 Formula:C10 H12 O2 CAS:97-54-1 MolWeight:164 RetIndex:0
 CompName:Phenol, 2-methoxy-4-(1-propenyl)- (CAS) Isoeugenol \$\$ 2-METHOXY-4-(PROP-1-ENYL)-PHENOL \$\$ iso-Eugenol \$\$ 4-Propenylguaicol \$\$ 2-



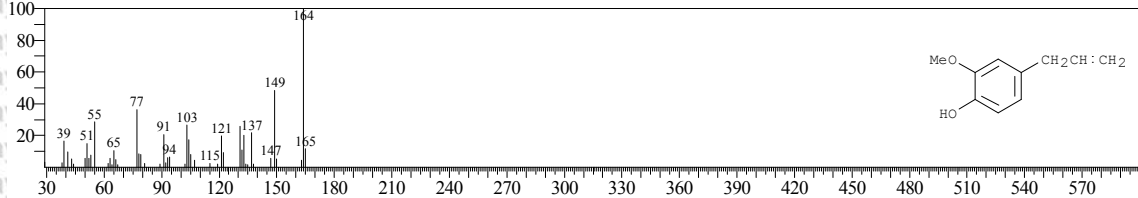
Hit#:3 Entry:53653 Library:WILEY7.LIB
 SI:94 Formula:C10 H12 O2 CAS:97-54-1 MolWeight:164 RetIndex:0
 CompName:Phenol, 2-methoxy-4-(1-propenyl)- (CAS) Isoeugenol \$\$ 2-METHOXY-4-(PROP-1-ENYL)-PHENOL \$\$ iso-Eugenol \$\$ 4-Propenylguaicol \$\$ 2-



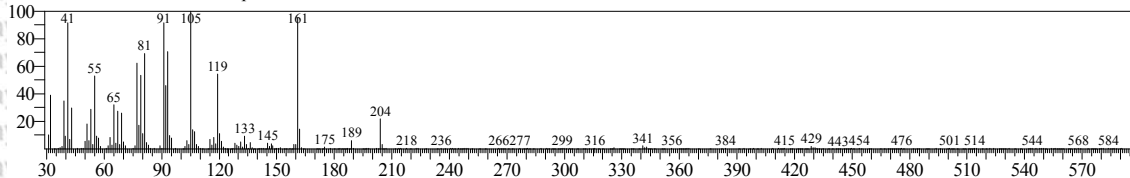
Hit#:4 Entry:52834 Library:WILEY7.LIB
 SI:94 Formula:C10 H12 O2 CAS:1941-12-4 MolWeight:164 RetIndex:0
 CompName:Phenol, 2-methoxy-3-(2-propenyl)- (CAS) Phenol, 3-allyl-2-methoxy- (CAS) 3-Allylguaiacol \$\$ Guaiacol, 3-allyl- (CAS)



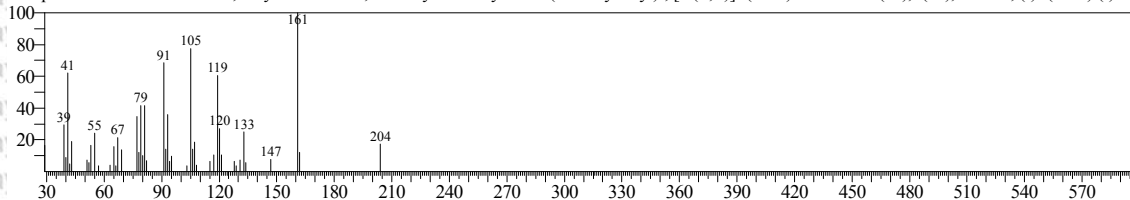
Hit#:5 Entry:53661 Library:WILEY7.LIB
 SI:94 Formula:C10 H12 O2 CAS:97-53-0 MolWeight:164 RetIndex:0
 CompName:Phenol, 2-methoxy-4-(2-propenyl)- (CAS) Eugenol \$\$ 1-(2-PROPENYL)-4-HYDROXY-3-METHOXYBENZENE \$\$ Eugenol \$\$ p-Eugenol \$\$ Et



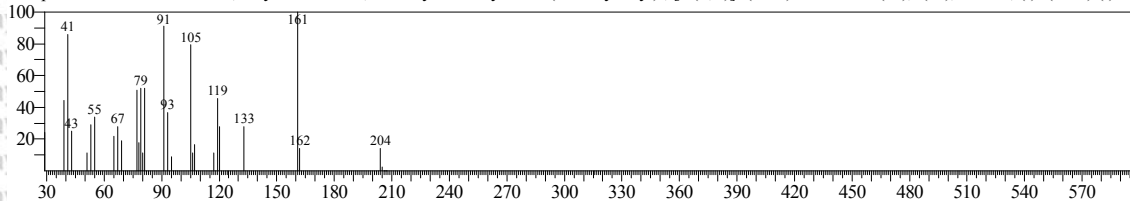
<< Target >>
 Line#:6 R.Time:17.105(Scan#:2822) MassPeaks:335
 RawMode:Averaged 17.100-17.110(2821-2823) BasePeak:105.10(6600)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



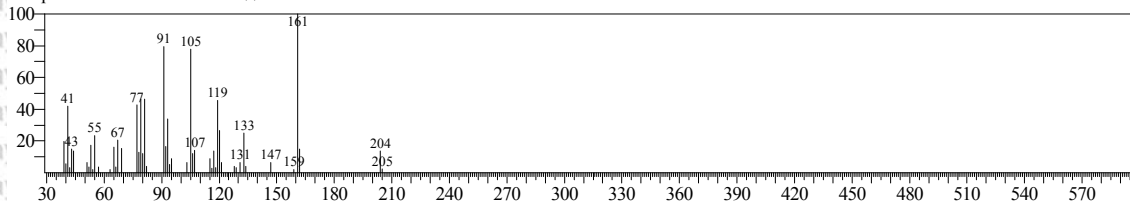
Hit#:1 Entry:101085 Library:WILEY7.LIB
 SI:86 Formula:C15 H24 CAS:23986-74-5 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:Germacrene D \$\$ 1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-8-(1-methylethyl)-, [s-(E,E)]- (CAS) Germacra-1(10),4(15),5-triene, (-)- (CAS) (-)-Ge



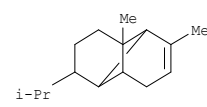
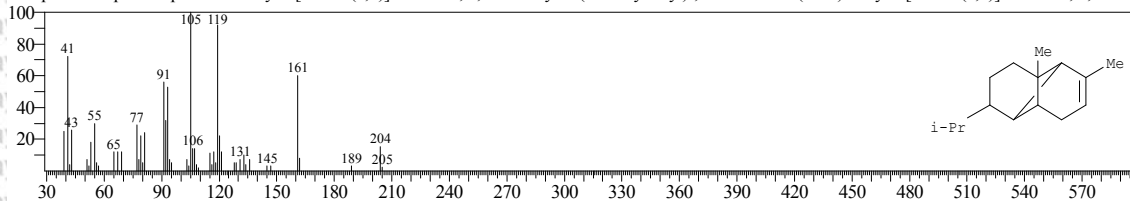
Hit#:2 Entry:101087 Library:WILEY7.LIB
 SI:85 Formula:C15 H24 CAS:23986-74-5 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:Germacrene D \$\$ 1,6-Cyclodecadiene, 1-methyl-5-methylene-8-(1-methylethyl)-, [s-(E,E)]- (CAS) Germacra-1(10),4(15),5-triene, (-)- (CAS) (-)-Ge



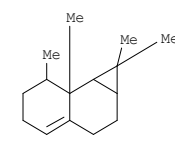
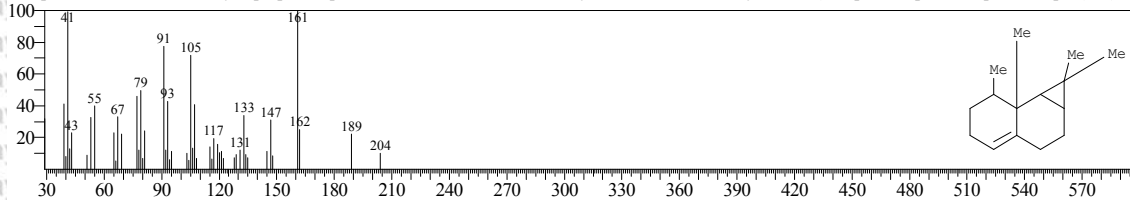
Hit#:3 Entry:100276 Library:WILEY7.LIB
 SI:85 Formula:C15 H24 CAS:23986-74-5 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:GERMACRENE-D \$\$



Hit#:4 Entry:101059 Library:WILEY7.LIB
 SI:84 Formula:C15 H24 CAS:3856-25-5 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:alpha-Copaene \$\$ Tricyclo[4.4.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dimethyl-8-(1-methylethyl)-, stereoisomer (CAS) Tricyclo[4.4.0(2,7)]dec-3-ene, 1,3-dime



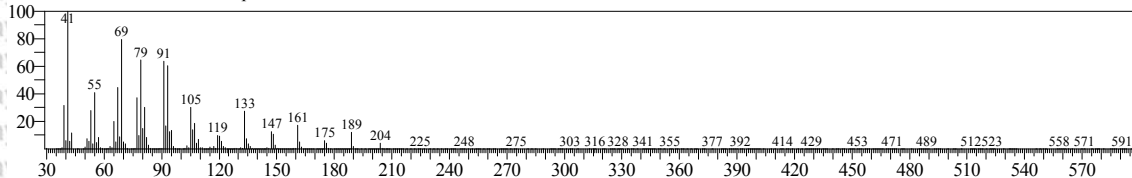
Hit#:5 Entry:101028 Library:WILEY7.LIB
 SI:84 Formula:C15 H24 CAS:17334-55-3 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:Calarene \$\$ 1H-Cyclopropa[a]naphthalene, 1a,2,3,5,6,7,7a,7b-octahydro-1,1,7,7a-tetramethyl-, [1aR-(1a.alpha.,7.alpha.,7a.alpha.,7b.alpha.)]- (CAS)



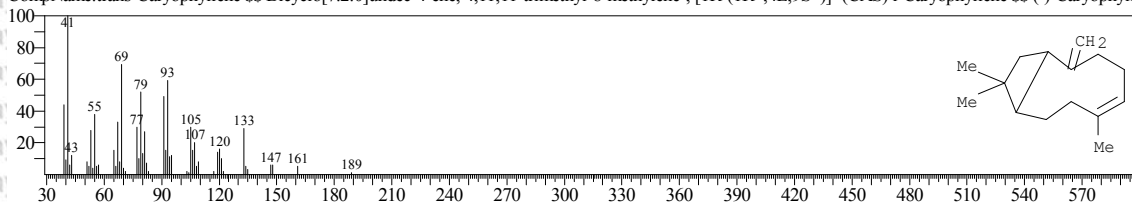


<< Target >>

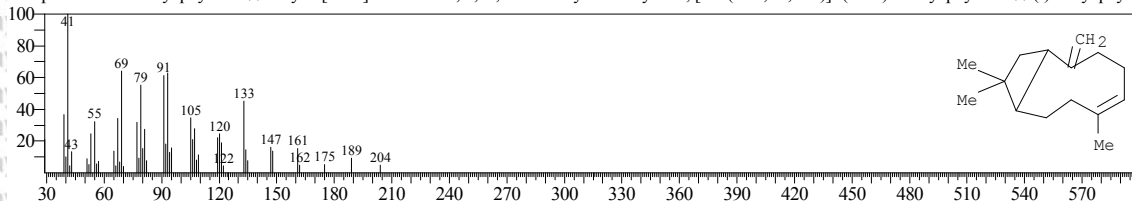
Line#:7 R.Time:18.190(Scan#:3039) MassPeaks:384
RawMode:Averaged 18.185-18.195(3038-3040) BasePeak:40.95(300234)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



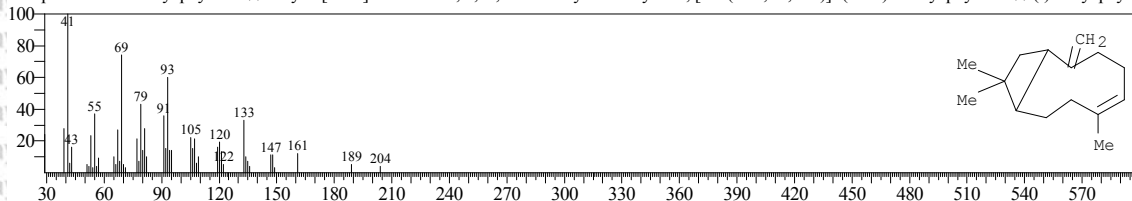
Hit#1 Entry:100789 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:trans-Caryophyllene \$\$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS) l-Caryophyllene \$\$ (-)-Caryophylle



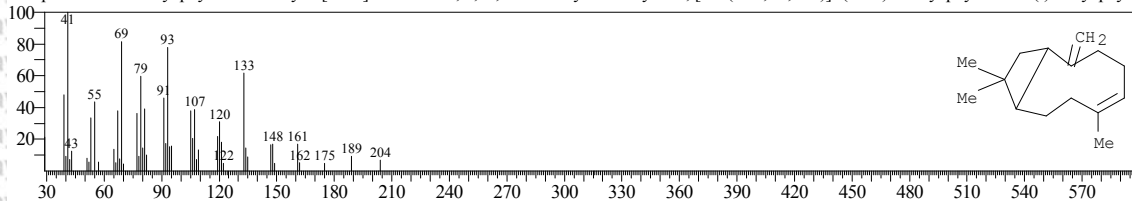
Hit#2 Entry:100788 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C15 H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:trans-Caryophyllene \$\$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS) l-Caryophyllene \$\$ (-)-Caryophylle



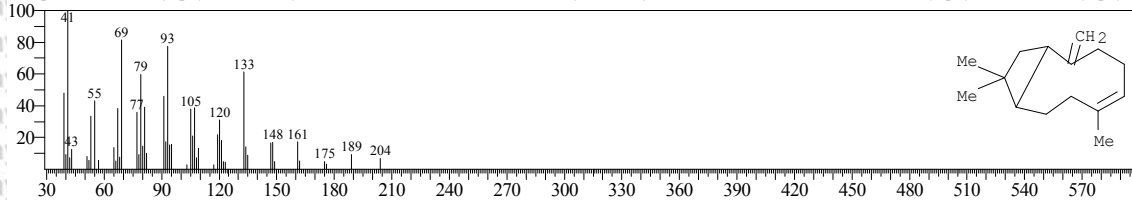
Hit#3 Entry:100786 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C15 H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:trans-Caryophyllene \$\$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS) l-Caryophyllene \$\$ (-)-Caryophylle



Hit#4 Entry:100781 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C15 H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:trans-Caryophyllene \$\$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS) l-Caryophyllene \$\$ (-)-Caryophylle

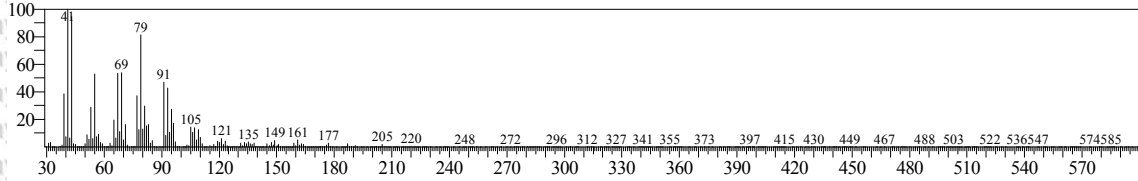


Hit#5 Entry:100792 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C15 H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:trans-Caryophyllene \$\$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS) l-Caryophyllene \$\$ (-)-Caryophylle

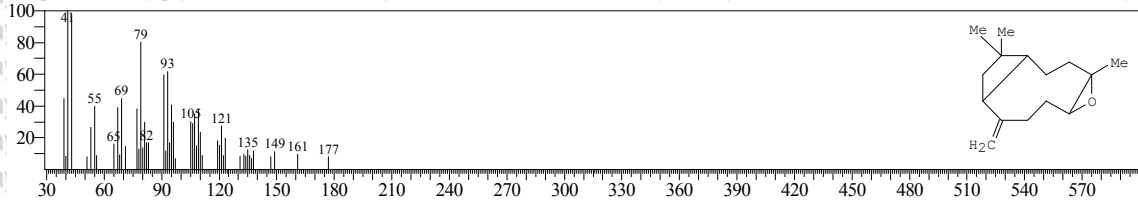


<< Target >>

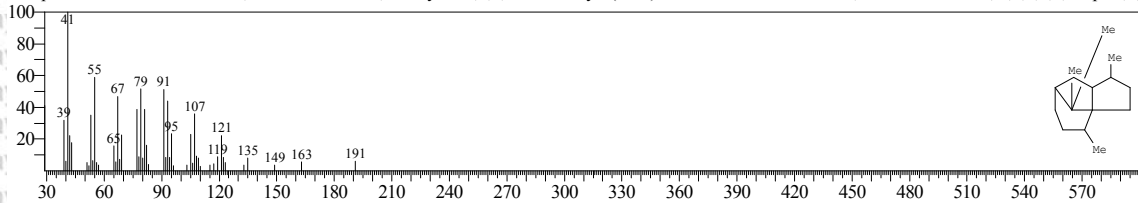
Line#:9 R.Time:21.880(Scan#:3777) MassPeaks:388
 RawMode:Averaged 21.875-21.885(3776-3778) BasePeak:40.95(42798)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



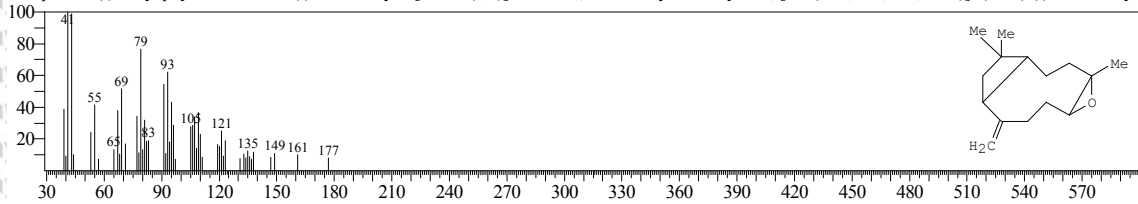
Hit#1 Entry:121057 Library:WILEY7.LIB
 SI:87 Formula:C15 H24 O CAS:1139-30-6 MolWeight:220 RetIndex:0
 CompName:(-)-Caryophyllene oxide \$\$ (-)-5-Oxatricyclo[8.2.0.0(4,6)]dodecane-,12-trimethyl-9-methylene-, [1R-(1R*,4R*,6R*,10S*)]- (CAS) (-)-beta.-Caryo



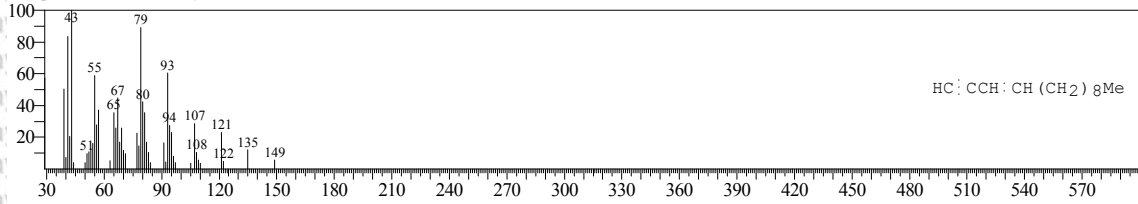
Hit#2 Entry:103301 Library:WILEY7.LIB
 SI:87 Formula:C15 H26 CAS:19078-35-4 MolWeight:206 RetIndex:0
 CompName:Patchulane \$\$ 1H-3a,7-Methanoazulene, octahydro-1,4,9,9-tetramethyl- (CAS) PATCHOULANE \$\$ 1H-3a,7-Methanoazulene, 2,3,4,5,6,7.alpha.,8,



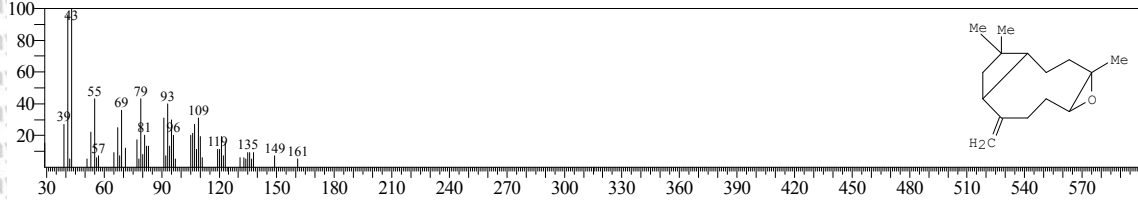
Hit#3 Entry:121056 Library:WILEY7.LIB
 SI:87 Formula:C15 H24 O CAS:1139-30-6 MolWeight:220 RetIndex:0
 CompName:(-)-Caryophyllene oxide \$\$ (-)-5-Oxatricyclo[8.2.0.0(4,6)]dodecane-,12-trimethyl-9-methylene-, [1R-(1R*,4R*,6R*,10S*)]- (CAS) (-)-beta.-Caryo



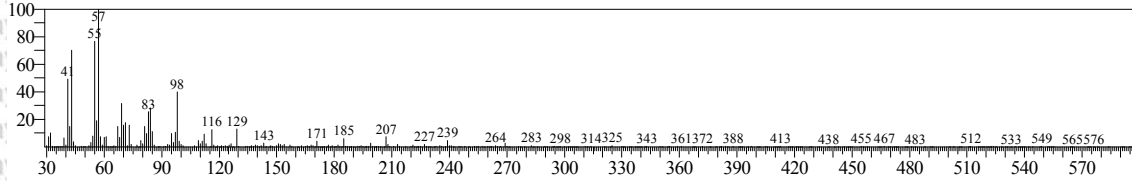
Hit#4 Entry:69042 Library:WILEY7.LIB
 SI:86 Formula:C13 H22 CAS:74744-41-5 MolWeight:178 RetIndex:0
 CompName:3-Tridecen-1-yne, (E)- (CAS)



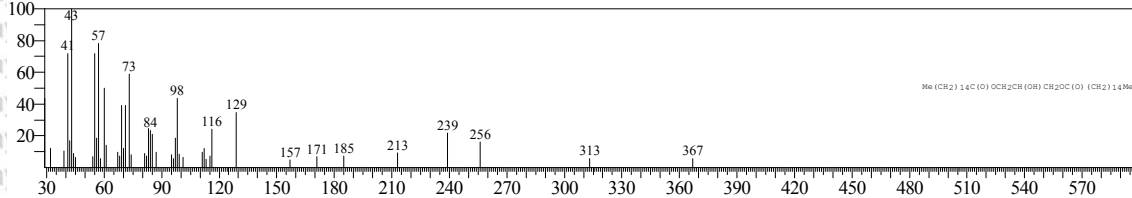
Hit#5 Entry:121058 Library:WILEY7.LIB
 SI:86 Formula:C15 H24 O CAS:1139-30-6 MolWeight:220 RetIndex:0
 CompName:(-)-Caryophyllene oxide \$\$ (-)-5-Oxatricyclo[8.2.0.0(4,6)]dodecane-,12-trimethyl-9-methylene-, [1R-(1R*,4R*,6R*,10S*)]- (CAS) (-)-beta.-Caryo



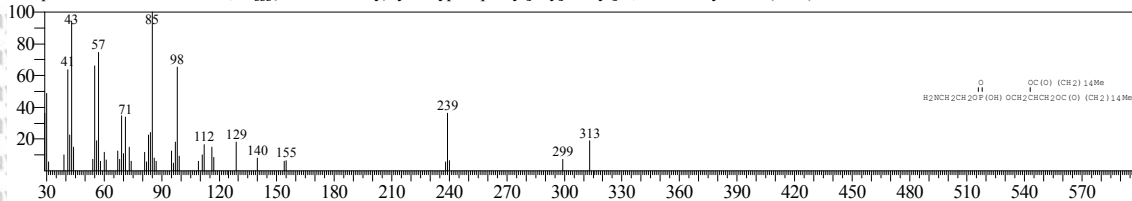
<< Target >>
 Line#:10 R.Time:35.715(Scan#:6544) MassPeaks:339
 RawMode:Averaged 35.710-35.720(6543-6545) BasePeak:57.00(7971)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



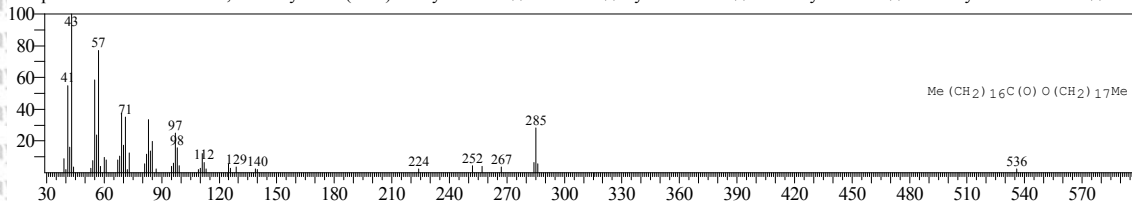
Hit#:1 Entry:326223 Library:WILEY7.LIB
 SI:83 Formula:C35 H68 O5 CAS:502-52-3 MolWeight:569 RetIndex:0
 CompName:Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1,3-propanediyl ester (CAS) GLYCEROL 1,3-DIHEXADECANOATE \$\$ 1,3-Dipalmitin \$\$ Palmitin, 1,3-di- \$\$ 1,3-



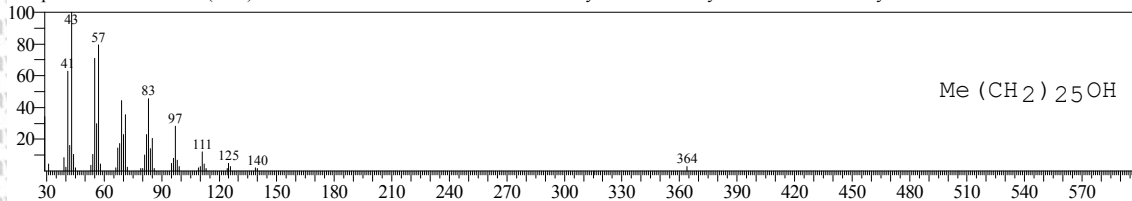
Hit#:2 Entry:333908 Library:WILEY7.LIB
 SI:82 Formula:C37 H74 N O8 P CAS:3026-45-7 MolWeight:692 RetIndex:0
 CompName:Hexadecanoic acid, 1-[[[(2-aminoethoxy)hydroxyphosphinyl]oxy]methyl]-1,2-ethanediyl ester (CAS) DIPALMITOYL PHOSPHATIDYL ETHANO



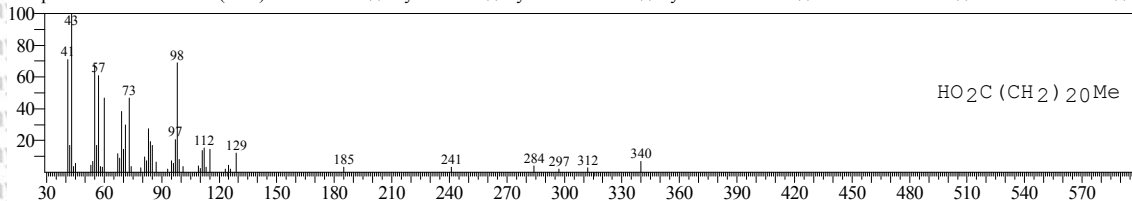
Hit#:3 Entry:322517 Library:WILEY7.LIB
 SI:82 Formula:C36 H72 O2 CAS:2778-96-3 MolWeight:537 RetIndex:0
 CompName:Octadecanoic acid, octadecyl ester (CAS) Stearyl stearate \$\$ FE 78-18 \$\$ Cyclochem SS \$\$ Octadecyl stearate \$\$ Octadecyl octadecanoate \$\$ Stear



Hit#:4 Entry:274885 Library:WILEY7.LIB
 SI:82 Formula:C26 H54 O CAS:506-52-5 MolWeight:382 RetIndex:0
 CompName:1-Hexacosanol (CAS) HEXACOSANOL-1 \$\$ n-Hexacosanol \$\$ Ceryl alcohol \$\$ Cerylic alcohol \$\$ Hexacosyl alcohol \$\$

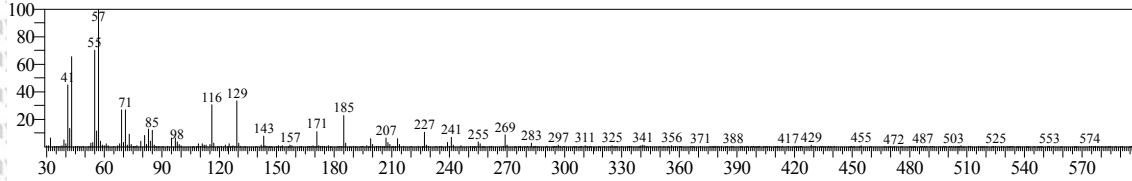


Hit#:5 Entry:247103 Library:WILEY7.LIB
 SI:82 Formula:C22 H44 O2 CAS:112-85-6 MolWeight:340 RetIndex:0
 CompName:Docosanoic acid (CAS) Behenic acid \$\$ Glycon B-70 \$\$ Hydrofol 2022-55 \$\$ Hydrofol Acid 560 \$\$ n-Docosanoic acid \$\$ 1-Docosanoic acid \$\$

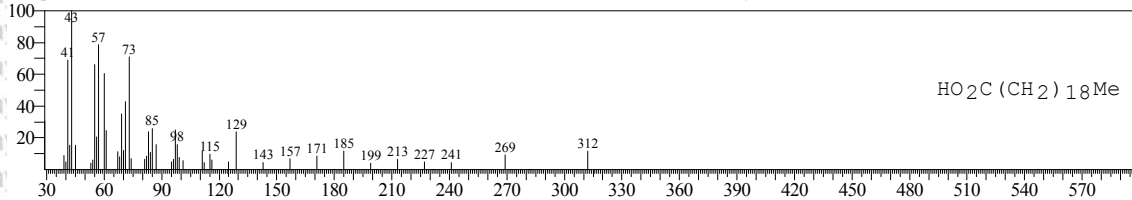


<< Target >>

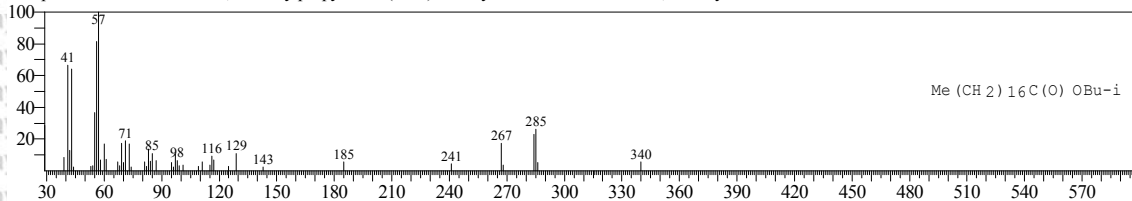
Line#:11 R.Time:35.800(Scan#:6561) MassPeaks:329
RawMode:Averaged 35.795-35.805(6560-6562) BasePeak:57.00(4903)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



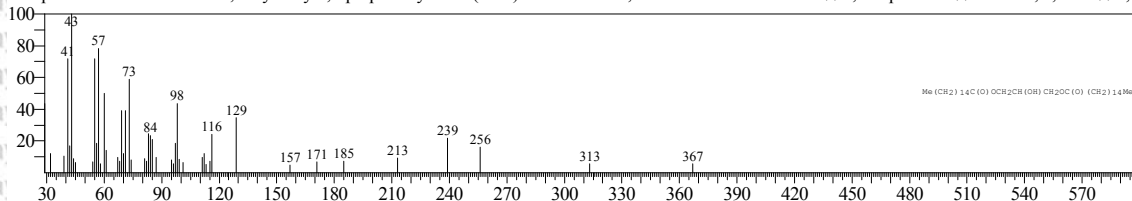
Hit#:1 Entry:223354 Library:WILEY7.LIB
SI:75 Formula:C20 H40 O2 CAS:506-30-9 MolWeight:312 RetIndex:0
CompName:Eicosanoic acid (CAS) Arachidic acid \$\$ Arachic acid \$\$ Icosanoic acid \$\$ Arachidic acid,synthetic \$\$ n-Eicosanoic acid \$\$ ARACHINSAEURE \$



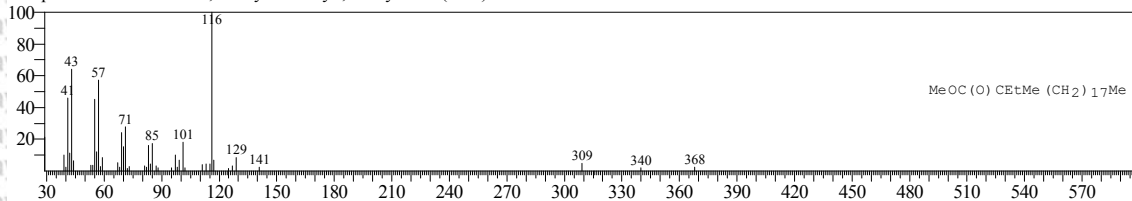
Hit#:2 Entry:246920 Library:WILEY7.LIB
SI:74 Formula:C22 H44 O2 CAS:646-13-9 MolWeight:340 RetIndex:0
CompName:Octadecanoic acid, 2-methylpropyl ester (CAS) Isobutyl stearate \$\$ Stearic acid, isobutyl ester \$\$



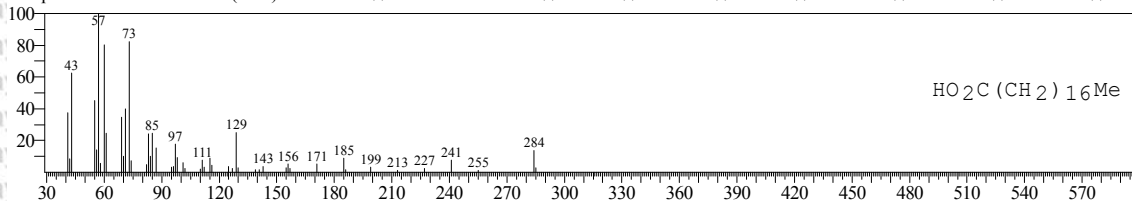
Hit#:3 Entry:326223 Library:WILEY7.LIB
SI:74 Formula:C35 H68 O5 CAS:502-52-3 MolWeight:569 RetIndex:0
CompName:Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1,3-propanediyl ester (CAS) GLYCEROL 1,3-DIHEXADECANOATE \$\$ 1,3-Dipalmitin \$\$ Palmitin, 1,3-di- \$\$ 1,3-



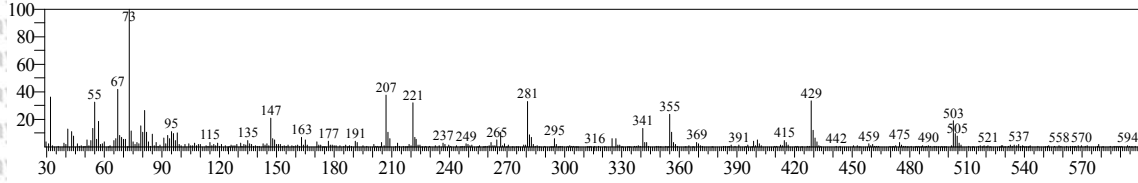
Hit#:4 Entry:266412 Library:WILEY7.LIB
SI:74 Formula:C24 H48 O2 CAS:55282-04-7 MolWeight:368 RetIndex:0
CompName:Eicosanoic acid, 2-ethyl-2-methyl-, methyl ester (CAS) METHYL 2-METHYL-2-ETHYLEICOSANOATE \$\$



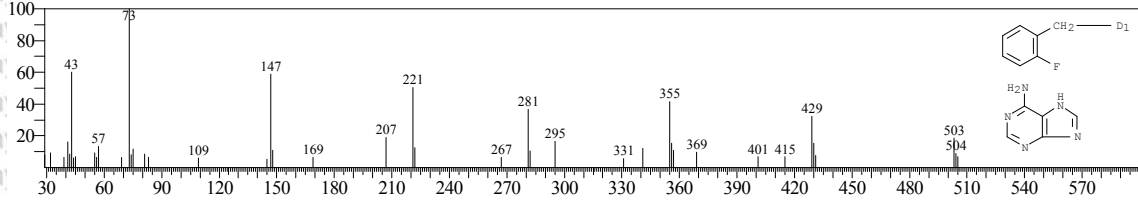
Hit#:5 Entry:195578 Library:WILEY7.LIB
SI:74 Formula:C18 H36 O2 CAS:57-11-4 MolWeight:284 RetIndex:0
CompName:Octadecanoic acid (CAS) Stearic acid \$\$ n-Octadecanoic acid \$\$ PD 185 \$\$ NAA 173 \$\$ Vanicol \$\$ Kam 3000 \$\$ Kam 1000 \$\$ Kam 2000 \$\$ Neo-



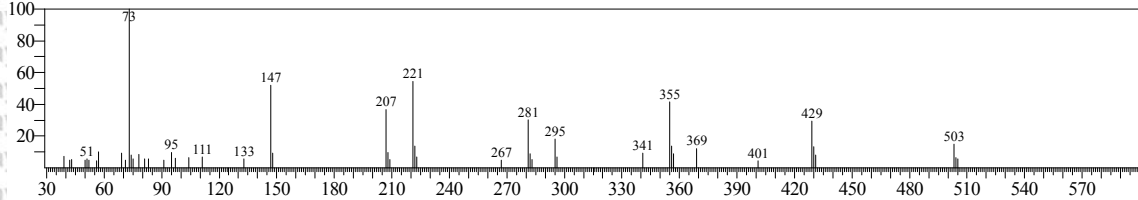
<< Target >>
 Line#:12 R.Time:37.670(Scan#:6935) MassPeaks:388
 RawMode:Averaged 37.665-37.675(6934-6936) BasePeak:73.00(2587)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



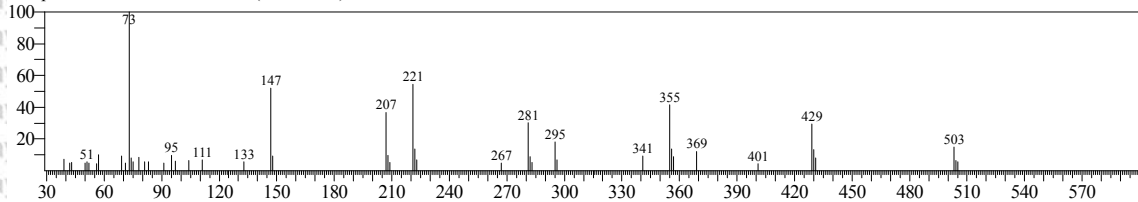
Hit#:1 Entry:148639 Library:WILEY7.LIB
 SI:70 Formula:C12 H10 F N5 CAS:74421-44-6 MolWeight:243 RetIndex:0
 CompName:1H-Purin-6-amine, [(2-fluorophenyl)methyl]- (CAS)



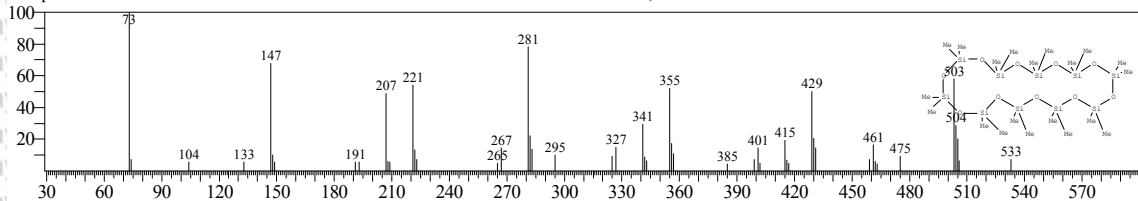
Hit#:2 Entry:300653 Library:WILEY7.LIB
 SI:68 Formula:C21 H22 FE N2 O5 CAS:109007-87-6 MolWeight:438 RetIndex:0
 CompName:Iron, monocarbonyl-(1,3-butadiene-1,4-dicarboxylic acid, diethyl ester) a,a'-dipyridyl \$IRON, (2,2'-BIPYRIDINE-N,N')CARBONYL[(2,3,4,5-ETA



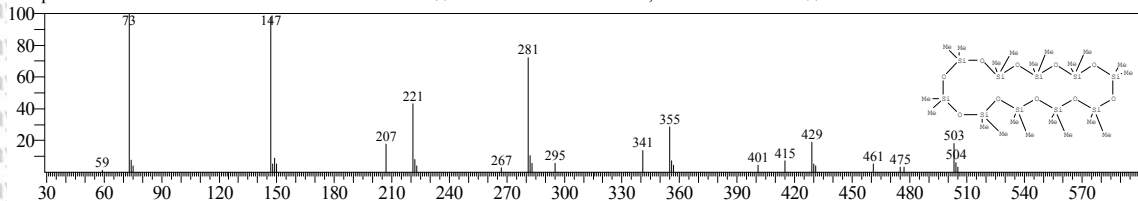
Hit#:3 Entry:338296 Library:WILEY7.LIB
 SI:68 Formula: CAS:0-00-0 MolWeight:9999 RetIndex:0
 CompName:SILIKONFETT SE30 (GREVELS) \$\$ Silicone oil \$\$



Hit#:4 Entry:335376 Library:WILEY7.LIB
 SI:60 Formula:C20 H60 O10 SI10 CAS:18772-36-6 MolWeight:740 RetIndex:0
 CompName:EICOSAMETHYLCYCLODECASILOXANE \$\$ CYCLODECASILOXANE, EICOSAMETHYL- \$\$



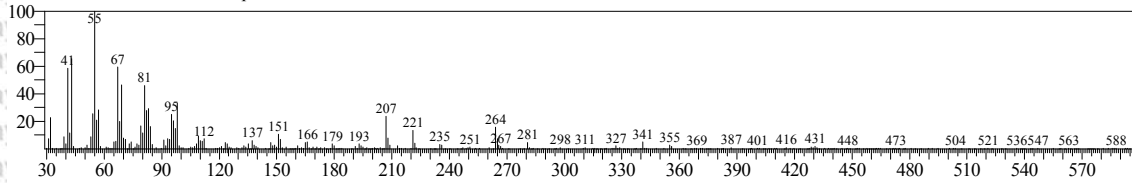
Hit#:5 Entry:335377 Library:WILEY7.LIB
 SI:60 Formula:C20 H60 O10 SI10 CAS:18772-36-6 MolWeight:740 RetIndex:0
 CompName:EICOSAMETHYLCYCLODECASILOXANE \$\$ CYCLODECASILOXANE, EICOSAMETHYL- \$\$



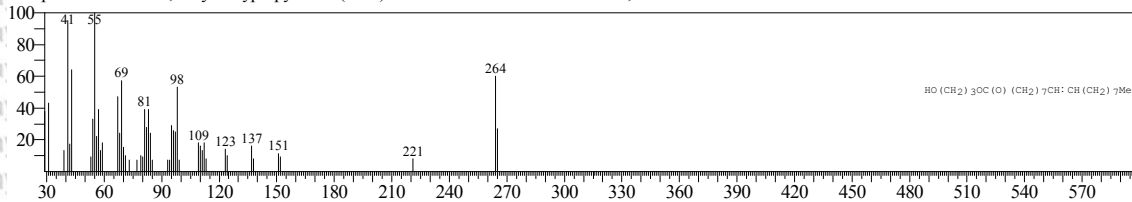


<< Target >>

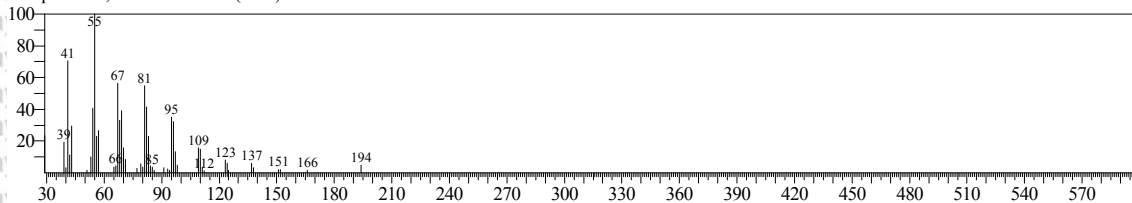
Line#:13 R.Time:37.795(Scan#:6960) MassPeaks:334
RawMode:Averaged 37.790-37.800(6959-6961) BasePeak:55.00(4813)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



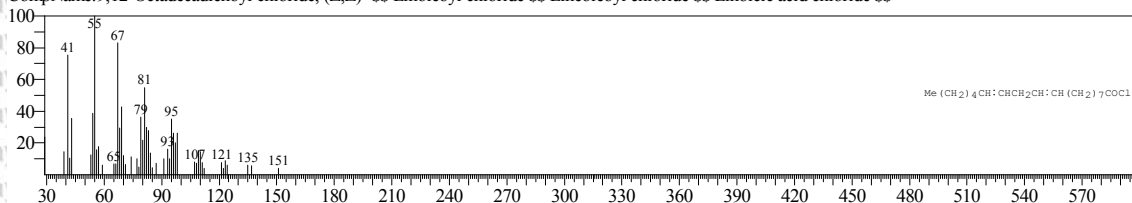
Hit#:1 Entry:246839 Library:WILEY7.LIB
SI:83 Formula:C21 H40 O3 CAS:821-17-0 MolWeight:340 RetIndex:0
CompName:Oleic acid, 3-hydroxypropyl ester (CAS) 1-O-CIS-9-OCTADECENOYL-1,3-PROPANEDIOL \$\$



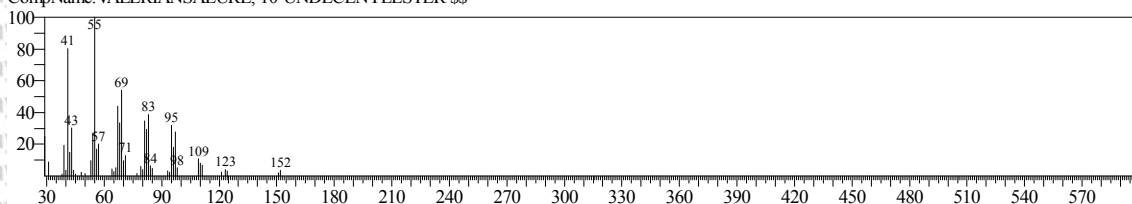
Hit#:2 Entry:88007 Library:WILEY7.LIB
SI:83 Formula:C14 H26 CAS:112929-06-3 MolWeight:194 RetIndex:0
CompName:1,9-Tetradecadiene (CAS)



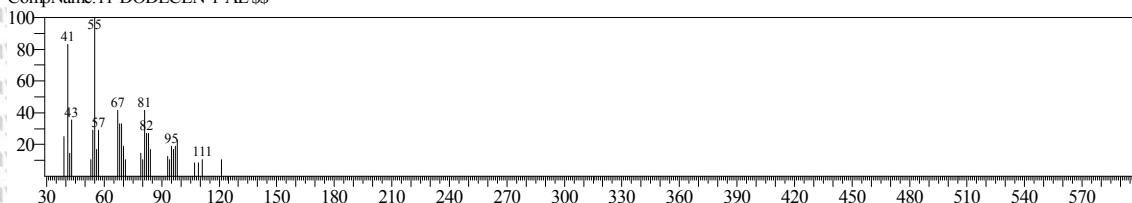
Hit#:3 Entry:209385 Library:WILEY7.LIB
SI:83 Formula:C18 H31 Cl O CAS:7459-33-8 MolWeight:298 RetIndex:0
CompName:9,12-Octadecadienoyl chloride, (Z,Z)- \$\$ Linoleoyl chloride \$\$ Lineoleoyl chloride \$\$ Linoleic acid chloride \$\$



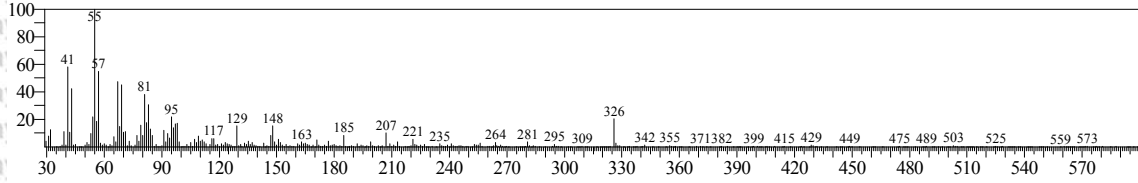
Hit#:4 Entry:161847 Library:WILEY7.LIB
SI:82 Formula:C16 H30 O2 CAS:0-00-0 MolWeight:254 RetIndex:0
CompName:VALERIANSAEURE, 10-UNDECENYLESTER \$\$



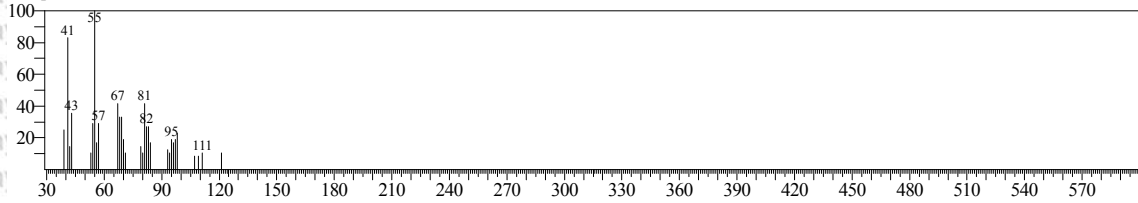
Hit#:5 Entry:73943 Library:WILEY7.LIB
SI:82 Formula:C12 H22 O CAS:0-00-0 MolWeight:182 RetIndex:0
CompName:11-DODECEN-1-AL \$\$



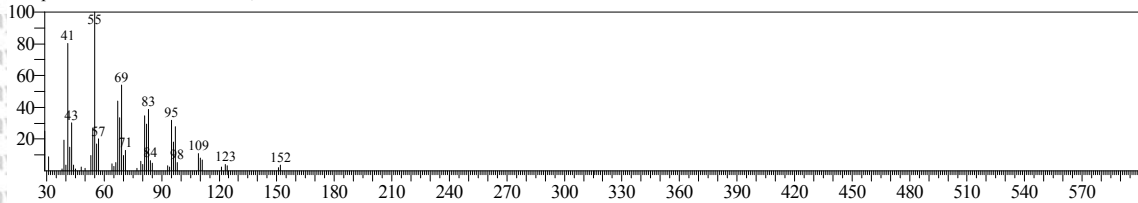
<< Target >>
 Line#:14 R.Time:38.590(Scan#:7119) MassPeaks:390
 RawMode:Averaged 38.585-38.595(7118-7120) BasePeak:55.00(9534)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



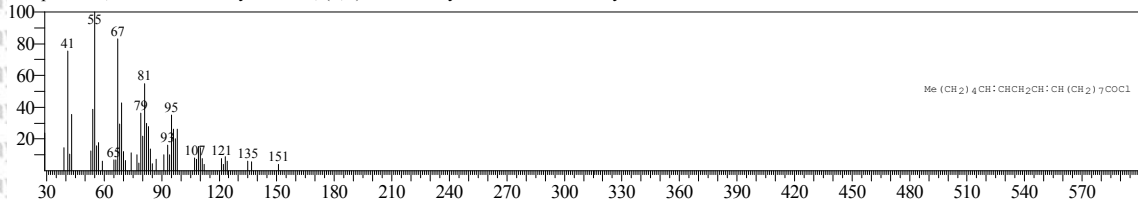
Hit#:1 Entry:73943 Library:WILEY7.LIB
 SI:83 Formula:C12 H22 O CAS:0-00-0 MolWeight:182 RetIndex:0
 CompName:11-DODECEN-1-AL \$\$



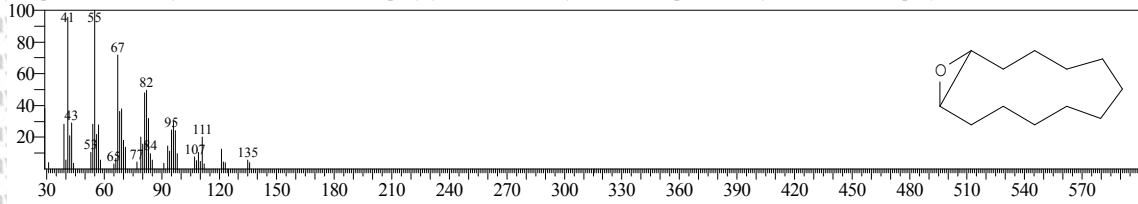
Hit#:2 Entry:161847 Library:WILEY7.LIB
 SI:82 Formula:C16 H30 O2 CAS:0-00-0 MolWeight:254 RetIndex:0
 CompName:VALERIANSAEURE, 10-UNDECENYLESTER \$\$



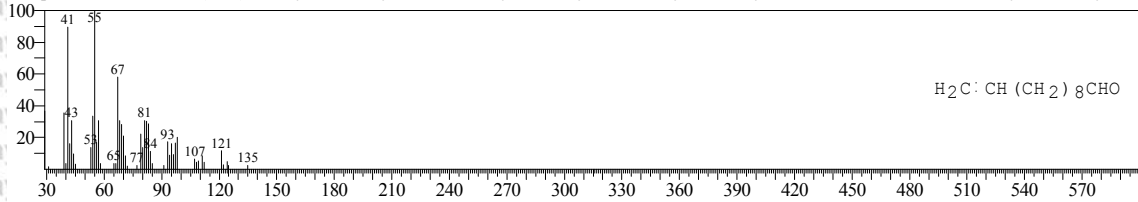
Hit#:3 Entry:209385 Library:WILEY7.LIB
 SI:81 Formula:C18 H31 Cl O CAS:7459-33-8 MolWeight:298 RetIndex:0
 CompName:9,12-Octadecadienoyl chloride, (Z,Z)- \$\$ Linoleoyl chloride \$\$ Lineoleyl chloride \$\$ Linoleic acid chloride \$\$



Hit#:4 Entry:74531 Library:WILEY7.LIB
 SI:81 Formula:C12 H22 O CAS:286-99-7 MolWeight:182 RetIndex:0
 CompName:13-Oxabicyclo[10.1.0]tridecane (CAS) Epoxycyclododecane \$\$ Cyclododecene epoxide \$\$ Cyclododecane, 1,2-epoxy- \$\$

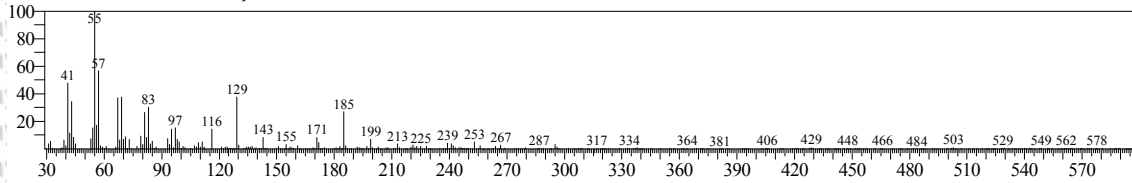


Hit#:5 Entry:58829 Library:WILEY7.LIB
 SI:81 Formula:C11 H20 O CAS:112-45-8 MolWeight:168 RetIndex:0
 CompName:10-Undecenal (CAS) Undecylenic aldehyde \$\$ 10-Undecylenaldehyde \$\$ Undecylene aldehyde \$\$ 10-Undecen-1-al \$\$ n-Undecylenic aldehyde \$\$



<< Target >>

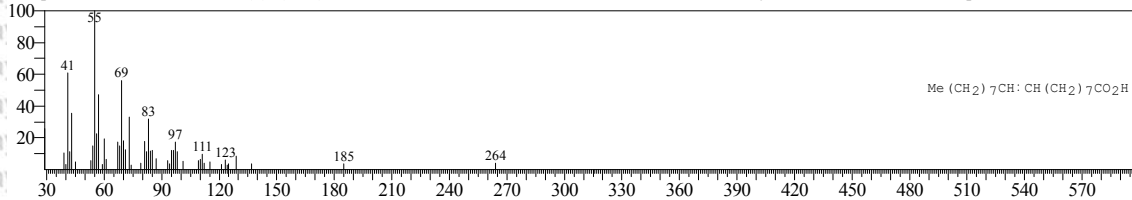
Line#:15 R.Time:38.670(Scan#:7135) MassPeaks:318
RawMode:Averaged 38.665-38.675(7134-7136) BasePeak:55.00(5951)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



Hit#:1 Entry:193350 Library:WILEY7.LIB

SI:79 Formula:C18 H34 O2 CAS:112-80-1 MolWeight:282 RetIndex:0

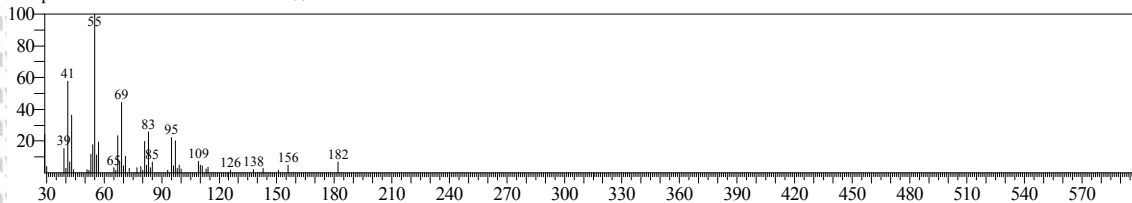
CompName:9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) Oleic acid \$\$ Red oil \$\$ Oelsauree \$\$ Oleine 7503 \$\$ Pamolyn 100 \$\$ Emersol 211 \$\$ Vopcolene 27 \$\$ cis-Oleic a



Hit#:2 Entry:94069 Library:WILEY7.LIB

SI:78 Formula:C11 H21 N O2 CAS:0-00-0 MolWeight:199 RetIndex:0

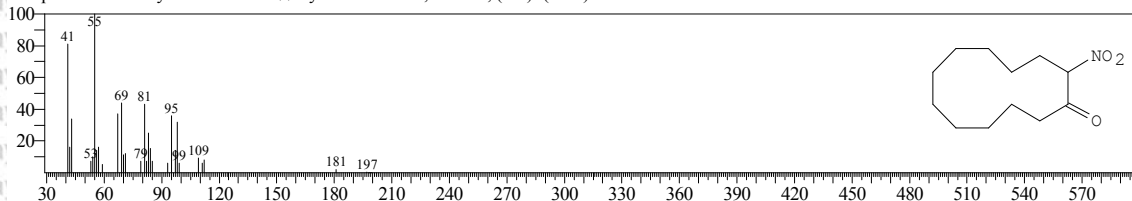
CompName:6-NITRO-UNDEC-5-ENE \$\$



Hit#:3 Entry:129462 Library:WILEY7.LIB

SI:78 Formula:C12 H21 N O3 CAS:95338-32-2 MolWeight:227 RetIndex:0

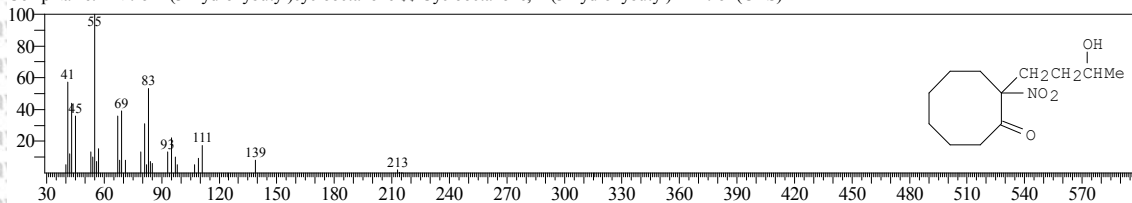
CompName:2-Nitrocyclododecanone \$\$ Cyclododecanone, 2-nitro-, (+,-)- (CAS)



Hit#:4 Entry:148658 Library:WILEY7.LIB

SI:77 Formula:C12 H21 N O4 CAS:86911-18-4 MolWeight:243 RetIndex:0

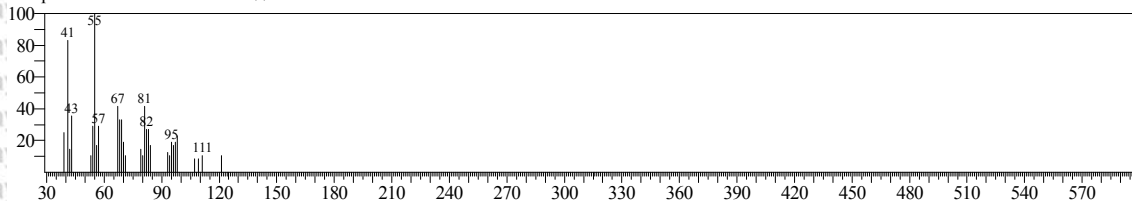
CompName:2-Nitro-2-(3-hydroxybutyl)cyclooctanone \$\$ Cyclooctanone, 2-(3-hydroxybutyl)-2-nitro- (CAS)



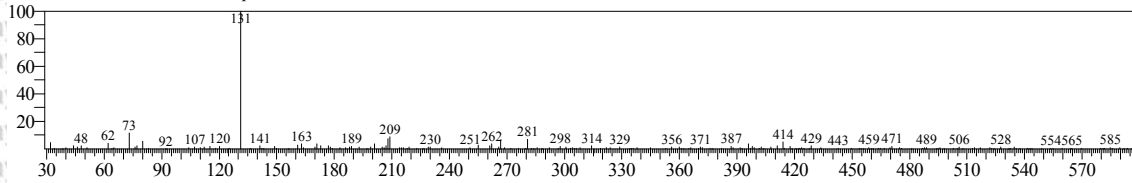
Hit#:5 Entry:73943 Library:WILEY7.LIB

SI:77 Formula:C12 H22 O MolWeight:182 RetIndex:0

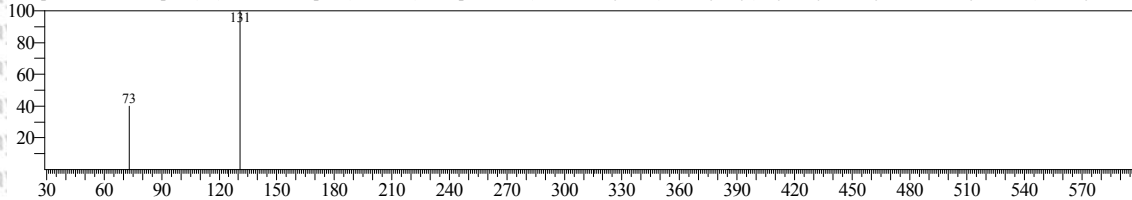
CompName:11-DODECEN-1-AL \$\$



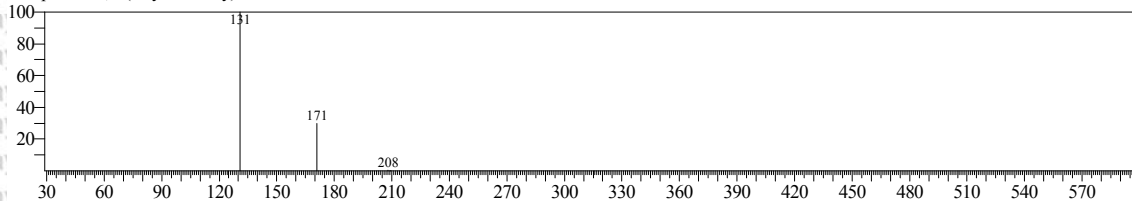
<< Target >>
 Line#: 18 R-Time: 41.635(Scan#: 7728) MassPeaks: 196
 RawMode: Averaged 41.635-41.640(7728-7729) BasePeak: 131.05(1085)
 BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



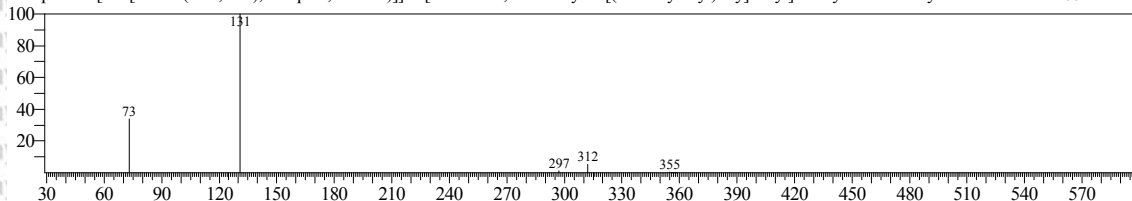
Hit#: 1 Entry: 310121 Library: WILEY7.LIB
 SI: 61 Formula: C₃₀H₅₀O₂ SI CAS: 0-00-0 MolWeight: 470 RetIndex: 0
 CompName: [1R-[1.alpha.(R*),3a.beta.,4.alpha.(1R*,5R*),7a.alpha.]]-1-[(1,5-Dimethyl-5-[(trimethylsilyloxy)hexyl]octahydro-7a-methyl-4-[2-[(2-methylenebic



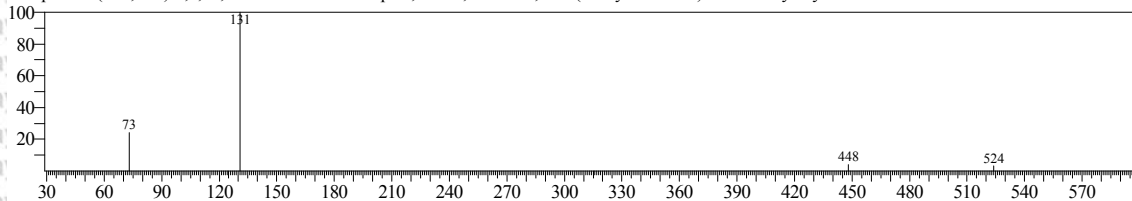
Hit#: 2 Entry: 112765 Library: WILEY7.LIB
 SI: 61 Formula: C₁₂H₂₂O₃ CAS: 0-00-0 MolWeight: 214 RetIndex: 0
 CompName: 3,3-(ethylenedioxy)decanal SS



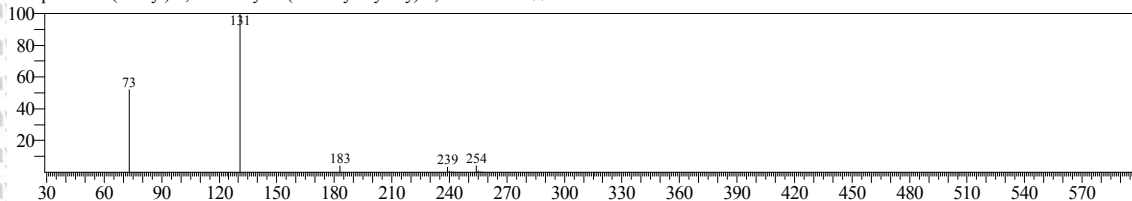
Hit#: 3 Entry: 267587 Library: WILEY7.LIB
 SI: 61 Formula: C₂₁H₃₉F O₂ SI CAS: 112139-03-4 MolWeight: 370 RetIndex: 0
 CompName: [1R-[1.beta.(1R*,4R*),3a.alpha.,7a.beta.]]-1-[4-fluoro-1,5-dimethyl-5-[(trimethylsilyloxy)hexyl]octahydro-7a-methyl-4H-inden-4-one SS



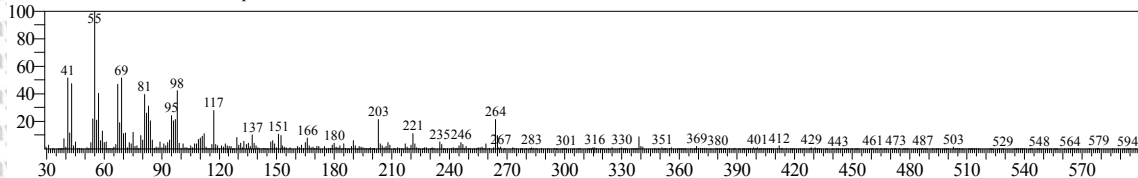
Hit#: 4 Entry: 328946 Library: WILEY7.LIB
 SI: 60 Formula: C₃₄H₅₂O₇ SI CAS: 0-00-0 MolWeight: 600 RetIndex: 0
 CompName: (20S,22E)-5,7,22,24-cholestatetraen-1.alpha.,3.beta.,24-triol 1,3-bis(methylcarbonate) 24-trimethylsilyl ether SS



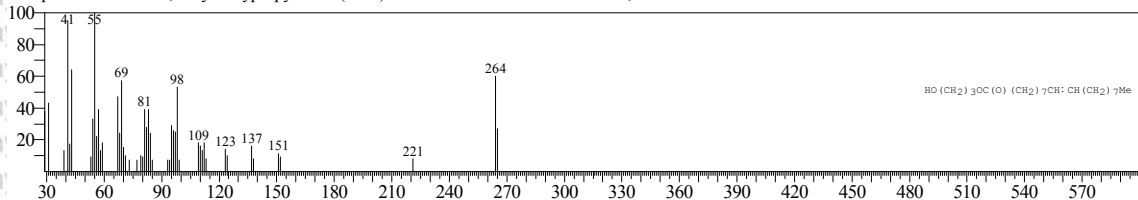
Hit#: 5 Entry: 161689 Library: WILEY7.LIB
 SI: 60 Formula: C₁₅H₃₀O SI CAS: 133795-57-0 MolWeight: 254 RetIndex: 0
 CompName: 4-(t-butyl)-2,5-dimethyl-5-(trimethylsilyloxy)-2,3-hexadiene SS



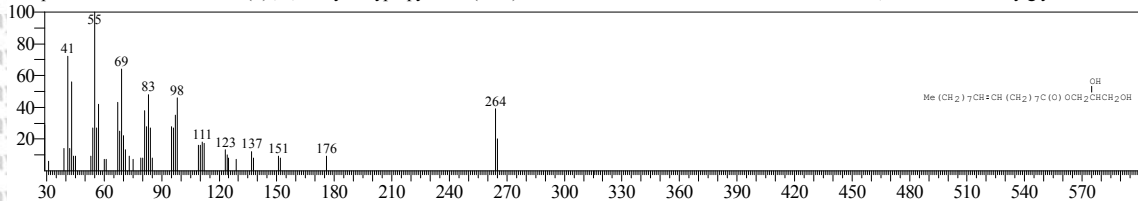
<< Target >>
 Line#:19 R.Time:41.700(Scan#:7741) MassPeaks:394
 RawMode:Averaged 41.695-41.705(7740-7742) BasePeak:55.00(13821)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



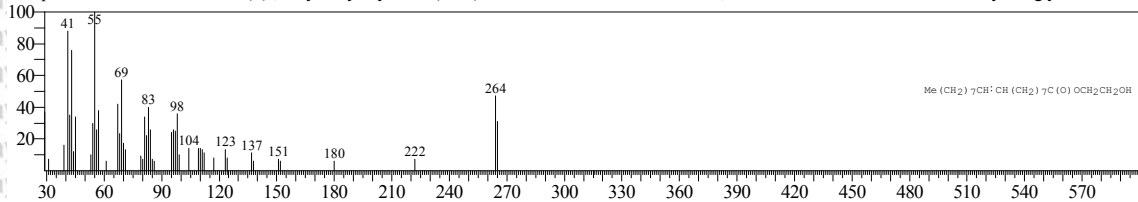
Hit#:1 Entry:246839 Library:WILEY7.LIB
 SI:84 Formula:C21 H40 O3 CAS:821-17-0 MolWeight:340 RetIndex:0
 CompName:Oleic acid, 3-hydroxypropyl ester (CAS) 1-O-CIS-9-OCTADECENOYL-1,3-PROPANEDIOL \$\$



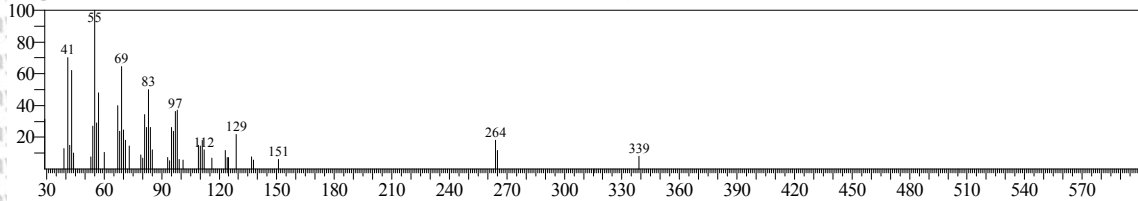
Hit#:2 Entry:258684 Library:WILEY7.LIB
 SI:84 Formula:C21 H40 O4 CAS:111-03-5 MolWeight:356 RetIndex:0
 CompName:9-Octadecenoic acid (Z)-, 2,3-dihydroxypropyl ester (CAS) 1-Monoolein \$\$ Aldo MO \$\$ Aldo HMO \$\$ Olein, 1-mono- \$\$ 1-Oleylglycerol \$\$ Mon



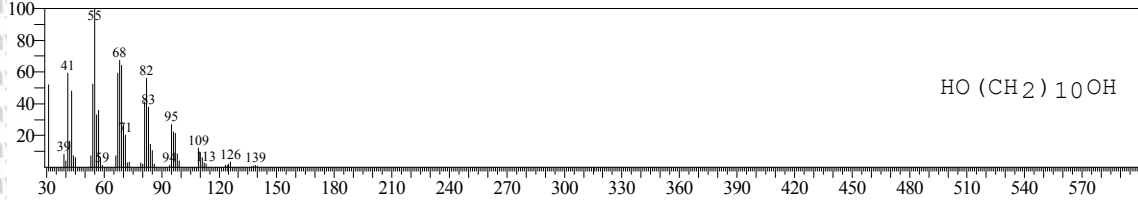
Hit#:3 Entry:235405 Library:WILEY7.LIB
 SI:82 Formula:C20 H38 O3 CAS:4500-01-0 MolWeight:326 RetIndex:0
 CompName:9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hydroxyethyl ester (CAS) 1-O-CIS-9-OCTADECENOYL-1,2-ETHANEDIOL \$\$ Cithrol A \$\$ Ethylene glycol oleate \$\$



Hit#:4 Entry:330530 Library:WILEY7.LIB
 SI:82 Formula:C39 H72 O5 CAS:2465-32-9 MolWeight:621 RetIndex:0
 CompName:DI-(9-OCTADECENOYL)-GLYCEROL \$\$ 9-OCTADECENOIC ACID (Z)-, 2-HYDROXY-1,3-PROPANEDIYL ESTER \$\$



Hit#:5 Entry:65234 Library:WILEY7.LIB
 SI:80 Formula:C10 H22 O2 CAS:112-47-0 MolWeight:174 RetIndex:0
 CompName:1,10-Decanediol (CAS) Decane-1,10-diol \$\$ N-DECANE-1,10-DIOL \$\$ Decamethylenediol \$\$ Decamethylene glycol \$\$ 1,10-Decamethylenediol \$\$



Method

[Comment]

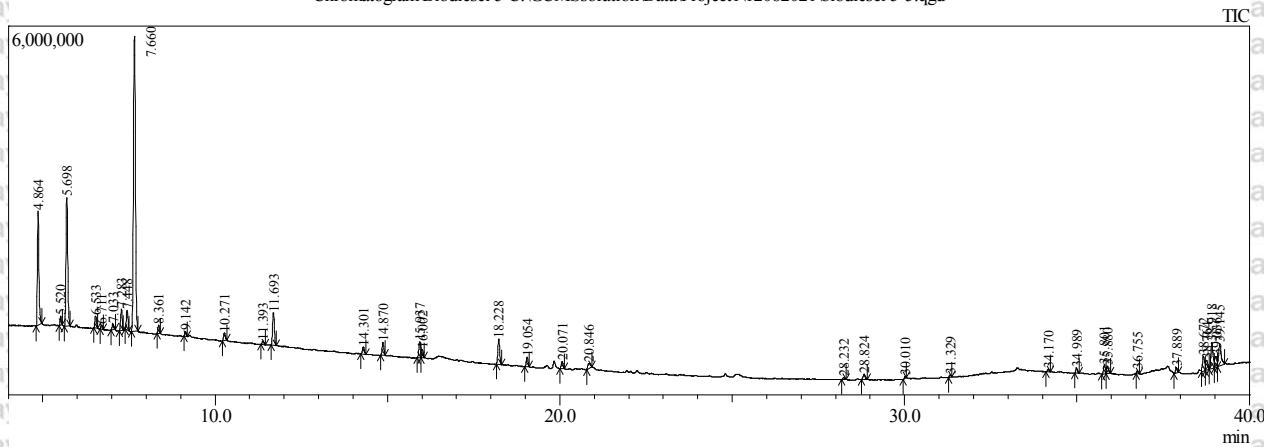
==== Analytical Line 1 =====

[AOC-20i+s]
 # of Rinses with Presolvent :2
 # of Rinses with Solvent(post) :10
 # of Rinses with Sample :2





Chromatogram Biodiesel 5 C:\GCMSsolution\Data\Project1\12082021\biodiesel 5-5.qgd



Quantitative Result Table

ID#	Name	R.Time	m/z	Area	Height	Conc.	Conc.Unit	R.Index
1	2,4-Pentanediol, 2-methyl- (CAS) 2-Methyl-2,4	4.864	59.00	1880516	585123	19.538 %		0
2	2-Propanol, 1-butoxy- (CAS) 1-N-BUTOXY-2-	5.519	45.00	87483	26868	0.909 %		0
3	cis-Ocimene	5.697	93.00	1639048	474015	17.029 %		0
4	2-BETA-PINENE	6.534	93.00	118414	35652	1.230 %		0
5	.beta.-Myrcene	6.711	41.00	56507	17375	0.587 %		0
6	Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl- (CAS) 2,2,4,6,	7.031	57.00	154911	49094	1.609 %		0
7	1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-, (E)- (CAS) .BE	7.282	93.00	208986	60951	2.171 %		0
8	Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) p-	7.446	119.00	184782	54975	1.920 %		0
9	1,8-Cineole	7.658	43.00	2848685	718389	29.596 %		0
10	.gamma.-Terpinene	8.362	93.00	81628	24490	0.848 %		0
11	Cyclohexene, 4-methyl-3-(1-methylethylidene)-	9.143	93.00	39586	12150	0.411 %		0
12	Camphor	10.272	81.00	51347	13457	0.533 %		0
13	3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)	11.396	71.00	38040	10712	0.395 %		0
14	3-Cyclohexene-1-methanol, .alpha.,.alpha.,4-tri	11.694	59.00	390430	109136	4.056 %		0
15	2,4-Decadienal, (E,Z)- (CAS) trans,cis-2,4-Dec	14.299	81.00	122446	28448	1.272 %		0
16	2,4-Decadienal, (E,E)- (CAS) trans,trans-2,4-D	14.871	81.00	236481	65570	2.457 %		0
17	Phenol, 2-methoxy-4-(2-propenyl)- (CAS) Eug	15.935	164.00	110701	29955	1.150 %		0
18	1-P-MENTHEN-8-YLACETATE	16.010	43.00	79196	19763	0.823 %		0
19	trans-Caryophyllene	18.229	41.00	137598	37310	1.430 %		0
20	.alpha.-Humulene	19.054	93.00	88241	24988	0.917 %		0
21	5BH,7B,10A,-SELINA-4(14),11-DIENE	20.071	32.00	29189	9823	0.303 %		0
22	TETRADECAMETHYLCYCLOHEPTASILO	20.842	32.00	127568	21818	1.325 %		0
23	1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13-TETRADECAN	28.234	73.00	35536	8954	0.369 %		0
24	1,11-Dodecadiene (CAS)	28.824	55.00	61743	13547	0.641 %		0
25	9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) Oleic acid	30.007	43.00	15972	3978	0.166 %		0
26	1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13,15,15-HEXADI	31.330	73.00	25107	6794	0.261 %		0
27	1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13,15,15-HEXADI	34.172	73.00	21788	6827	0.226 %		0
28	Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1-(hydroxymeth	34.994	43.00	32474	9325	0.337 %		0
29	Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1,3-propanediyl	35.801	57.00	77297	20943	0.803 %		0
30	Eicosanoic acid (CAS) Arachidic acid	35.876	57.00	82816	15894	0.860 %		0
31	OCTADECAMETHYLCYCLONONASILOX	36.756	73.00	22946	7155	0.238 %		0
32	Oleic acid, 3-hydroxypropyl ester (CAS) 1-O-C	37.889	55.00	32963	9680	0.342 %		0
33	VALERIANSAEURE, 10-UNDECENYLESTE	38.674	55.00	96861	23047	1.006 %		0
34	9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) Oleic acid	38.766	55.00	90667	18560	0.942 %		0
35	Hexadecanoic acid, 3-[(trimethylsilyl)oxy]prop	38.918	130.00	140518	33485	1.460 %		0
36	Hexadecanoic acid, 3-[(trimethylsilyl)oxy]prop	39.035	130.00	80012	15833	0.831 %		0
37	Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1-(hydroxymeth	39.143	43.00	96627	19186	1.004 %		0

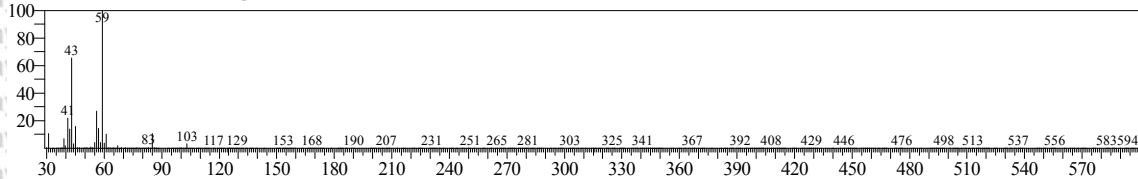
Library



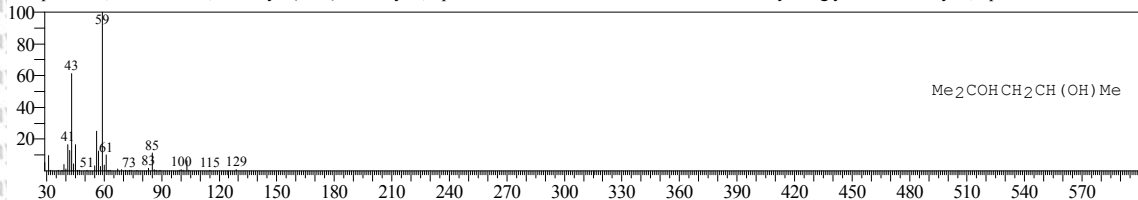


<< Target >>

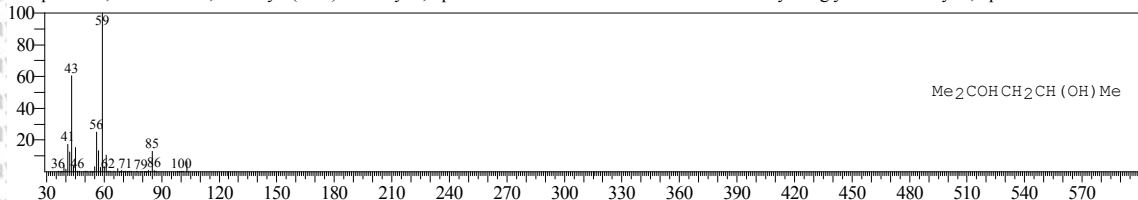
Line#: 1 R.Time: 4.865(Scan#: 374) MassPeaks: 342
RawMode: Averaged 4.860-4.870(373-375) BasePeak: 59.00(569720)
BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



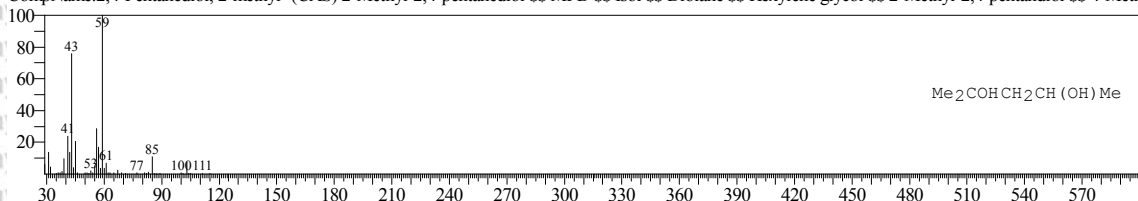
Hit#: 1 Entry: 14661 Library: WILEY7.LIB
SI: 97 Formula: C₆H₁₄O₂ CAS: 107-41-5 MolWeight: 118 RetIndex: 0
CompName: 2,4-Pentenediol, 2-methyl- (CAS) 2-Methyl-2,4-pentenediol \$\$ MPD \$\$ Isol \$\$ Diolane \$\$ Hexylene glycol \$\$ 2-Methyl-2,4-pentandiol \$\$ 4-Meth



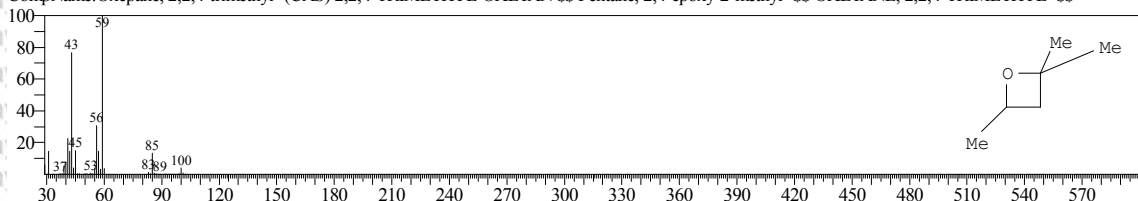
Hit#: 2 Entry: 14658 Library: WILEY7.LIB
SI: 96 Formula: C₆H₁₄O₂ CAS: 107-41-5 MolWeight: 118 RetIndex: 0
CompName: 2,4-Pentenediol, 2-methyl- (CAS) 2-Methyl-2,4-pentenediol \$\$ MPD \$\$ Isol \$\$ Diolane \$\$ Hexylene glycol \$\$ 2-Methyl-2,4-pentandiol \$\$ 4-Meth



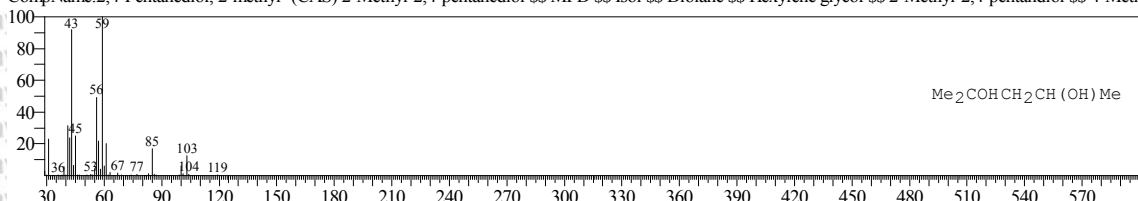
Hit#: 3 Entry: 14659 Library: WILEY7.LIB
SI: 95 Formula: C₆H₁₄O₂ CAS: 107-41-5 MolWeight: 118 RetIndex: 0
CompName: 2,4-Pentenediol, 2-methyl- (CAS) 2-Methyl-2,4-pentenediol \$\$ MPD \$\$ Isol \$\$ Diolane \$\$ Hexylene glycol \$\$ 2-Methyl-2,4-pentandiol \$\$ 4-Meth



Hit#: 4 Entry: 7146 Library: WILEY7.LIB
SI: 94 Formula: C₆H₁₂O CAS: 23120-44-7 MolWeight: 100 RetIndex: 0
CompName: Oxepane, 2,2,4-trimethyl- (CAS) 2,2,4-TRIMETHYL-OXETAN \$\$ Pentane, 2,4-epoxy-2-methyl- \$\$ OXETANE, 2,2,4-TRIMETHYL- \$\$



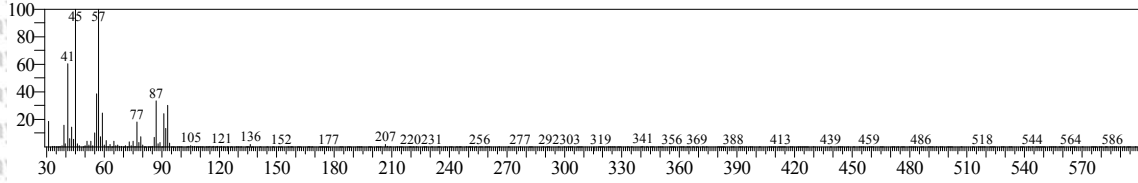
Hit#: 5 Entry: 14660 Library: WILEY7.LIB
SI: 91 Formula: C₆H₁₄O₂ CAS: 107-41-5 MolWeight: 118 RetIndex: 0
CompName: 2,4-Pentenediol, 2-methyl- (CAS) 2-Methyl-2,4-pentenediol \$\$ MPD \$\$ Isol \$\$ Diolane \$\$ Hexylene glycol \$\$ 2-Methyl-2,4-pentandiol \$\$ 4-Meth



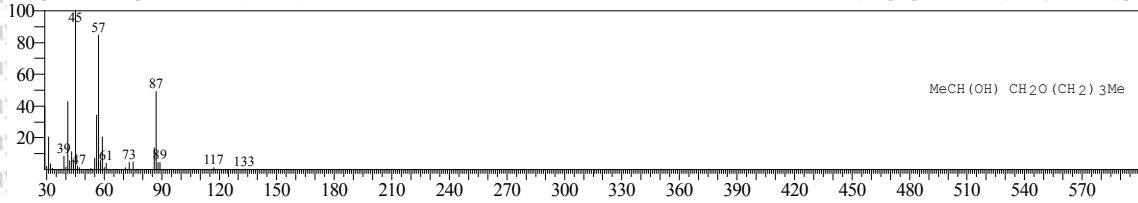


<< Target >>

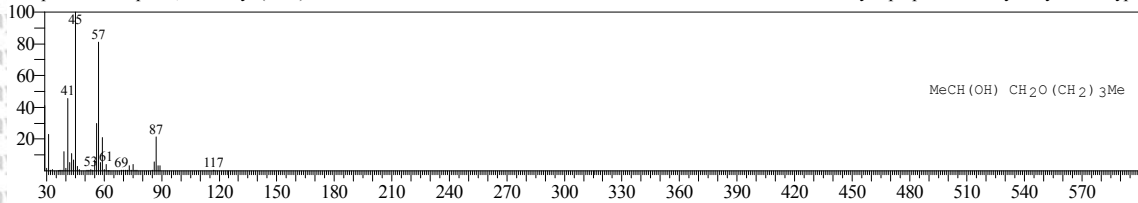
Line#:2 R.Time:5.520(Scan#:505) MassPeaks:316
RawMode:Averaged 5.515-5.525(504-506) BasePeak:44.95(23056)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



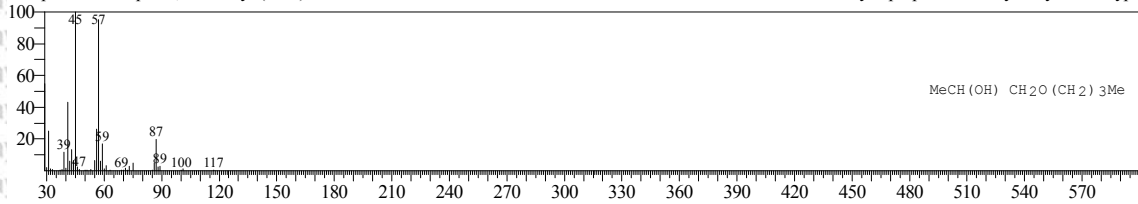
Hit#:1 Entry:23072 Library:WILEY7.LIB
SI:84 Formula:C7 H16 O2 CAS:5131-66-8 MolWeight:132 RetIndex:0
CompName:2-Propanol, 1-butoxy- (CAS) 1-N-BUTOXY-2-PROPANOL \$\$ 1-N-BUTOXYISOPROPANOL \$\$ 1-Butoxy-2-propanol \$\$ 2-Hydroxy-3-butoxypr



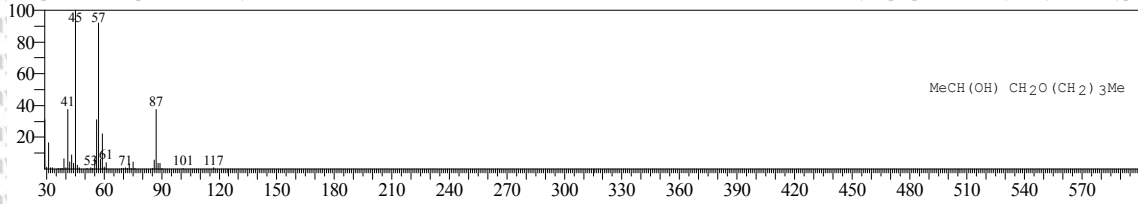
Hit#:2 Entry:23074 Library:WILEY7.LIB
SI:84 Formula:C7 H16 O2 CAS:5131-66-8 MolWeight:132 RetIndex:0
CompName:2-Propanol, 1-butoxy- (CAS) 1-N-BUTOXY-2-PROPANOL \$\$ 1-N-BUTOXYISOPROPANOL \$\$ 1-Butoxy-2-propanol \$\$ 2-Hydroxy-3-butoxypr



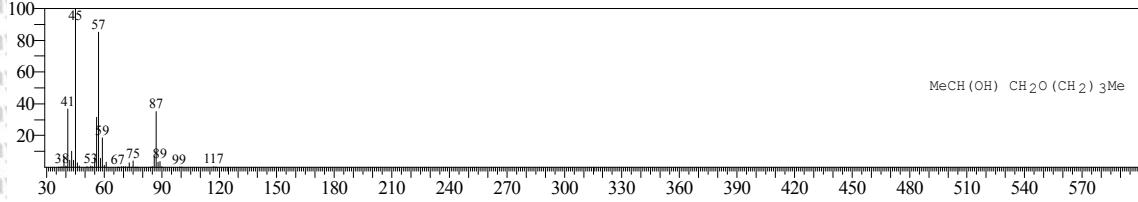
Hit#:3 Entry:23071 Library:WILEY7.LIB
SI:84 Formula:C7 H16 O2 CAS:5131-66-8 MolWeight:132 RetIndex:0
CompName:2-Propanol, 1-butoxy- (CAS) 1-N-BUTOXY-2-PROPANOL \$\$ 1-N-BUTOXYISOPROPANOL \$\$ 1-Butoxy-2-propanol \$\$ 2-Hydroxy-3-butoxypr



Hit#:4 Entry:23070 Library:WILEY7.LIB
SI:84 Formula:C7 H16 O2 CAS:5131-66-8 MolWeight:132 RetIndex:0
CompName:2-Propanol, 1-butoxy- (CAS) 1-N-BUTOXY-2-PROPANOL \$\$ 1-N-BUTOXYISOPROPANOL \$\$ 1-Butoxy-2-propanol \$\$ 2-Hydroxy-3-butoxypr

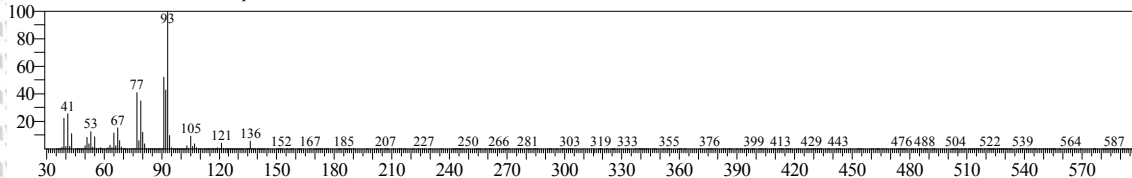


Hit#:5 Entry:23073 Library:WILEY7.LIB
SI:82 Formula:C7 H16 O2 CAS:5131-66-8 MolWeight:132 RetIndex:0
CompName:2-Propanol, 1-butoxy- (CAS) 1-N-BUTOXY-2-PROPANOL \$\$ 1-N-BUTOXYISOPROPANOL \$\$ 1-Butoxy-2-propanol \$\$ 2-Hydroxy-3-butoxypr

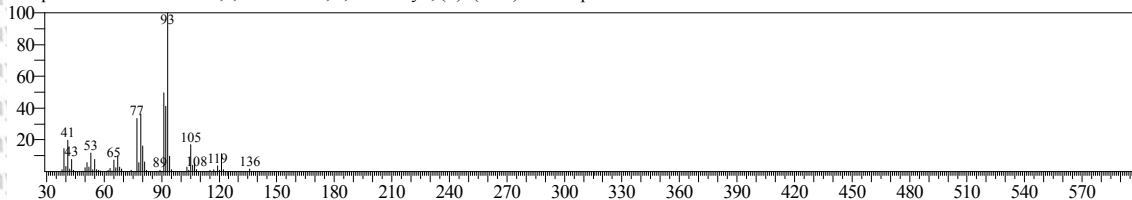


<< Target >>

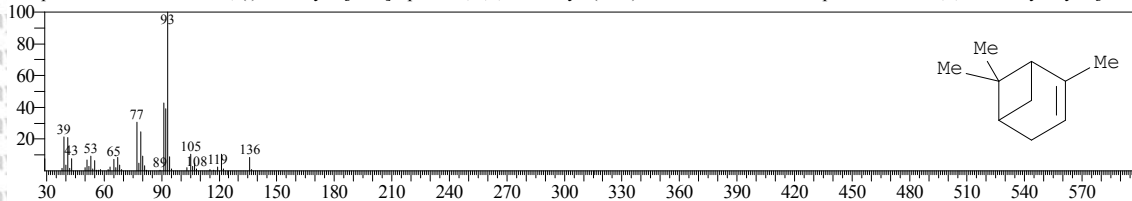
Line#:3 R.Time:5.700(Scan#:541) MassPeaks:323
 RawMode:Averaged 5.695-5.705(540-542) BasePeak:93.05(462647)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



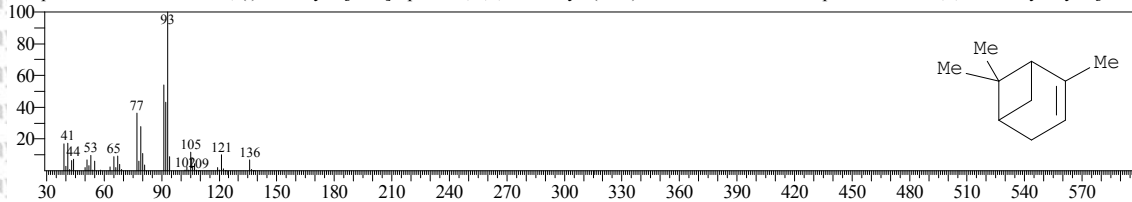
Hit#:1 Entry:26174 Library:WILEY7.LIB
 SI:95 Formula:C10 H16 CAS:6874-10-8 MolWeight:136 RetIndex:0
 CompName:..cis-Ocimene S\$ 1,3,7-Octatriene, 3,7-dimethyl-, (E)- (CAS) trans-.alpha.-Ocimene S\$



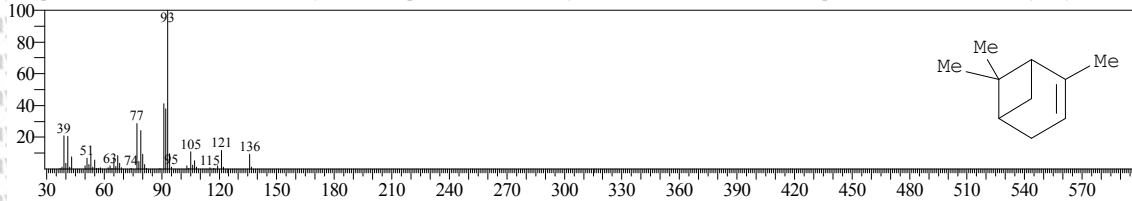
Hit#:2 Entry:26444 Library:WILEY7.LIB
 SI:95 Formula:C10 H16 CAS:80-56-8 MolWeight:136 RetIndex:0
 CompName:..ALPHA-PINENE, (-)- S\$ Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6,6-trimethyl- (CAS) Pinene S\$ 2-Pinene S\$.alpha.-Pinene S\$ 2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]



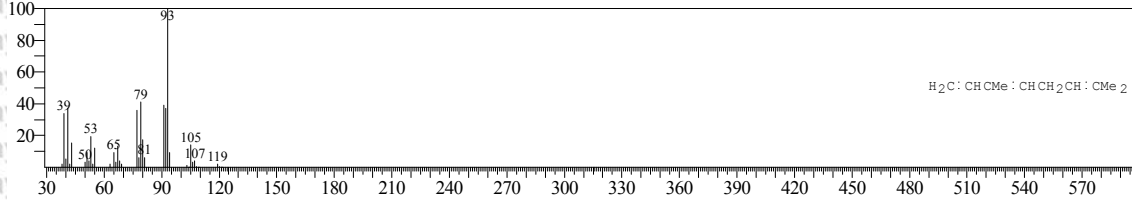
Hit#:3 Entry:26449 Library:WILEY7.LIB
 SI:95 Formula:C10 H16 CAS:80-56-8 MolWeight:136 RetIndex:0
 CompName:..ALPHA-PINENE, (-)- S\$ Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6,6-trimethyl- (CAS) Pinene S\$ 2-Pinene S\$.alpha.-Pinene S\$ 2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]



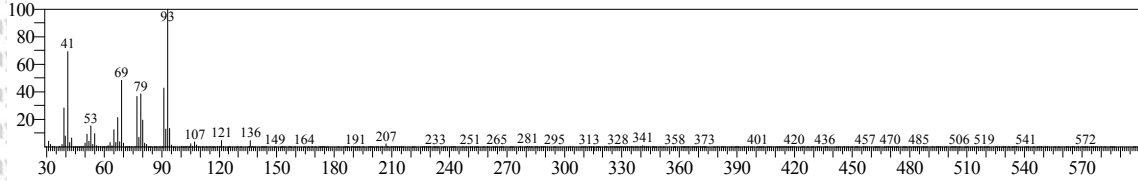
Hit#:4 Entry:26447 Library:WILEY7.LIB
 SI:94 Formula:C10 H16 CAS:80-56-8 MolWeight:136 RetIndex:0
 CompName:..ALPHA-PINENE, (-)- S\$ Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6,6-trimethyl- (CAS) Pinene S\$ 2-Pinene S\$.alpha.-Pinene S\$ 2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]



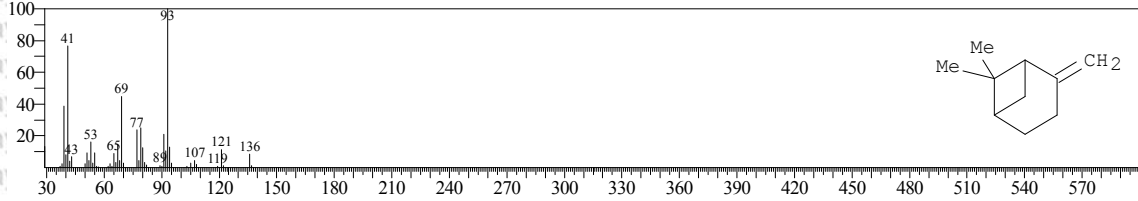
Hit#:5 Entry:26152 Library:WILEY7.LIB
 SI:93 Formula:C10 H16 CAS:3338-55-4 MolWeight:136 RetIndex:0
 CompName:1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-, (Z)- (CAS) cis-3,7-Dimethyl-1,3,6-octatriene S\$.BETA. OCIMENE X S\$ Z-Ocimene S\$.beta.-cis-Ocimene S\$ cis-



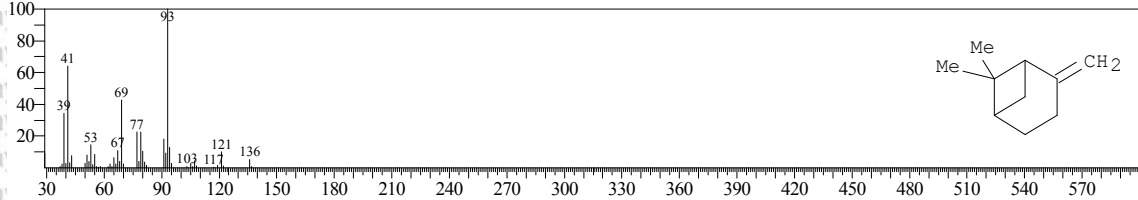
<< Target >>
 Line#:4 R.Time:6.535(Scan#:708) MassPeaks:345
 RawMode:Averaged 6.530-6.540(707-709) BasePeak:93.05(33435)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



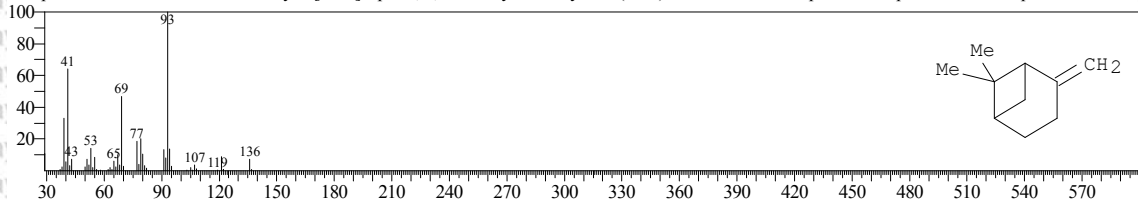
Hit#1 Entry:26464 Library:WILEY7.LIB
 SI:93 Formula:C10 H16 CAS:127-91-3 MolWeight:136 RetIndex:0
 CompName:2-.BETA.-PINENE \$\$ Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene- (CAS) .beta.-Pinene \$\$ Nopinene \$\$ Pseudopinene \$\$ Pseudo



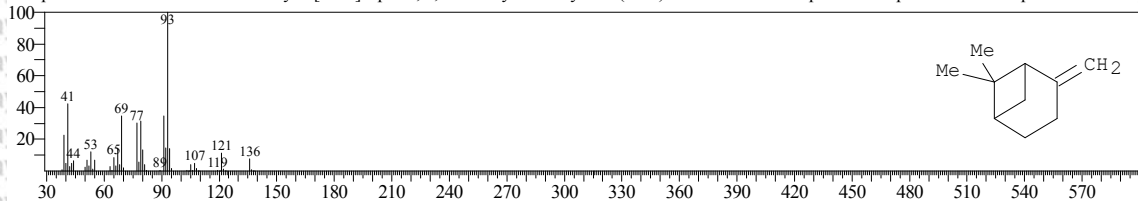
Hit#2 Entry:26467 Library:WILEY7.LIB
 SI:93 Formula:C10 H16 CAS:127-91-3 MolWeight:136 RetIndex:0
 CompName:2-.BETA.-PINENE \$\$ Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene- (CAS) .beta.-Pinene \$\$ Nopinene \$\$ Pseudopinene \$\$ Pseudo



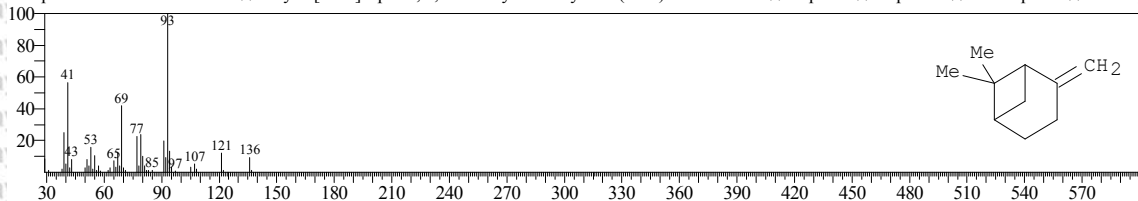
Hit#3 Entry:26465 Library:WILEY7.LIB
 SI:92 Formula:C10 H16 CAS:127-91-3 MolWeight:136 RetIndex:0
 CompName:2-.BETA.-PINENE \$\$ Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene- (CAS) .beta.-Pinene \$\$ Nopinene \$\$ Pseudopinene \$\$ Pseudo



Hit#4 Entry:26471 Library:WILEY7.LIB
 SI:92 Formula:C10 H16 CAS:127-91-3 MolWeight:136 RetIndex:0
 CompName:2-.BETA.-PINENE \$\$ Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene- (CAS) .beta.-Pinene \$\$ Nopinene \$\$ Pseudopinene \$\$ Pseudo

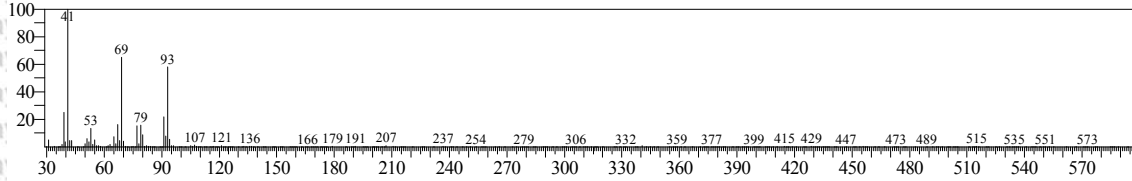


Hit#5 Entry:26472 Library:WILEY7.LIB
 SI:92 Formula:C10 H16 CAS:127-91-3 MolWeight:136 RetIndex:0
 CompName:2-.BETA.-PINENE \$\$ Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene- (CAS) .beta.-Pinene \$\$ Nopinene \$\$ Pseudopinene \$\$ Pseudo

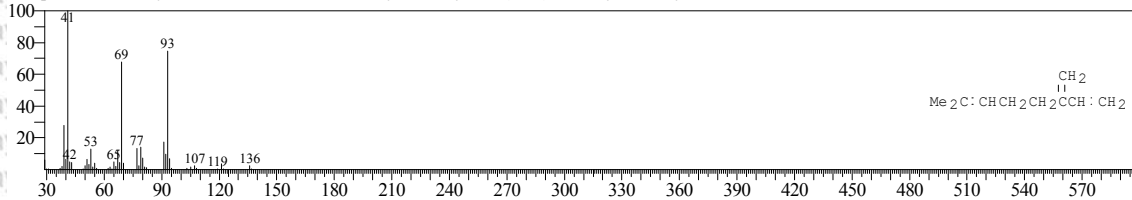


<< Target >>

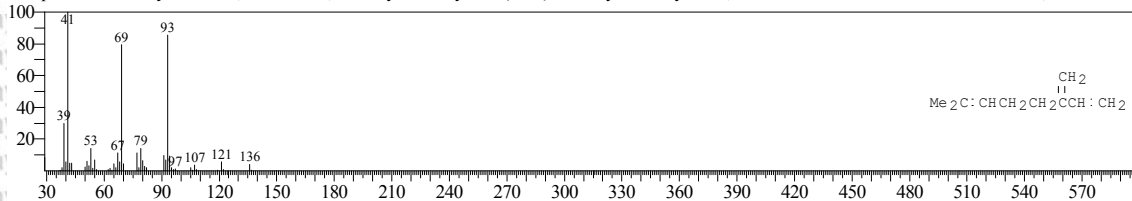
Line#:5 R.Time:6.710(Scan#:743) MassPeaks:302
RawMode:Averaged 6.705-6.715(742-744) BasePeak:40.90(16212)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



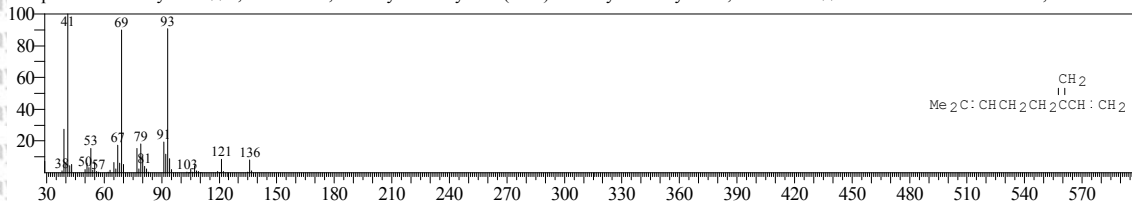
Hit#:1 Entry:26199 Library:WILEY7.LIB
SI:96 Formula:C10 H16 CAS:123-35-3 MolWeight:136 RetIndex:0
CompName:.beta.-Myrcene \$\$ 1,6-Octadiene, 7-methyl-3-methylene- (CAS) 2-Methyl-6-methylene-2,7-octadiene \$\$ 2-ETHENYL-6-METHYL-1,5-HEPTADIE



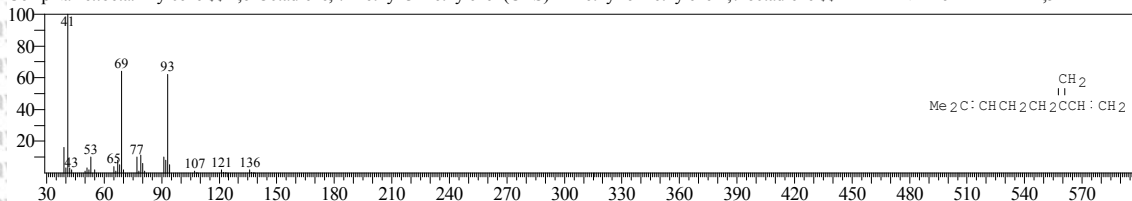
Hit#:2 Entry:26194 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C10 H16 CAS:123-35-3 MolWeight:136 RetIndex:0
CompName:.beta.-Myrcene \$\$ 1,6-Octadiene, 7-methyl-3-methylene- (CAS) 2-Methyl-6-methylene-2,7-octadiene \$\$ 2-ETHENYL-6-METHYL-1,5-HEPTADIE



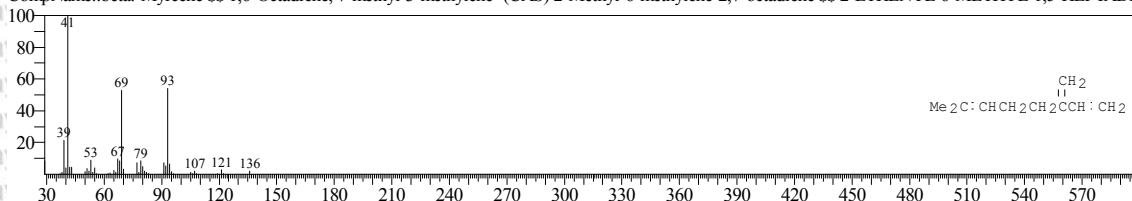
Hit#:3 Entry:26198 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C10 H16 CAS:123-35-3 MolWeight:136 RetIndex:0
CompName:.beta.-Myrcene \$\$ 1,6-Octadiene, 7-methyl-3-methylene- (CAS) 2-Methyl-6-methylene-2,7-octadiene \$\$ 2-ETHENYL-6-METHYL-1,5-HEPTADIE



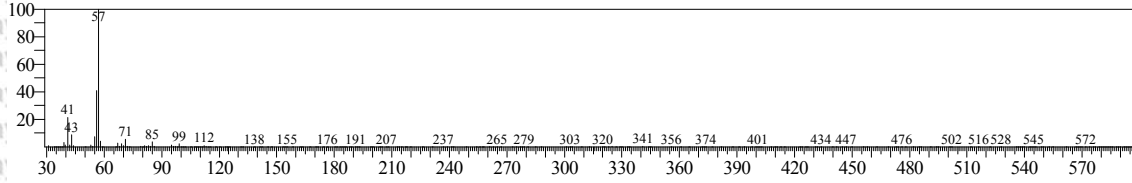
Hit#:4 Entry:26205 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C10 H16 CAS:123-35-3 MolWeight:136 RetIndex:0
CompName:.beta.-Myrcene \$\$ 1,6-Octadiene, 7-methyl-3-methylene- (CAS) 2-Methyl-6-methylene-2,7-octadiene \$\$ 2-ETHENYL-6-METHYL-1,5-HEPTADIE



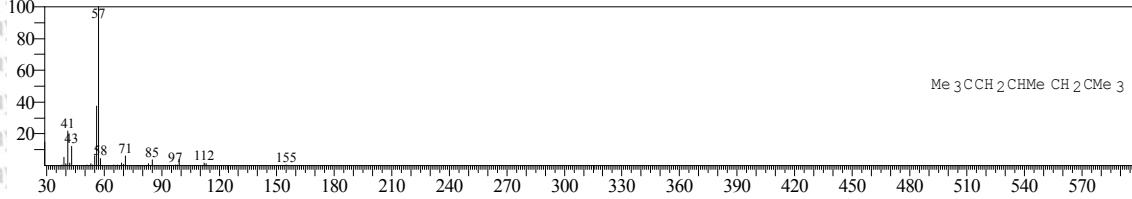
Hit#:5 Entry:26197 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C10 H16 CAS:123-35-3 MolWeight:136 RetIndex:0
CompName:.beta.-Myrcene \$\$ 1,6-Octadiene, 7-methyl-3-methylene- (CAS) 2-Methyl-6-methylene-2,7-octadiene \$\$ 2-ETHENYL-6-METHYL-1,5-HEPTADIE



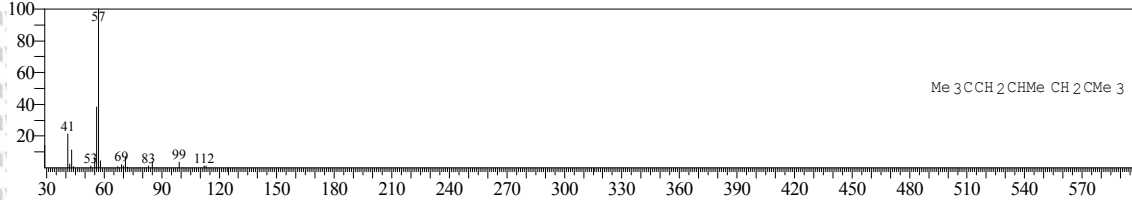
<< Target >>
 Line#:6 R.Time:7.035(Scan#:808) MassPeaks:232
 RawMode:Averaged 7.030-7.040(807-809) BasePeak:57.00(46598)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



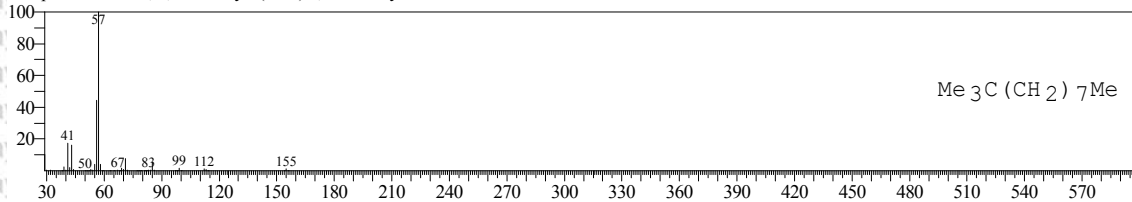
Hit#:1 Entry:61371 Library:WILEY7.LIB
 SI:96 Formula:C12 H26 CAS:13475-82-6 MolWeight:170 RetIndex:0
 CompName:Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl- (CAS) 2,2,4,6,6-Pentamethylheptane \$\$



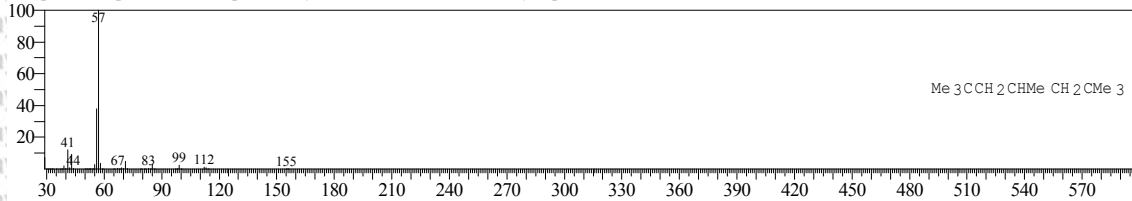
Hit#:2 Entry:61373 Library:WILEY7.LIB
 SI:95 Formula:C12 H26 CAS:13475-82-6 MolWeight:170 RetIndex:0
 CompName:Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl- (CAS) 2,2,4,6,6-Pentamethylheptane \$\$



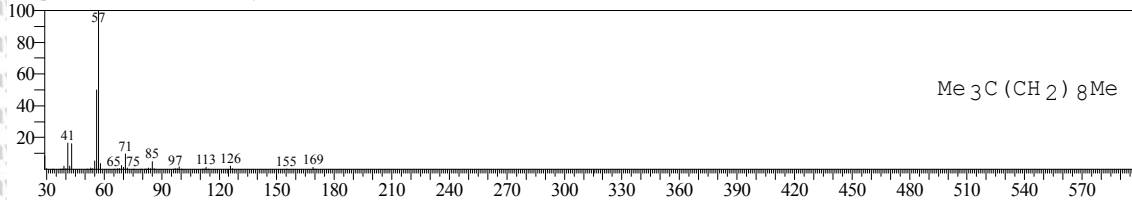
Hit#:3 Entry:61362 Library:WILEY7.LIB
 SI:95 Formula:C12 H26 CAS:17302-37-3 MolWeight:170 RetIndex:0
 CompName:Decane, 2,2-dimethyl- (CAS) 2,2-Dimethyldecane \$\$



Hit#:4 Entry:61372 Library:WILEY7.LIB
 SI:95 Formula:C12 H26 CAS:13475-82-6 MolWeight:170 RetIndex:0
 CompName:Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl- (CAS) 2,2,4,6,6-Pentamethylheptane \$\$

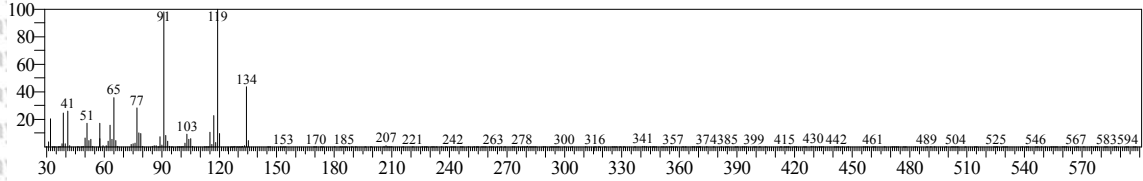


Hit#:5 Entry:76404 Library:WILEY7.LIB
 SI:94 Formula:C13 H28 CAS:17312-64-0 MolWeight:184 RetIndex:0
 CompName:Undecane, 2,2-dimethyl- (CAS)

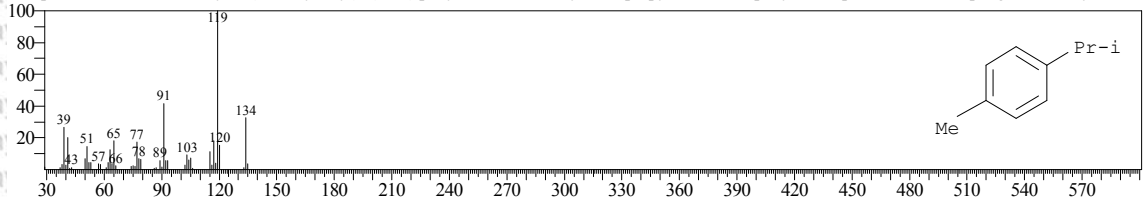


<< Target >>

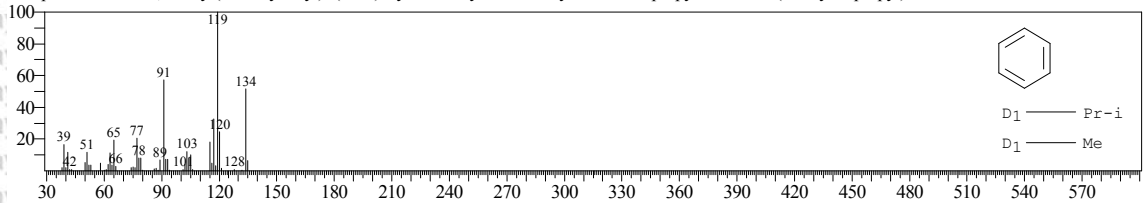
Line#: 8 R.Time: 7.450 (Scan#: 891) MassPeaks: 269
 RawMode: Averaged 7.445-7.455 (890-892) BasePeak: 119.10 (51384)
 BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



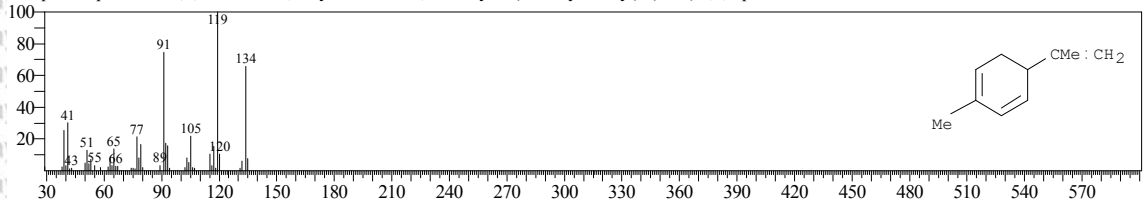
Hit#: 1 Entry: 24436 Library: WILEY7.LIB
 SI: 90 Formula: C₁₀H₁₄ CAS: 99-87-6 MolWeight: 134 RetIndex: 0
 CompName: Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) p-Cymene \$\$ 1-Methyl-4-isopropylbenzene \$\$ p-Cymol \$\$ p-Cimene \$\$ Camphogen \$\$ Dolcymene \$



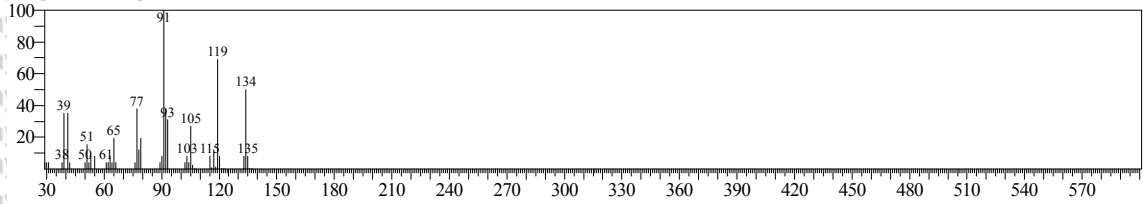
Hit#: 2 Entry: 24423 Library: WILEY7.LIB
 SI: 88 Formula: C₁₀H₁₄ CAS: 25155-15-1 MolWeight: 134 RetIndex: 0
 CompName: Benzene, methyl(1-methylethyl)- (CAS) Cymol \$\$ Cymene \$\$ Thymene \$\$ Isopropyltoluene \$\$ (Methylisopropyl)benzene \$\$ PARA CYMENE \$\$ I



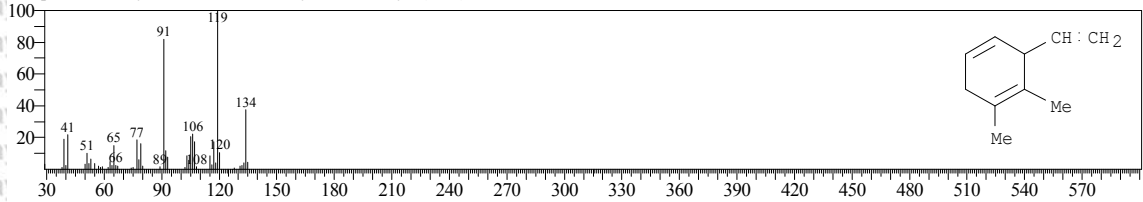
Hit#: 3 Entry: 24506 Library: WILEY7.LIB
 SI: 87 Formula: C₁₀H₁₄ CAS: 21195-59-5 MolWeight: 134 RetIndex: 0
 CompName: p-Mentha-1,5,8-triene \$\$ 1,3-Cyclohexadiene, 2-methyl-5-(1-methylethenyl)- (CAS) 1,3,8-p-Menthatriene \$\$



Hit#: 4 Entry: 23923 Library: WILEY7.LIB
 SI: 85 Formula: C₁₀H₁₄ CAS: 0-00-0 MolWeight: 134 RetIndex: 0
 CompName: 1,5,8-p-menthatriene \$\$



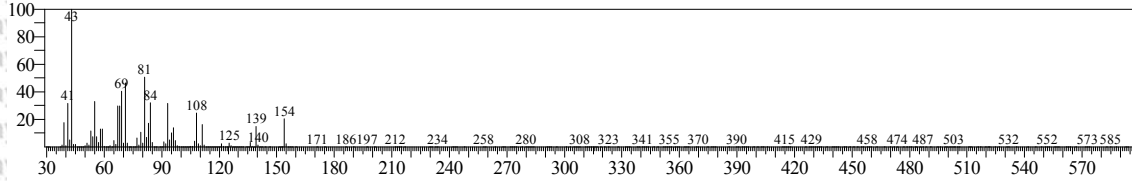
Hit#: 5 Entry: 23992 Library: WILEY7.LIB
 SI: 85 Formula: C₁₀H₁₄ CAS: 62338-57-2 MolWeight: 134 RetIndex: 0
 CompName: 1,4-Cyclohexadiene, 3-ethenyl-1,2-dimethyl- (CAS)



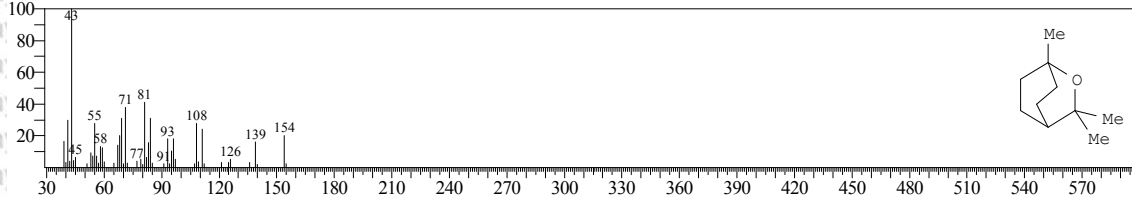


<< Target >>

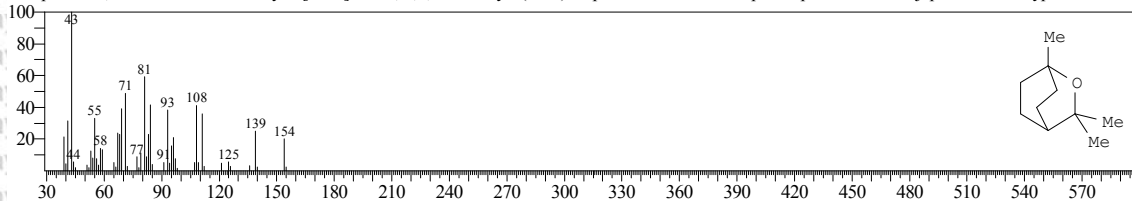
Line#:9 R.Time:7.660(Scan#:933) MassPeaks:300
RawMode:Averaged 7.655-7.665(932-934) BasePeak:42.90(709270)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



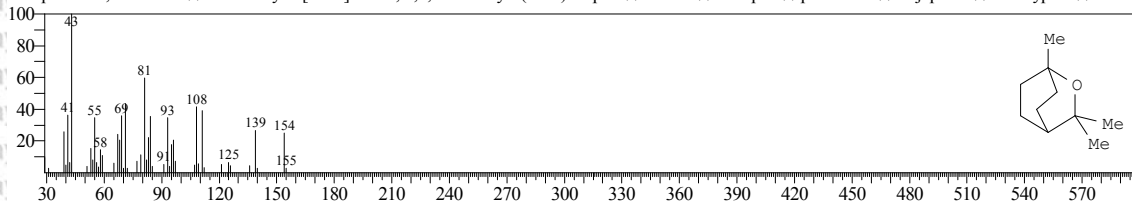
Hit#:1 Entry:43984 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C10 H18 O CAS:470-82-6 MolWeight:154 RetIndex:0
CompName:1,8-Cineole \$\$ 2-Oxabicyclo[2.2.2]octane, 1,3,3-trimethyl- (CAS) Terpan \$\$ Zineol \$\$ Eucapur \$\$ p-Cineole \$\$ Cajeputol \$\$ Eucalyptol \$\$ Cucaly



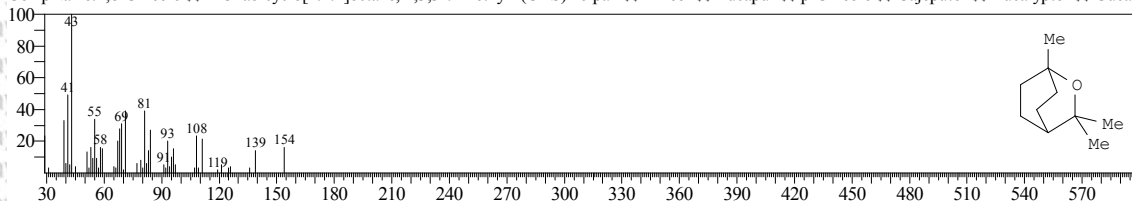
Hit#:2 Entry:43987 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C10 H18 O CAS:470-82-6 MolWeight:154 RetIndex:0
CompName:1,8-Cineole \$\$ 2-Oxabicyclo[2.2.2]octane, 1,3,3-trimethyl- (CAS) Terpan \$\$ Zineol \$\$ Eucapur \$\$ p-Cineole \$\$ Cajeputol \$\$ Eucalyptol \$\$ Cucaly



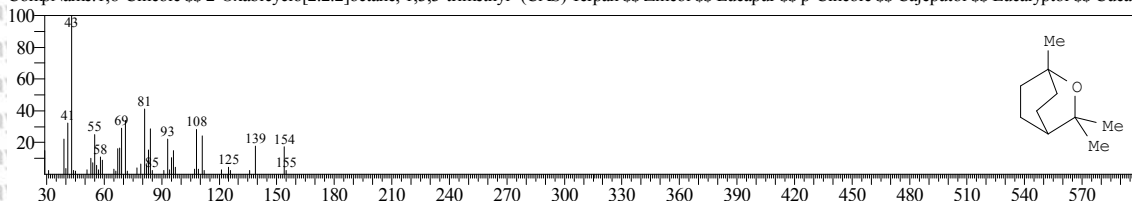
Hit#:3 Entry:43986 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C10 H18 O CAS:470-82-6 MolWeight:154 RetIndex:0
CompName:1,8-Cineole \$\$ 2-Oxabicyclo[2.2.2]octane, 1,3,3-trimethyl- (CAS) Terpan \$\$ Zineol \$\$ Eucapur \$\$ p-Cineole \$\$ Cajeputol \$\$ Eucalyptol \$\$ Cucaly



Hit#:4 Entry:43981 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C10 H18 O CAS:470-82-6 MolWeight:154 RetIndex:0
CompName:1,8-Cineole \$\$ 2-Oxabicyclo[2.2.2]octane, 1,3,3-trimethyl- (CAS) Terpan \$\$ Zineol \$\$ Eucapur \$\$ p-Cineole \$\$ Cajeputol \$\$ Eucalyptol \$\$ Cucaly

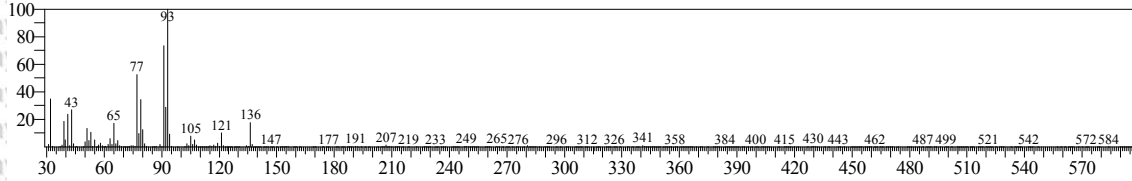


Hit#:5 Entry:43993 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C10 H18 O CAS:470-82-6 MolWeight:154 RetIndex:0
CompName:1,8-Cineole \$\$ 2-Oxabicyclo[2.2.2]octane, 1,3,3-trimethyl- (CAS) Terpan \$\$ Zineol \$\$ Eucapur \$\$ p-Cineole \$\$ Cajeputol \$\$ Eucalyptol \$\$ Cucaly

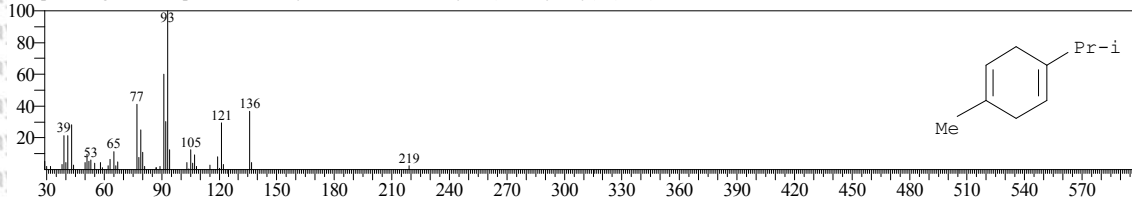


<< Target >>

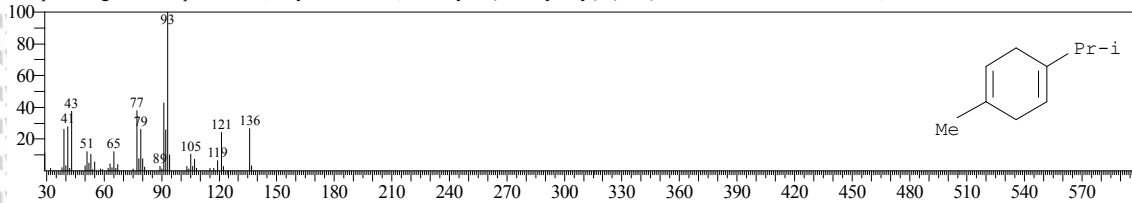
Line#: 10 R-Time: 8.360(Scan#: 1073) MassPeaks: 353
 RawMode: Averaged 8.355-8.365(1072-1074) BasePeak: 93.05(23138)
 BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



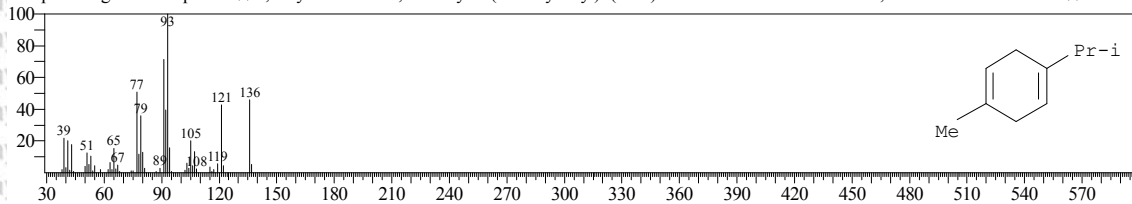
Hit#: 1 Entry: 26284 Library: WILEY7.LIB
 SI: 91 Formula: C₁₀H₁₆ CAS: 99-85-4 MolWeight: 136 RetIndex: 0
 CompName: .gamma.-Terpinene \$\$ 1,4-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) 1-ISOPROPYL-4-METHYL-1,4-CYCLOHEXADIENE \$\$ Moslen



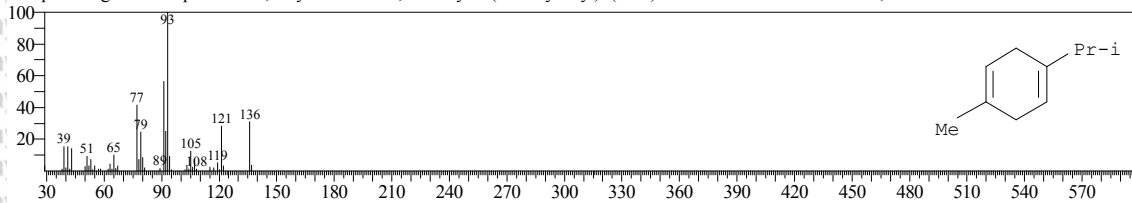
Hit#: 2 Entry: 26275 Library: WILEY7.LIB
 SI: 91 Formula: C₁₀H₁₆ CAS: 99-85-4 MolWeight: 136 RetIndex: 0
 CompName: .gamma.-Terpinene \$\$ 1,4-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) 1-ISOPROPYL-4-METHYL-1,4-CYCLOHEXADIENE \$\$ Moslen



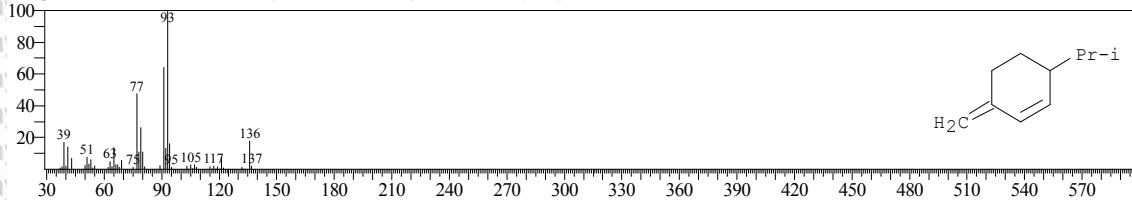
Hit#: 3 Entry: 26281 Library: WILEY7.LIB
 SI: 90 Formula: C₁₀H₁₆ CAS: 99-85-4 MolWeight: 136 RetIndex: 0
 CompName: .gamma.-Terpinene \$\$ 1,4-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) 1-ISOPROPYL-4-METHYL-1,4-CYCLOHEXADIENE \$\$ Moslen



Hit#: 4 Entry: 26280 Library: WILEY7.LIB
 SI: 88 Formula: C₁₀H₁₆ CAS: 99-85-4 MolWeight: 136 RetIndex: 0
 CompName: .gamma.-Terpinene \$\$ 1,4-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) 1-ISOPROPYL-4-METHYL-1,4-CYCLOHEXADIENE \$\$ Moslen

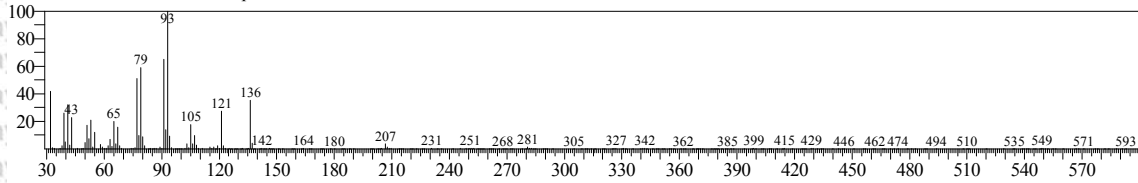


Hit#: 5 Entry: 26358 Library: WILEY7.LIB
 SI: 88 Formula: C₁₀H₁₆ CAS: 555-10-2 MolWeight: 136 RetIndex: 0
 CompName: .beta.-Phellandrene \$\$ Cyclohexene, 3-methylene-6-(1-methylethyl)- (CAS) 3-ISOPROPYL-6-METHYLENE-CYCLOHEXENE, 2-PARA-MENTI

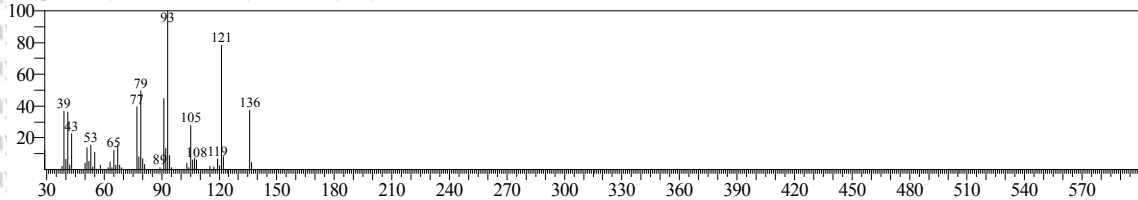


<< Target >>

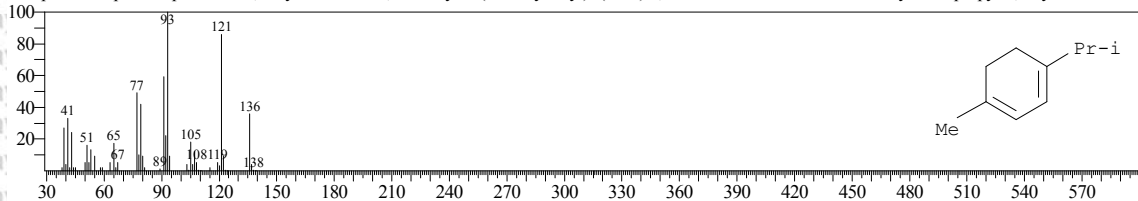
Line#:11 R.Time:9.140(Scan#:1229) MassPeaks:273
RawMode:Averaged 9.135-9.145(1228-1230) BasePeak:93.05(11331)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



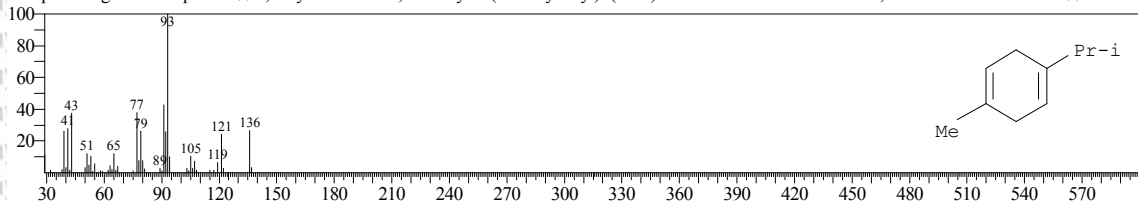
Hit#:1 Entry:25562 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C10 H16 CAS:99805-90-0 MolWeight:136 RetIndex:0
CompName:Cyclohexene, 4-methyl-3-(1-methylethylidene)- (CAS) o-Mentha-2(8),3-diene \$\$



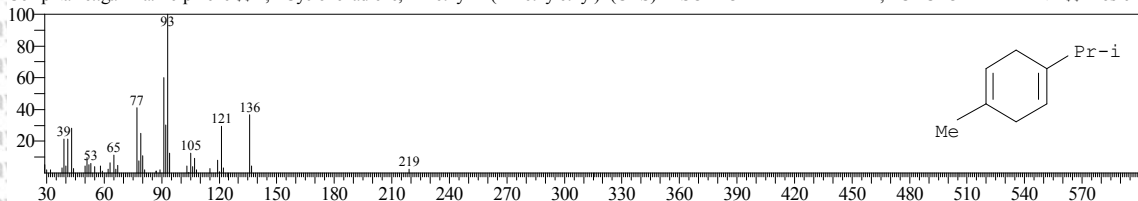
Hit#:2 Entry:26233 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C10 H16 CAS:99-86-5 MolWeight:136 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Terpinene \$\$ 1,3-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) 1,3-P-MENTHADIENE \$\$ 1-Methyl-4-isopropyl-1,3-cyclohexadiene



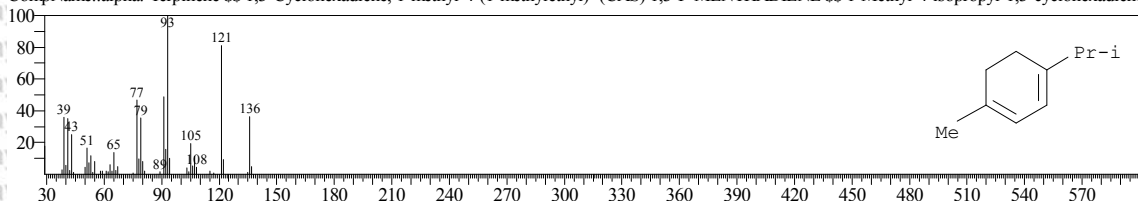
Hit#:3 Entry:26275 Library:WILEY7.LIB
SI:89 Formula:C10 H16 CAS:99-85-4 MolWeight:136 RetIndex:0
CompName:.gamma.-Terpinene \$\$ 1,4-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) 1-ISOPROPYL-4-METHYL-1,4-CYCLOHEXADIENE \$\$ Moslen



Hit#:4 Entry:26284 Library:WILEY7.LIB
SI:89 Formula:C10 H16 CAS:99-85-4 MolWeight:136 RetIndex:0
CompName:.gamma.-Terpinene \$\$ 1,4-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) 1-ISOPROPYL-4-METHYL-1,4-CYCLOHEXADIENE \$\$ Moslen

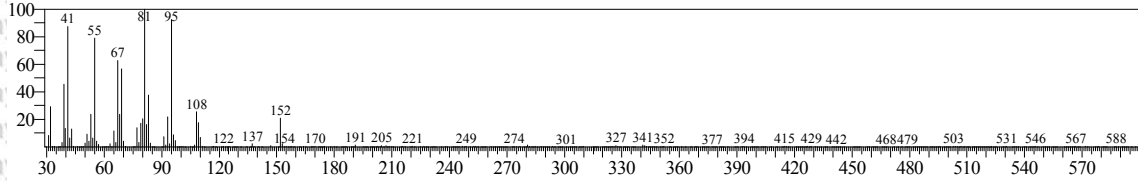


Hit#:5 Entry:26229 Library:WILEY7.LIB
SI:89 Formula:C10 H16 CAS:99-86-5 MolWeight:136 RetIndex:0
CompName:.alpha.-Terpinene \$\$ 1,3-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)- (CAS) 1,3-P-MENTHADIENE \$\$ 1-Methyl-4-isopropyl-1,3-cyclohexadiene

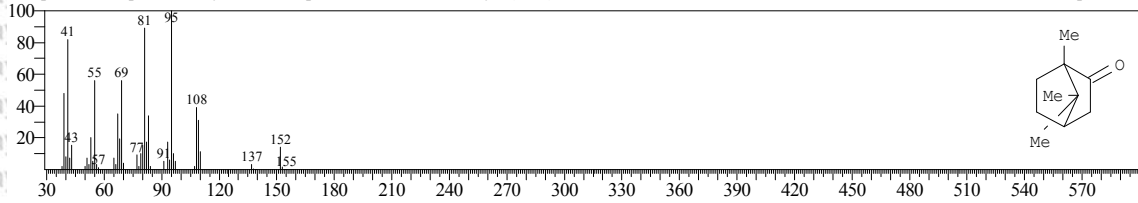


<< Target >>

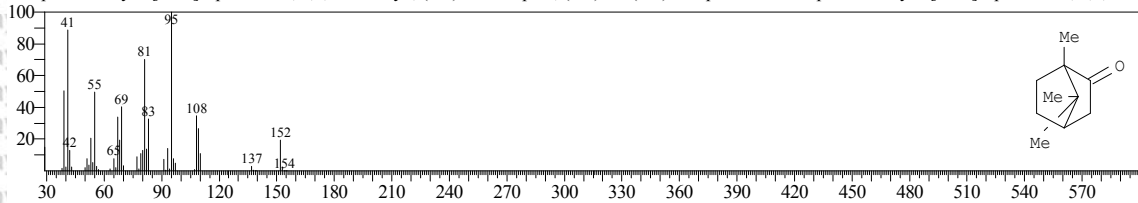
Line#:12 R.Time:10.270(Scan#:1455) MassPeaks:396
RawMode:Averaged 10.265-10.275(1454-1456) BasePeak:81.00(12491)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



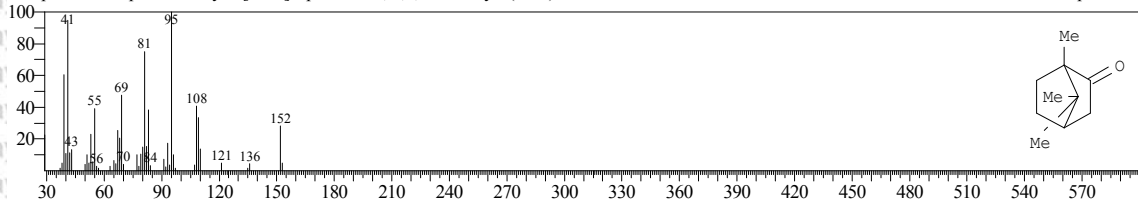
Hit#:1 Entry:41225 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C10 H16 O CAS:76-22-2 MolWeight:152 RetIndex:0
CompName:Camphor \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl- (CAS) NORBORNAN-2-ONE \$\$ BORNAN-2-ONE \$\$ 2-Bornanone \$\$ 2-Camphanone



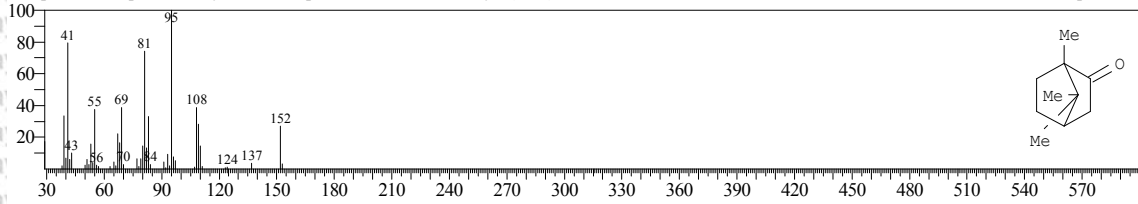
Hit#:2 Entry:40124 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C10 H16 O CAS:21368-68-3 MolWeight:152 RetIndex:0
CompName:Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl-, (+,-)- \$\$ Camphor, (+,-)- \$\$ (-,-)-Camphor \$\$ dl-Camphor \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-tri



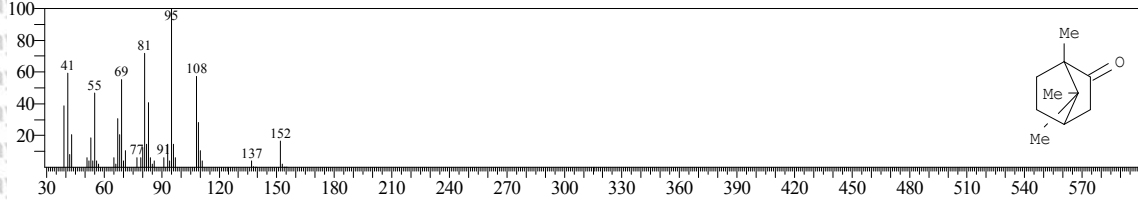
Hit#:3 Entry:41224 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C10 H16 O CAS:76-22-2 MolWeight:152 RetIndex:0
CompName:Camphor \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl- (CAS) NORBORNAN-2-ONE \$\$ BORNAN-2-ONE \$\$ 2-Bornanone \$\$ 2-Camphanone



Hit#:4 Entry:41215 Library:WILEY7.LIB
SI:88 Formula:C10 H16 O CAS:76-22-2 MolWeight:152 RetIndex:0
CompName:Camphor \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl- (CAS) NORBORNAN-2-ONE \$\$ BORNAN-2-ONE \$\$ 2-Bornanone \$\$ 2-Camphanone

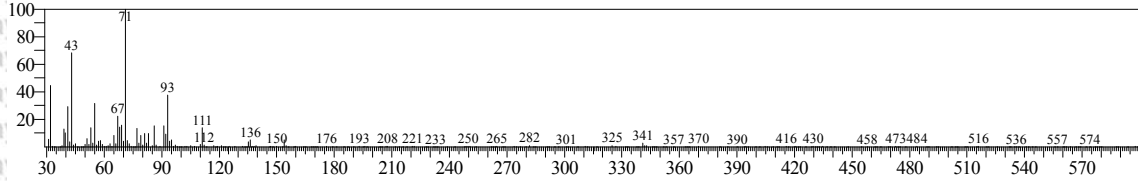


Hit#:5 Entry:41226 Library:WILEY7.LIB
SI:87 Formula:C10 H16 O CAS:76-22-2 MolWeight:152 RetIndex:0
CompName:Camphor \$\$ Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl- (CAS) NORBORNAN-2-ONE \$\$ BORNAN-2-ONE \$\$ 2-Bornanone \$\$ 2-Camphanone

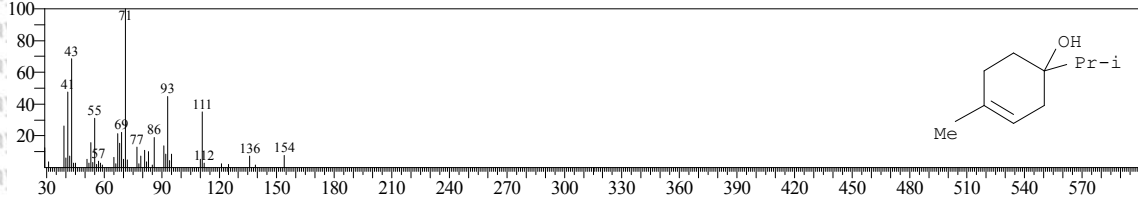


<< Target >>

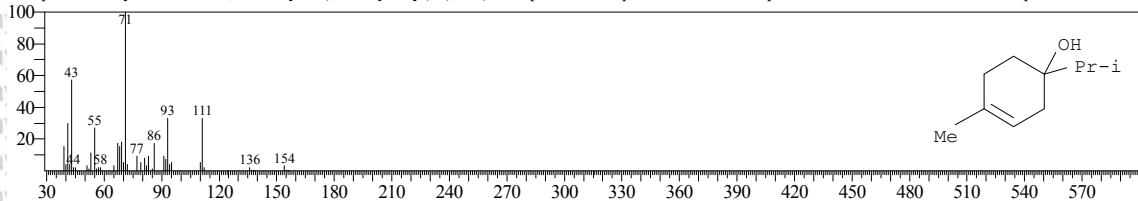
Line#:13 R.Time:11.395(Scan#:1680) MassPeaks:264
RawMode:Averaged 11.390-11.400(1679-1681) BasePeak:71.00(9835)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



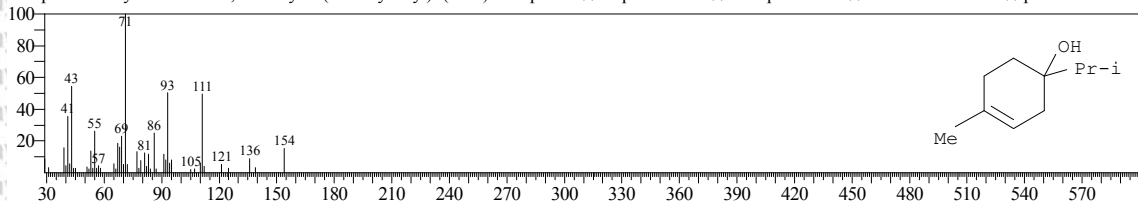
Hit#1 Entry:43757 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C10 H18 O CAS:562-74-3 MolWeight:154 RetIndex:0
CompName:3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)- (CAS) 4-Terpineol \$\$ Terpinene-4-ol \$\$ 1-Terpinen-4-ol \$\$ 4-Carvomenthenol \$\$ p-Menth-1-en-4-



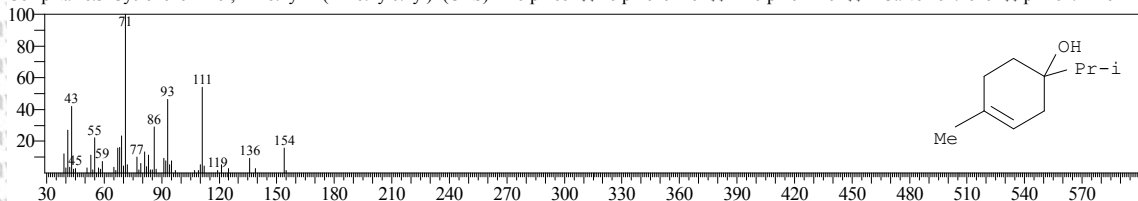
Hit#2 Entry:43764 Library:WILEY7.LIB
SI:88 Formula:C10 H18 O CAS:562-74-3 MolWeight:154 RetIndex:0
CompName:3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)- (CAS) 4-Terpineol \$\$ Terpinene-4-ol \$\$ 1-Terpinen-4-ol \$\$ 4-Carvomenthenol \$\$ p-Menth-1-en-4-



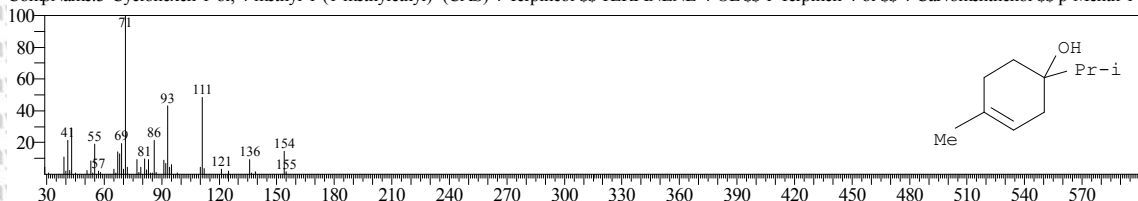
Hit#3 Entry:43760 Library:WILEY7.LIB
SI:87 Formula:C10 H18 O CAS:562-74-3 MolWeight:154 RetIndex:0
CompName:3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)- (CAS) 4-Terpineol \$\$ Terpinene-4-ol \$\$ 1-Terpinen-4-ol \$\$ 4-Carvomenthenol \$\$ p-Menth-1-en-4-



Hit#4 Entry:43759 Library:WILEY7.LIB
SI:84 Formula:C10 H18 O CAS:562-74-3 MolWeight:154 RetIndex:0
CompName:3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)- (CAS) 4-Terpineol \$\$ Terpinene-4-ol \$\$ 1-Terpinen-4-ol \$\$ 4-Carvomenthenol \$\$ p-Menth-1-en-4-



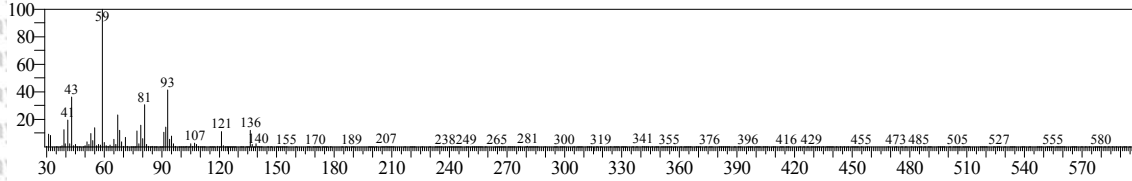
Hit#5 Entry:43754 Library:WILEY7.LIB
SI:84 Formula:C10 H18 O CAS:562-74-3 MolWeight:154 RetIndex:0
CompName:3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)- (CAS) 4-Terpineol \$\$ TERPINENE-4-OL \$\$ 1-Terpinen-4-ol \$\$ 4-Carvomenthenol \$\$ p-Menth-1-



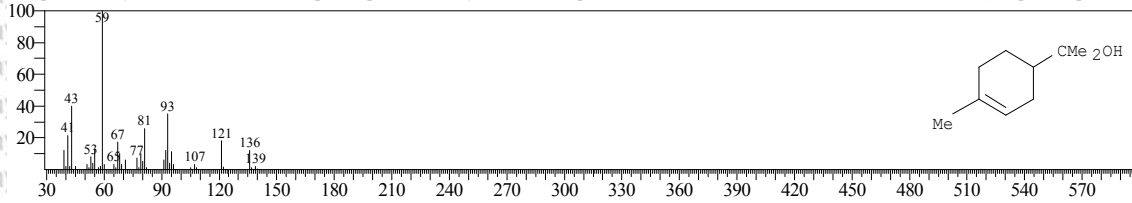


<< Target >>

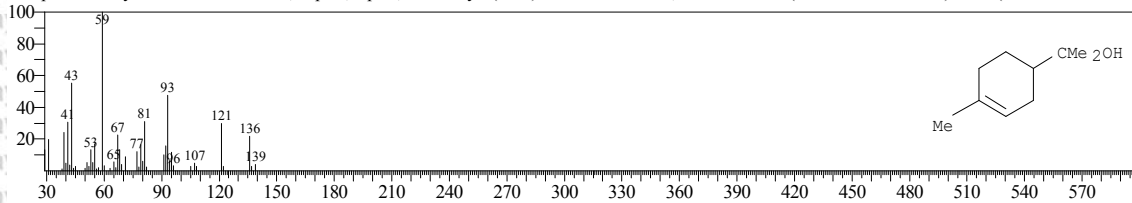
Line#:14 R.Time:11.695(Scan#:1740) MassPeaks:346
RawMode:Averaged 11.690-11.700(1739-1741) BasePeak:59.00(107319)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



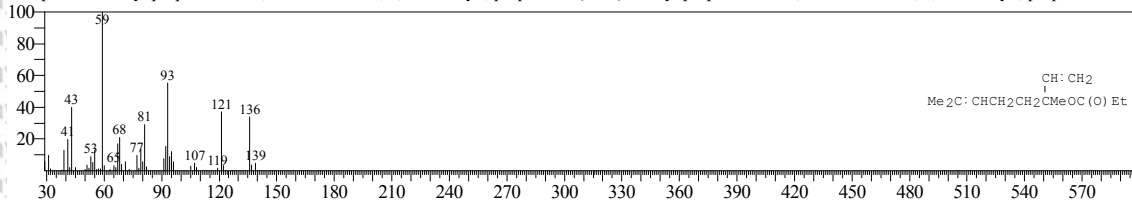
Hit#:1 Entry:43791 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C10 H18 O CAS:10482-56-1 MolWeight:154 RetIndex:0
CompName:3-Cyclohexene-1-methanol, .alpha.,.alpha.,4-trimethyl-, (S)- (CAS) p-Menth-1-en-8-ol, (S)-(-) SS ALPHA-TERPINEOL SS (-).alpha.-Terpineol SS



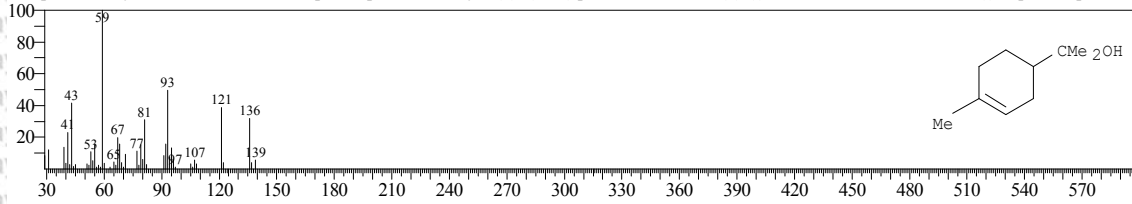
Hit#:2 Entry:43775 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C10 H18 O CAS:98-55-5 MolWeight:154 RetIndex:0
CompName:3-Cyclohexene-1-methanol, .alpha.,.alpha.,4-trimethyl-, (CAS) CYCLOHEXENE, 1-METHYL-4-(2-PROPANOL-2-YL)- SS 4-(1-HYDROXY-1-M



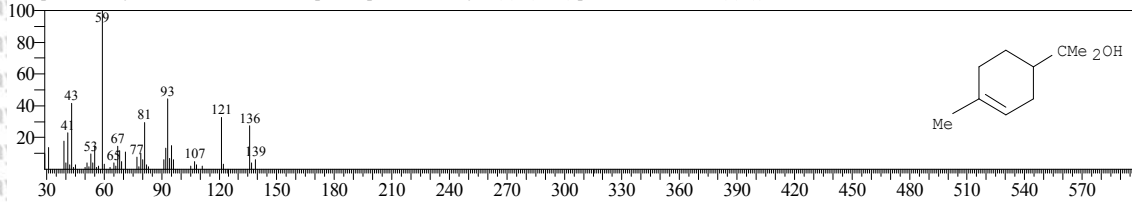
Hit#:3 Entry:108817 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C13 H22 O2 CAS:144-39-8 MolWeight:210 RetIndex:0
CompName:Linalyl propionate SS 1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-, propionate (CAS) Linalyl propionate SS 1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-, propionate SS



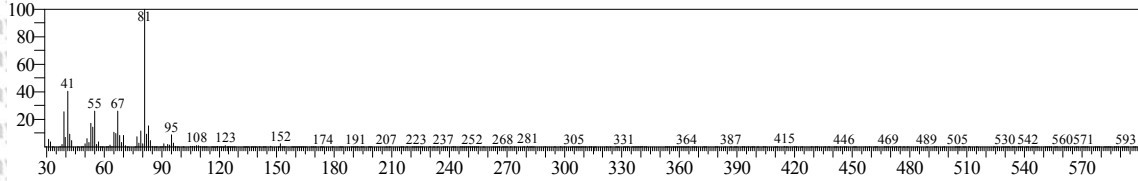
Hit#:4 Entry:43785 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C10 H18 O CAS:10482-56-1 MolWeight:154 RetIndex:0
CompName:3-Cyclohexene-1-methanol, .alpha.,.alpha.,4-trimethyl-, (S)- (CAS) p-Menth-1-en-8-ol, (S)-(-) SS ALPHA-TERPINEOL SS (-).alpha.-Terpineol SS



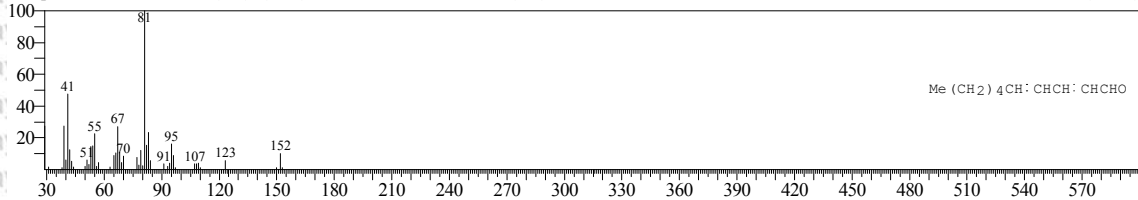
Hit#:5 Entry:43783 Library:WILEY7.LIB
SI:93 Formula:C10 H18 O CAS:10482-56-1 MolWeight:154 RetIndex:0
CompName:3-Cyclohexene-1-methanol, .alpha.,.alpha.,4-trimethyl-, (S)- (CAS) p-Menth-1-en-8-ol, (S)-(-) SS



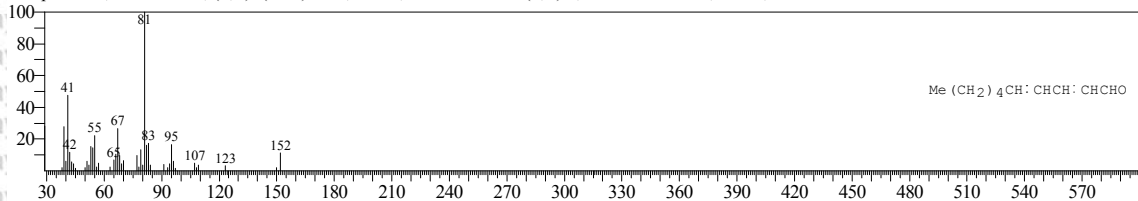
<< Target >>
 Line#: 15 R-Time: 14.300(Scan#: 2261) MassPeaks: 318
 RawMode: Averaged 14.295-14.305(2260-2262) BasePeak: 81.00(26472)
 BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



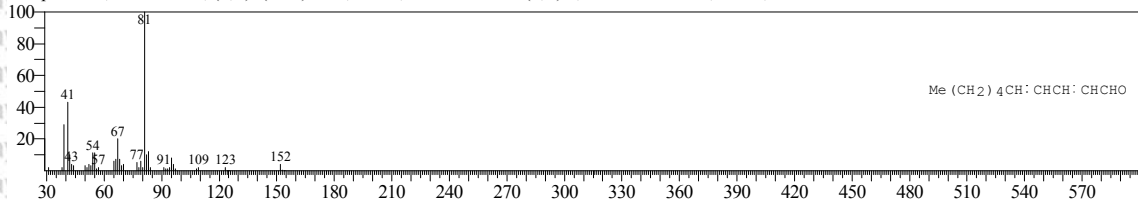
Hit#: 1 Entry: 40931 Library: WILEY7.LIB
 SI: 94 Formula: C₁₀H₁₆O CAS: 25152-83-4 MolWeight: 152 RetIndex: 0
 CompName: 2,4-Decadienal, (E,Z)- (CAS) trans,cis-2,4-Decadienal \$\$ (E,Z)-2,4-Decadienal \$\$ trans-2,cis-4-Decadienal \$\$ 2-trans,4-cis-Decadienal \$\$ (2E,4Z)



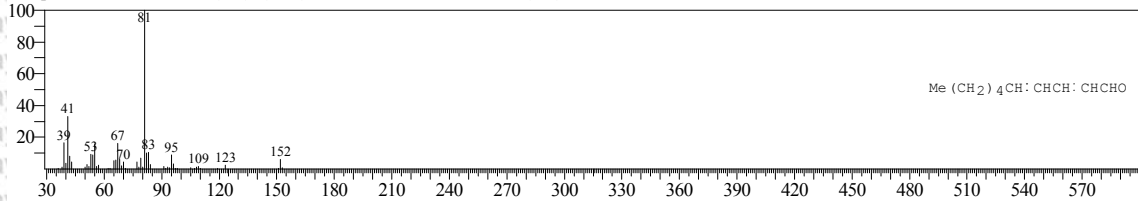
Hit#: 2 Entry: 40934 Library: WILEY7.LIB
 SI: 93 Formula: C₁₀H₁₆O CAS: 25152-84-5 MolWeight: 152 RetIndex: 0
 CompName: 2,4-Decadienal, (E,E)- (CAS) trans,trans-2,4-Decadienal \$\$ (E,E)-2,4-Decadienal \$\$ 2,4-trans,trans-Decadienal \$\$ 2-trans-4-trans-Decadienal \$\$ tr



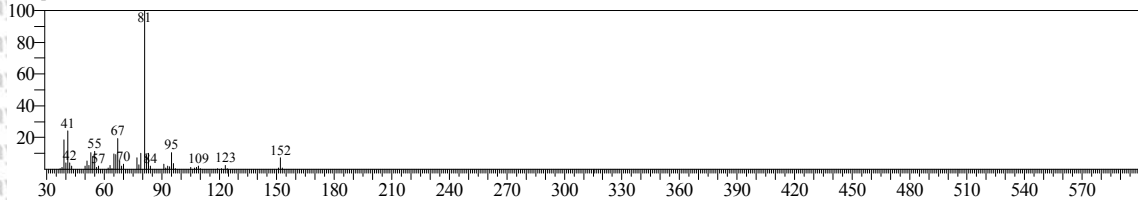
Hit#: 3 Entry: 40937 Library: WILEY7.LIB
 SI: 91 Formula: C₁₀H₁₆O CAS: 25152-84-5 MolWeight: 152 RetIndex: 0
 CompName: 2,4-Decadienal, (E,E)- (CAS) trans,trans-2,4-Decadienal \$\$ (E,E)-2,4-Decadienal \$\$ 2,4-trans,trans-Decadienal \$\$ 2-trans-4-trans-Decadienal \$\$ tr



Hit#: 4 Entry: 40936 Library: WILEY7.LIB
 SI: 91 Formula: C₁₀H₁₆O CAS: 25152-84-5 MolWeight: 152 RetIndex: 0
 CompName: 2,4-Decadienal, (E,E)- (CAS) trans,trans-2,4-Decadienal \$\$ (E,E)-2,4-Decadienal \$\$ 2,4-trans,trans-Decadienal \$\$ 2-trans-4-trans-Decadienal \$\$ tr

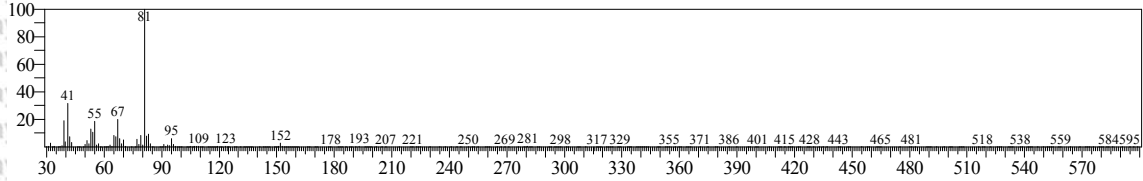


Hit#: 5 Entry: 40935 Library: WILEY7.LIB
 SI: 91 Formula: C₁₀H₁₆O CAS: 2363-88-4 MolWeight: 152 RetIndex: 0
 CompName: 2,4-DECADIENAL \$\$ HEPTENYLACROLEIN \$\$ 2,4-Decadienal \$\$

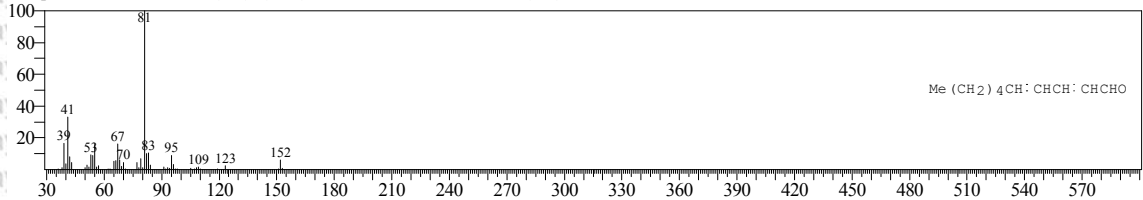


<< Target >>

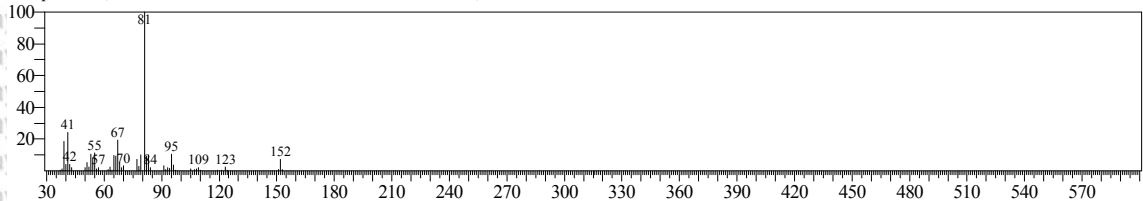
Line#:16 R.Time:14.870(Scan#:2375) MassPeaks:287
RawMode:Averaged 14.865-14.875(2374-2376) BasePeak:81.00(62734)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



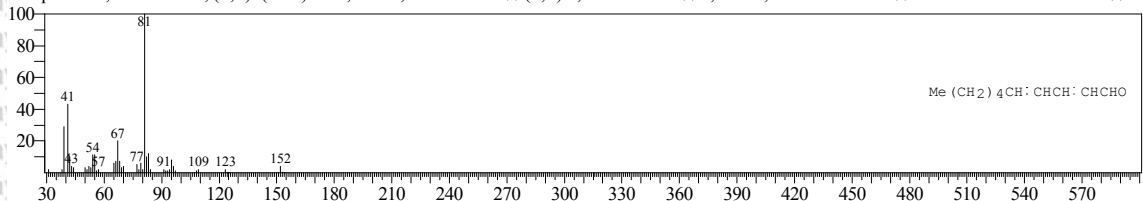
Hit#:1 Entry:40936 Library:WILEY7.LIB
SI:95 Formula:C10 H16 O CAS:25152-84-5 MolWeight:152 RetIndex:0
CompName:2,4-Decadienal, (E,E)- (CAS) trans,trans-2,4-Decadienal \$\$ (E,E)-2,4-Decadienal \$\$ 2,4-trans,trans-Decadienal \$\$ 2-trans-4-trans-Decadienal \$\$ tr



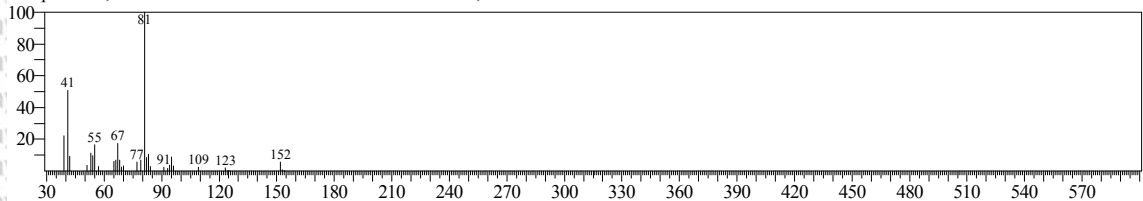
Hit#:2 Entry:40935 Library:WILEY7.LIB
SI:94 Formula:C10 H16 O CAS:2363-88-4 MolWeight:152 RetIndex:0
CompName:2,4 DECADIENAL \$\$ HEPTENYL ACROLEIN \$\$ 2,4-Decadienal \$\$



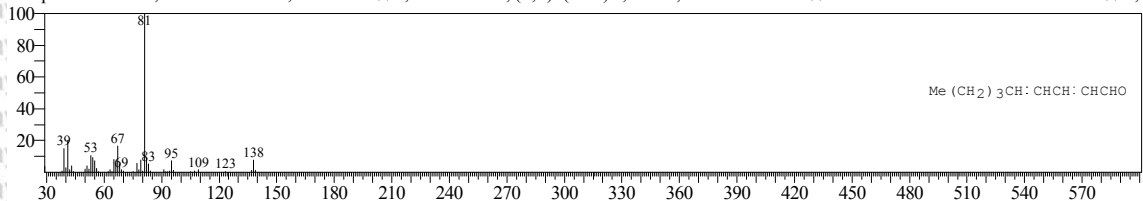
Hit#:3 Entry:40937 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C10 H16 O CAS:25152-84-5 MolWeight:152 RetIndex:0
CompName:2,4-Decadienal, (E,E)- (CAS) trans,trans-2,4-Decadienal \$\$ (E,E)-2,4-Decadienal \$\$ 2,4-trans,trans-Decadienal \$\$ 2-trans-4-trans-Decadienal \$\$ tr



Hit#:4 Entry:40939 Library:WILEY7.LIB
SI:92 Formula:C10 H16 O CAS:2363-88-4 MolWeight:152 RetIndex:0
CompName:2,4 DECADIENAL \$\$ HEPTENYL ACROLEIN \$\$ 2,4-Decadienal \$\$

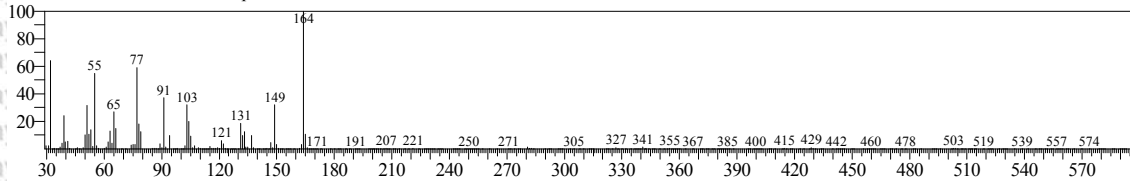


Hit#:5 Entry:27972 Library:WILEY7.LIB
SI:91 Formula:C9 H14 O CAS:5910-87-2 MolWeight:138 RetIndex:0
CompName:TRANS,TRANS-NONA-2,4-DIENAL \$\$ 2,4-Nonadienal, (E,E)- (CAS) 2,4-trans,trans-Nonadienal \$\$ TRANS-2-TRANS-4-NONADIENAL \$\$ E,I

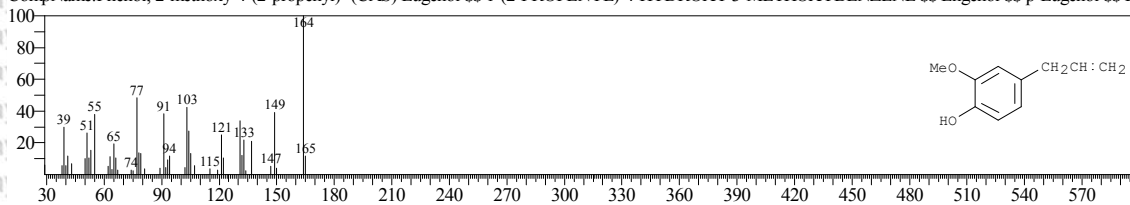


<< Target >>

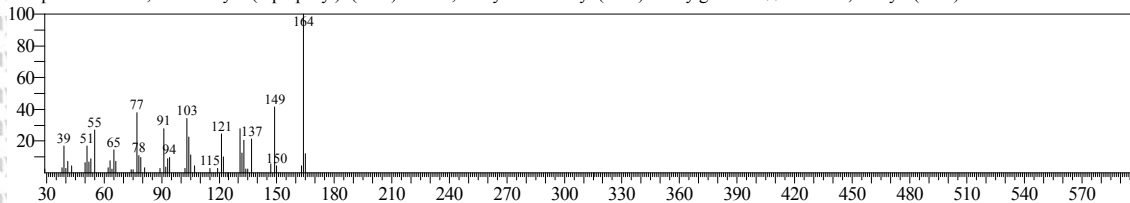
Line#:17 R.Time:15.935(Scan#:2588) MassPeaks:334
RawMode:Averaged 15.930-15.940(2587-2589) BasePeak:163.95(24650)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



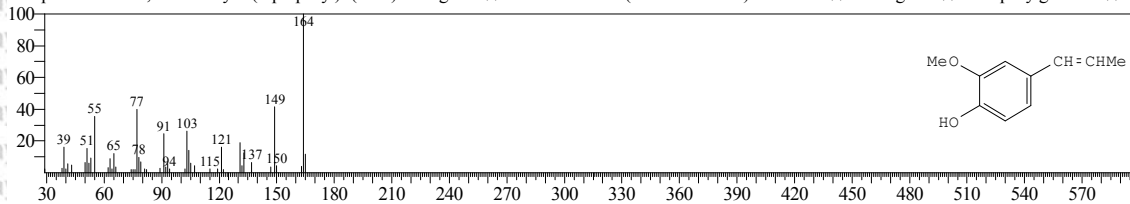
Hit#1 Entry:53660 Library:WILEY7.LIB
SI:87 Formula:C10 H12 O2 CAS:97-53-0 MolWeight:164 RetIndex:0
CompName:Phenol, 2-methoxy-4-(2-propenyl)- (CAS) Eugenol \$\$ 1-(2-PROPENYL)-4-HYDROXY-3-METHOXYBENZENE \$\$ Engenol \$\$ p-Eugenol \$\$ Et



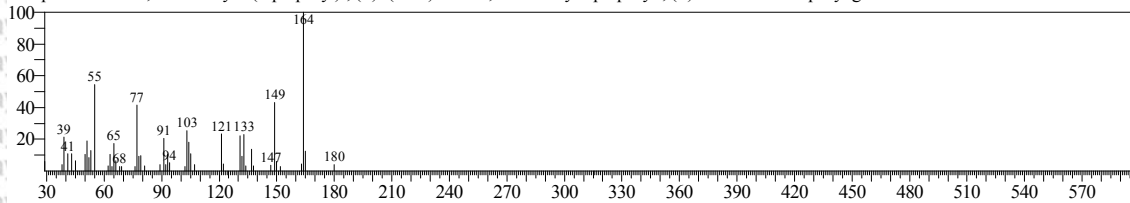
Hit#2 Entry:52834 Library:WILEY7.LIB
SI:84 Formula:C10 H12 O2 CAS:1941-12-4 MolWeight:164 RetIndex:0
CompName:Phenol, 2-methoxy-3-(2-propenyl)- (CAS) Phenol, 3-allyl-2-methoxy- (CAS) 3-Allylguaiacol \$\$ Guaiacol, 3-allyl- (CAS)



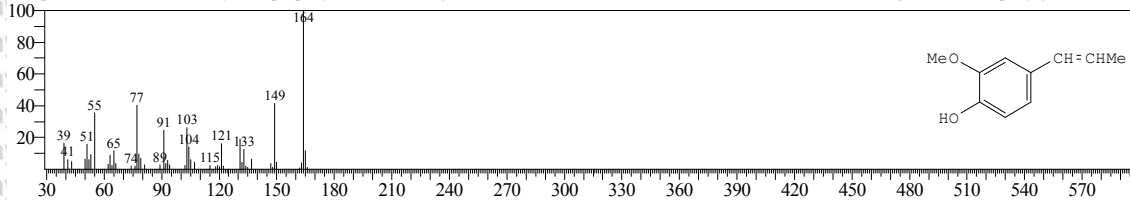
Hit#3 Entry:53650 Library:WILEY7.LIB
SI:84 Formula:C10 H12 O2 CAS:97-54-1 MolWeight:164 RetIndex:0
CompName:Phenol, 2-methoxy-4-(1-propenyl)- (CAS) Isoeugenol \$\$ 2-METHOXY-4-(PROP-1-ENYL)-PHENOL \$\$ iso-Eugenol \$\$ 4-Propenylguaiacol \$\$ 2-



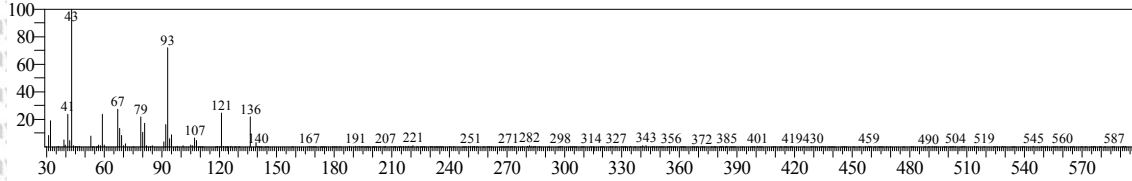
Hit#4 Entry:53714 Library:WILEY7.LIB
SI:84 Formula:C10 H12 O2 CAS:19784-98-6 MolWeight:164 RetIndex:0
CompName:Phenol, 2-methoxy-5-(1-propenyl)-, (E)- (CAS) Phenol, 2-methoxy-5-propenyl-, (E)- \$\$ trans-m-Propenyl guaiacol \$\$ 3157101009 TRANS - ISOE



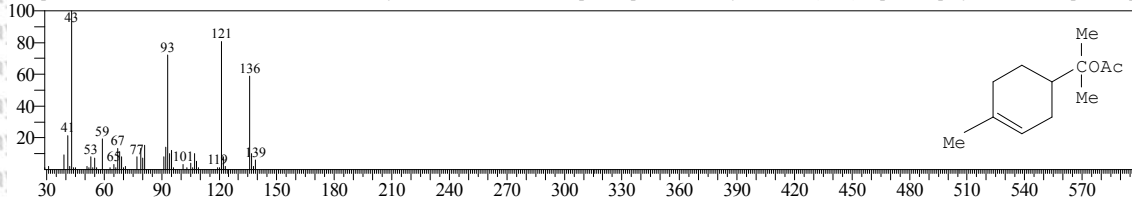
Hit#5 Entry:53649 Library:WILEY7.LIB
SI:83 Formula:C10 H12 O2 CAS:97-54-1 MolWeight:164 RetIndex:0
CompName:Phenol, 2-methoxy-4-(1-propenyl)- (CAS) Isoeugenol \$\$ 2-METHOXY-4-(PROP-1-ENYL)-PHENOL \$\$ iso-Eugenol \$\$ 4-Propenylguaiacol \$\$ 2-



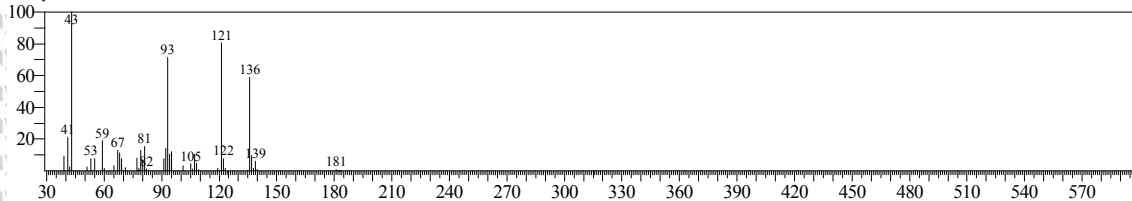
<< Target >>
 Line#:18 R.Time:16.000(Scan#:2601) MassPeaks:288
 RawMode:Averaged 15.995-16.005(2600-2602) BasePeak:42.95(10591)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



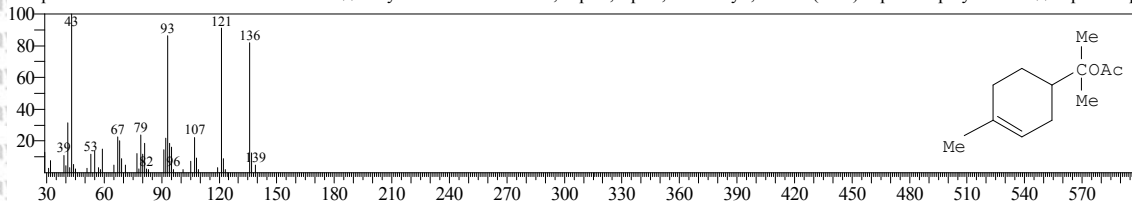
Hit#:1 Entry:91041 Library:WILEY7.LIB
 SI:84 Formula:C12 H20 O2 CAS:80-26-2 MolWeight:196 RetIndex:0
 CompName:1-P-MENTHEN-8-YLACETATE SS 3-Cyclohexene-1-methanol, .alpha.,.alpha.,4-trimethyl-, acetate (CAS) .alpha.-Terpinyl acetate SS .alpha.-Terpi



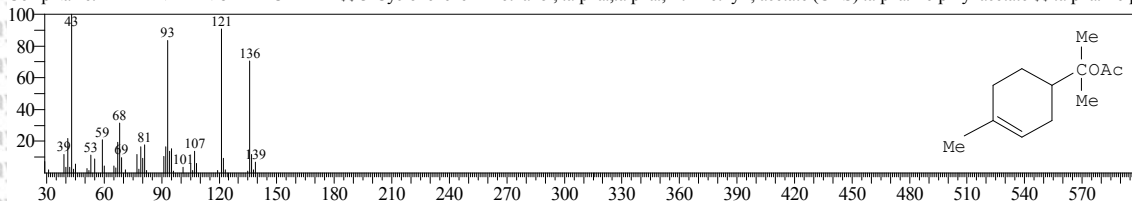
Hit#:2 Entry:90191 Library:WILEY7.LIB
 SI:84 Formula:C12 H20 O2 CAS:0-00-0 MolWeight:196 RetIndex:0
 CompName:ALPHA-TERPINYLACETATE SS



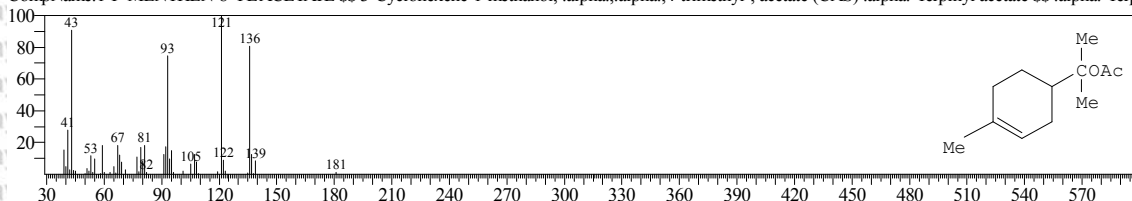
Hit#:3 Entry:91039 Library:WILEY7.LIB
 SI:83 Formula:C12 H20 O2 CAS:80-26-2 MolWeight:196 RetIndex:0
 CompName:1-P-MENTHEN-8-YLACETATE SS 3-Cyclohexene-1-methanol, .alpha.,.alpha.,4-trimethyl-, acetate (CAS) .alpha.-Terpinyl acetate SS .alpha.-Terpi



Hit#:4 Entry:91037 Library:WILEY7.LIB
 SI:82 Formula:C12 H20 O2 CAS:80-26-2 MolWeight:196 RetIndex:0
 CompName:1-P-MENTHEN-8-YLACETATE SS 3-Cyclohexene-1-methanol, .alpha.,.alpha.,4-trimethyl-, acetate (CAS) .alpha.-Terpinyl acetate SS .alpha.-Terpi



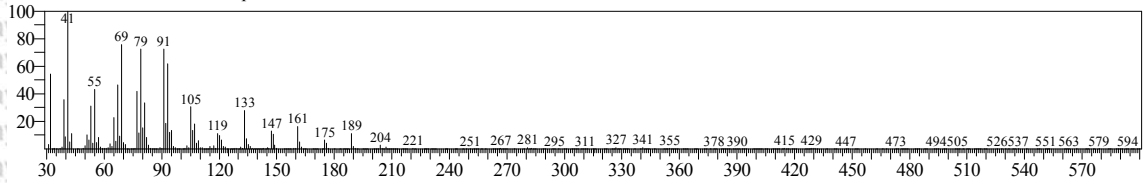
Hit#:5 Entry:91040 Library:WILEY7.LIB
 SI:81 Formula:C12 H20 O2 CAS:80-26-2 MolWeight:196 RetIndex:0
 CompName:1-P-MENTHEN-8-YLACETATE SS 3-Cyclohexene-1-methanol, .alpha.,.alpha.,4-trimethyl-, acetate (CAS) .alpha.-Terpinyl acetate SS .alpha.-Terpi



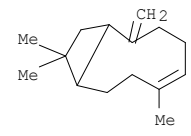
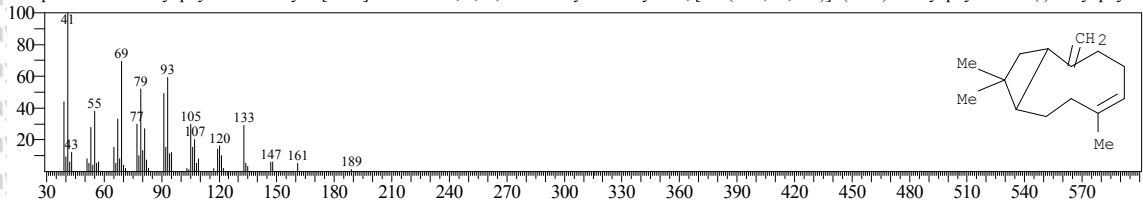


<< Target >>

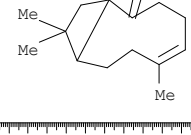
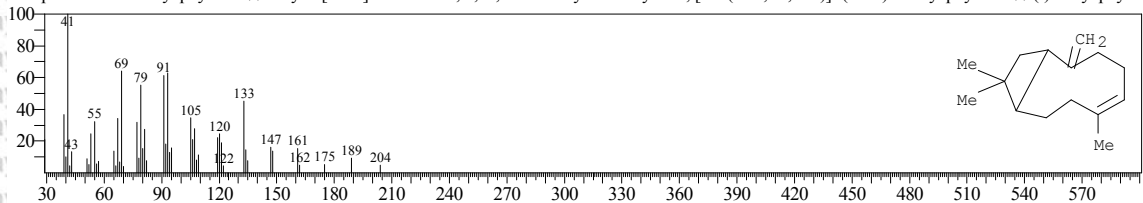
Line#:19 R.Time:18.230(Scan#:3047) MassPeaks:353
RawMode:Averaged 18.225-18.235(3046-3048) BasePeak:40.95(36189)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



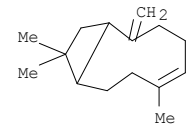
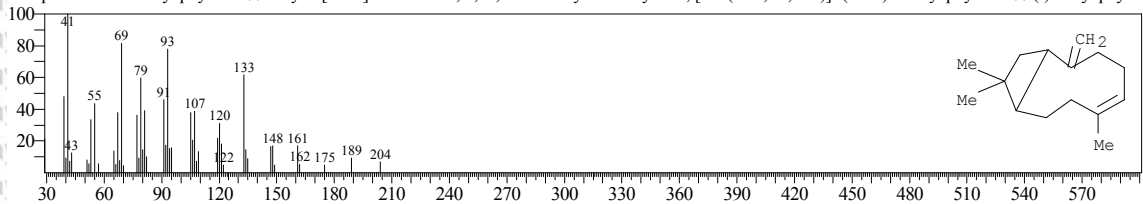
Hit#1 Entry:100789 Library:WILEY7.LIB
SI:91 Formula:C15 H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:trans-Caryophyllene \$\$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS) l-Caryophyllene \$\$ (-)-Caryophylle



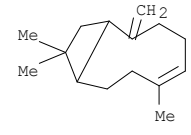
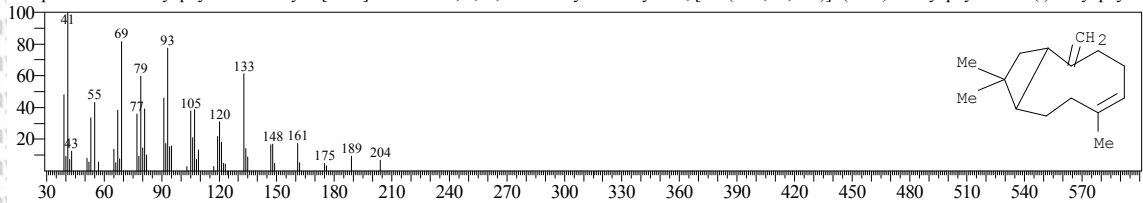
Hit#2 Entry:100788 Library:WILEY7.LIB
SI:91 Formula:C15 H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:trans-Caryophyllene \$\$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS) l-Caryophyllene \$\$ (-)-Caryophylle



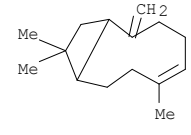
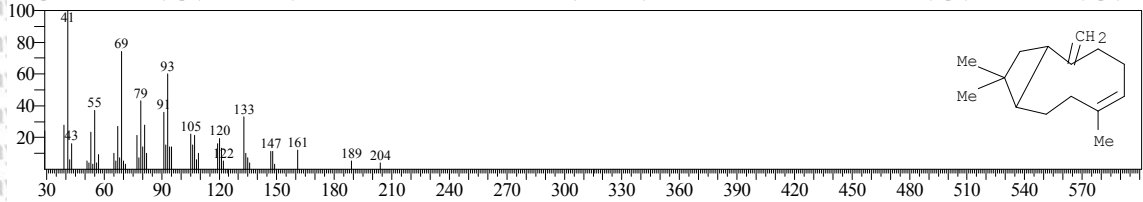
Hit#3 Entry:100781 Library:WILEY7.LIB
SI:90 Formula:C15 H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:trans-Caryophyllene \$\$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS) l-Caryophyllene \$\$ (-)-Caryophylle



Hit#4 Entry:100792 Library:WILEY7.LIB
SI:89 Formula:C15 H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:trans-Caryophyllene \$\$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS) l-Caryophyllene \$\$ (-)-Caryophylle

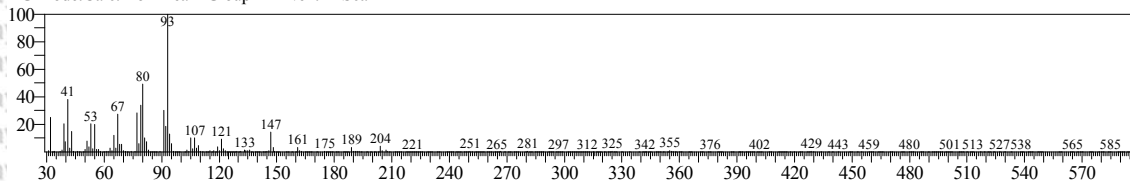


Hit#5 Entry:100786 Library:WILEY7.LIB
SI:89 Formula:C15 H24 CAS:87-44-5 MolWeight:204 RetIndex:0
CompName:trans-Caryophyllene \$\$ Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4E,9S*)]- (CAS) l-Caryophyllene \$\$ (-)-Caryophylle

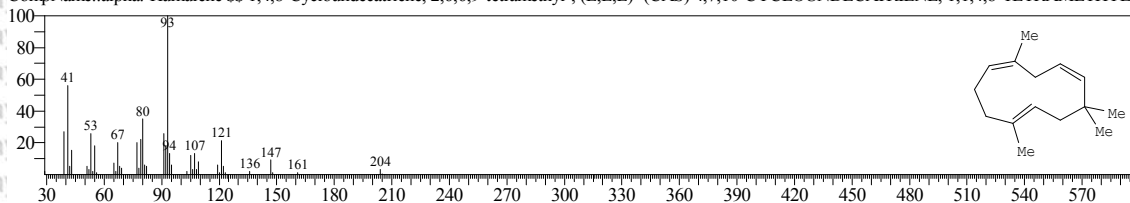


<< Target >>

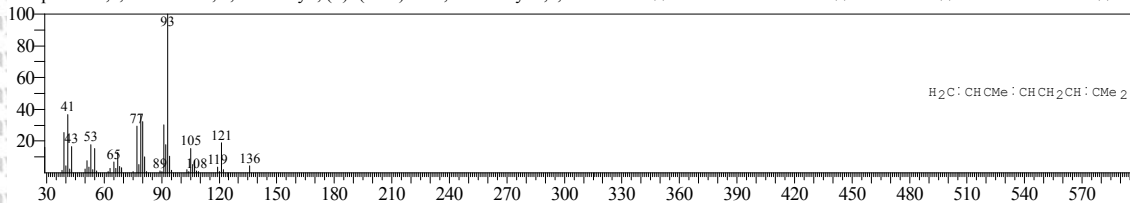
Line#:20 R.Time:19.055(Scan#:3212) MassPeaks:364
 RawMode:Averaged 19.050-19.060(3211-3213) BasePeak:93.05(23775)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



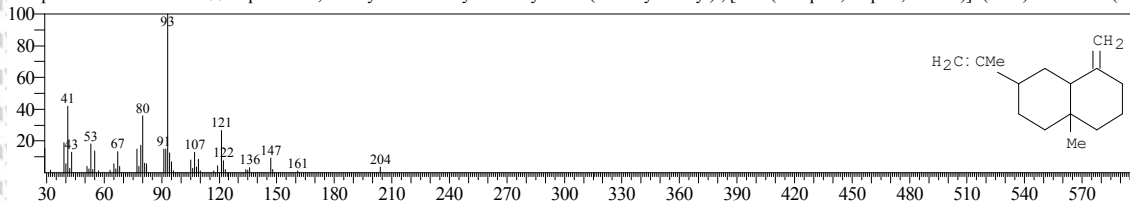
Hit#:1 Entry:100747 Library:WILEY7.LIB
 SI:90 Formula:C15 H24 CAS:6753-98-6 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:.alpha.-Humulene \$\$ 1,4,8-Cycloundecatriene, 2,6,6,9-tetramethyl-, (E,E,E)- (CAS) 4,7,10-CYCLOUNDECATRIENE, 1,1,4,8-TETRAMETHYL-,



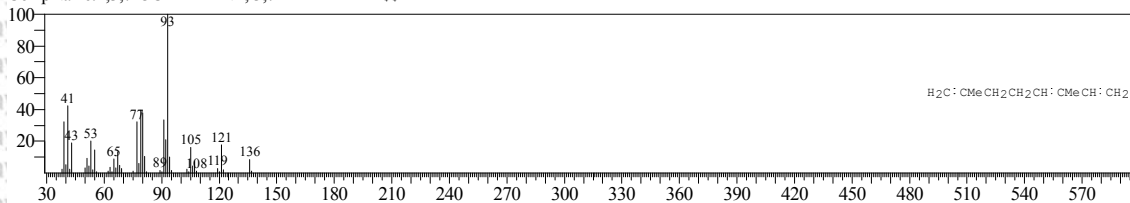
Hit#:2 Entry:26150 Library:WILEY7.LIB
 SI:89 Formula:C10 H16 CAS:3338-55-4 MolWeight:136 RetIndex:0
 CompName:1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-, (Z)- (CAS) cis-3,7-Dimethyl-1,3,6-octatriene \$\$.BETA. OCIMENE X \$\$ Z-OCIMENE \$\$.beta.-cis-OCimene \$\$ cis-



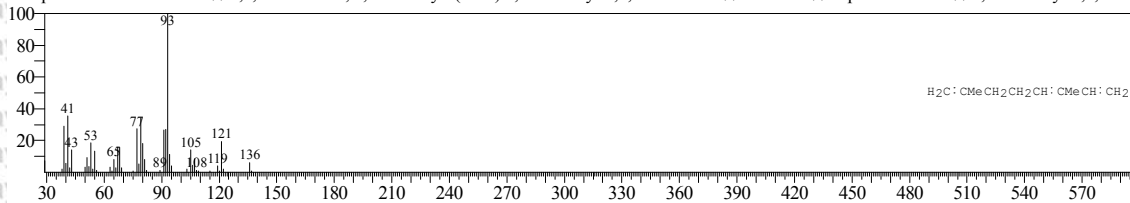
Hit#:3 Entry:100910 Library:WILEY7.LIB
 SI:89 Formula:C15 H24 CAS:17066-67-0 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:.beta.-Selinene \$\$ Naphthalene, decahydro-4a-methyl-1-methylene-7-(1-methylethenyl)-, [4aR-(4a.alpha.,7.alpha.,8a.beta.)]- (CAS) Eudesma-4(14)



Hit#:4 Entry:26179 Library:WILEY7.LIB
 SI:88 Formula:C10 H16 CAS:502-99-8 MolWeight:136 RetIndex:0
 CompName:1,3,7-OCTATRIENE, 3,7-DIMETHYL- \$\$

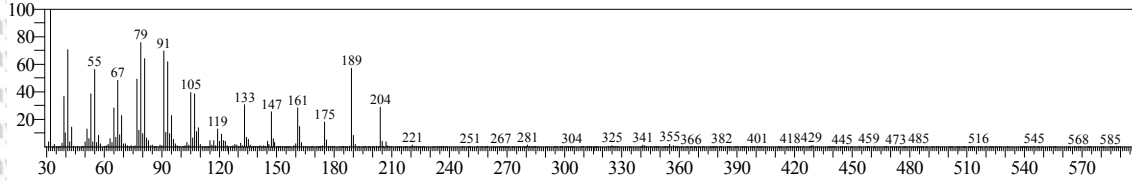


Hit#:5 Entry:26180 Library:WILEY7.LIB
 SI:88 Formula:C10 H16 CAS:502-99-8 MolWeight:136 RetIndex:0
 CompName:Trans-OCimene \$\$ 1,3,7-Octatriene, 3,7-dimethyl- (CAS) 2,6-Dimethyl-1,5,7-octatriene \$\$ OCimene \$\$.alpha.-OCimene \$\$ 3,7-Dimethyl-1,3,7-octa-

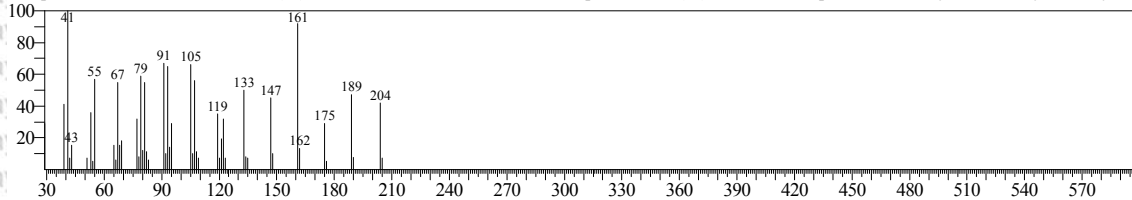


<< Target >>

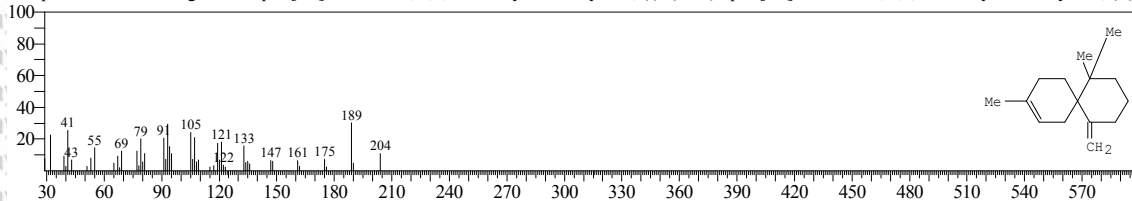
Line#:21 R.Time:20.070(Scan#:3415) MassPeaks:356
 RawMode:Averaged 20.065-20.075(3414-3416) BasePeak:31.90(8005)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



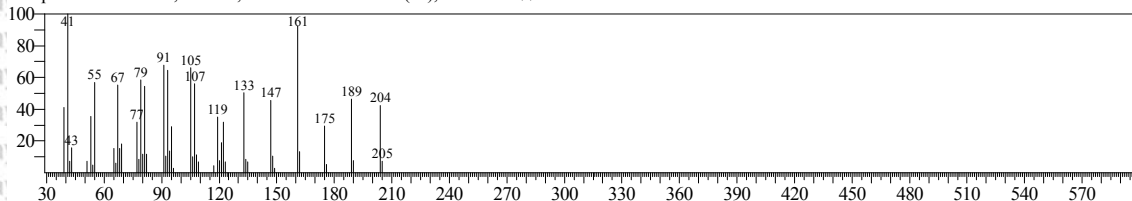
Hit#:1 Entry:100907 Library:WILEY7.LIB
 SI:86 Formula:C15 H24 CAS:29868-52-8 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:5BH,7B,10A,-SELINA-4(14),11-DIENE \$\$ 5-.beta.-H,7-.beta.,10-.alpha.-selina-4(14),11-diene \$\$ Naphthalene, decahydro-4a-methyl-1-methylene-



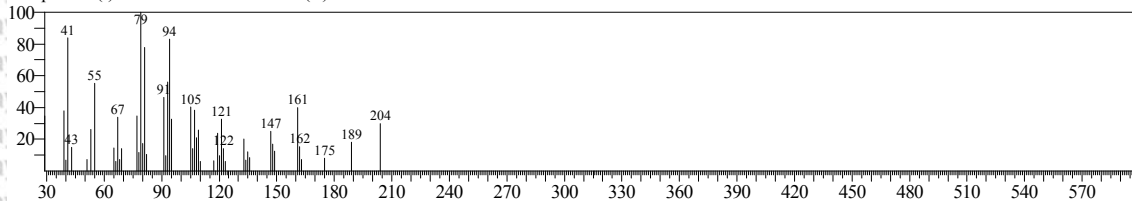
Hit#:2 Entry:100767 Library:WILEY7.LIB
 SI:86 Formula:C15 H24 CAS:18431-82-8 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:.beta.-Chamigrene \$\$ Spiro[5.5]undec-2-ene, 3,7,7-trimethyl-11-methylene-, (-)- (CAS) Spiro[5.5]undec-2-ene, 3,7,7-trimethyl-11-methylene-, (R)-



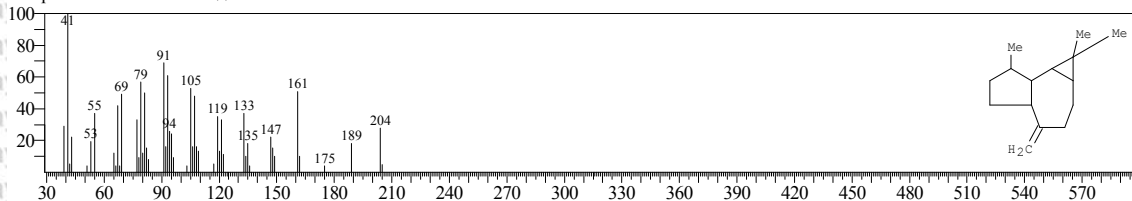
Hit#:3 Entry:100908 Library:WILEY7.LIB
 SI:85 Formula:C15 H24 CAS:29868-52-8 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:5-BETA-H,7-BETA,10-ALPHA-SELINA-4(19),11-DIENE \$\$



Hit#:4 Entry:100346 Library:WILEY7.LIB
 SI:84 Formula:C15 H24 CAS:0-00-0 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:(-)-ISOAROMADENDRENE(V) \$\$



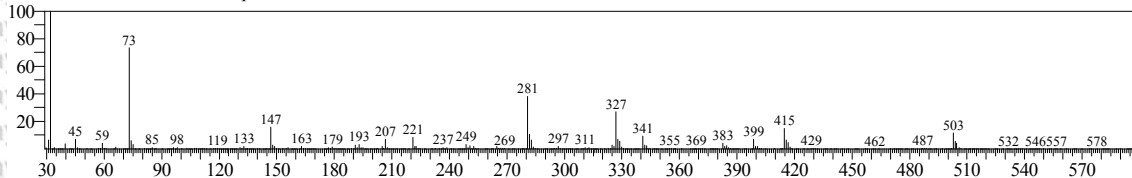
Hit#:5 Entry:101093 Library:WILEY7.LIB
 SI:83 Formula:C15 H24 CAS:489-39-4 MolWeight:204 RetIndex:0
 CompName:Aromadendrene \$\$



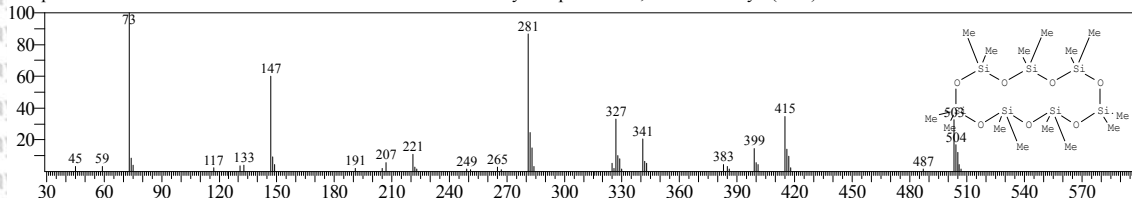


<< Target >>

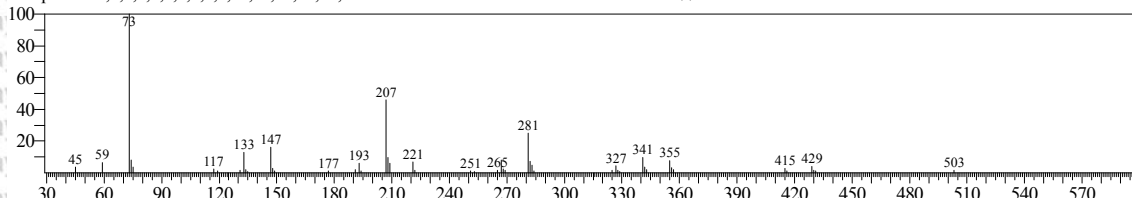
Line#:22 R.Time:20.845(Scan#:3570) MassPeaks:391
RawMode:Averaged 20.840-20.850(3569-3571) BasePeak:31.90(16034)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



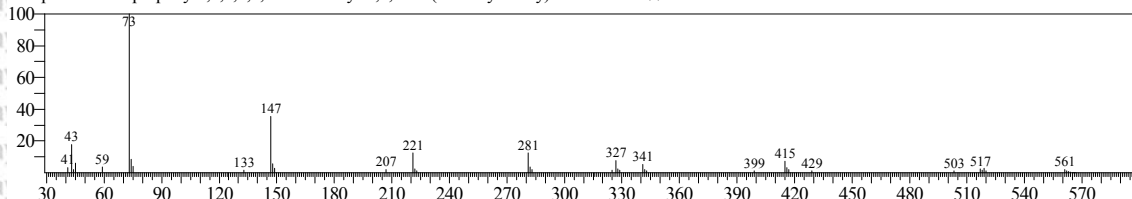
Hit#:1 Entry:319832 Library:WILEY7.LIB
SI:74 Formula:C14 H42 O7 Si7 CAS:107-50-6 MolWeight:518 RetIndex:0
CompName:TETRADECAMETHYLCYCLOHEPTASILOXANE \$\$ Cycloheptasiloxane, tetradecamethyl- (CAS)



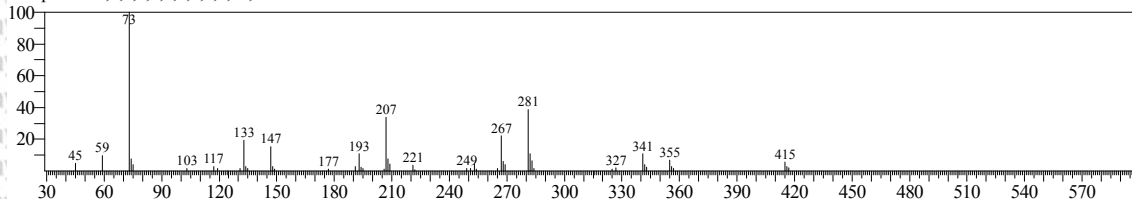
Hit#:2 Entry:326962 Library:WILEY7.LIB
SI:62 Formula:C16 H50 O7 Si8 CAS:19095-24-0 MolWeight:578 RetIndex:0
CompName:1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13,15,15-HEXADECAMETHYL-OCTASILOXANE \$\$



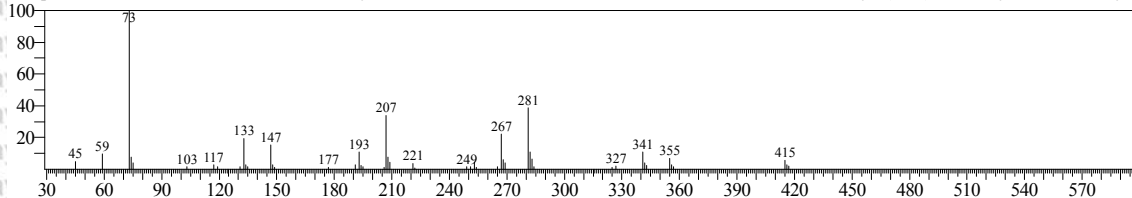
Hit#:3 Entry:326780 Library:WILEY7.LIB
SI:62 Formula:C18 H52 O7 Si7 CAS:71579-69-6 MolWeight:576 RetIndex:0
CompName:3-Isopropoxy-1,1,1,7,7,7-hexamethyl-3,5,5-tris(trimethylsilyloxy)tetrasiloxane \$\$



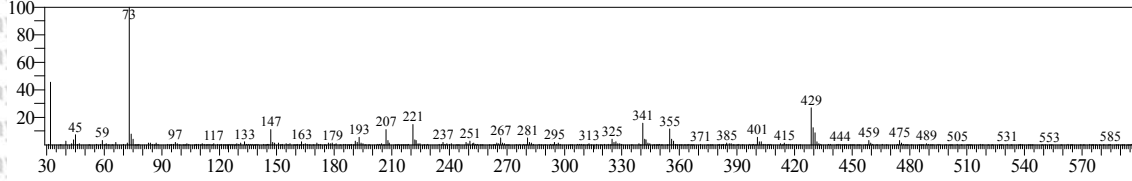
Hit#:4 Entry:297348 Library:WILEY7.LIB
SI:62 Formula:C12 H38 O5 Si6 CAS:0-00-0 MolWeight:430 RetIndex:0
CompName:1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11-DODECAMETHYL-HEXASILOXANE \$\$



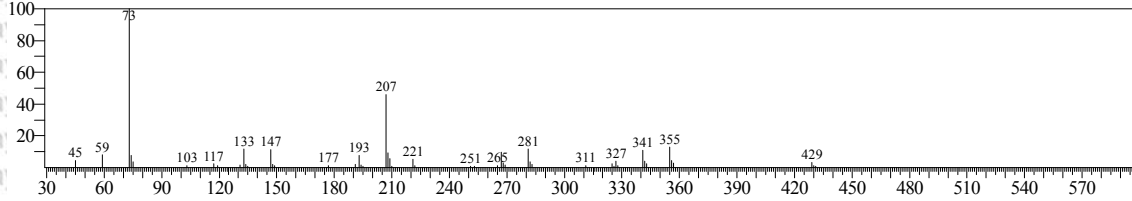
Hit#:5 Entry:297897 Library:WILEY7.LIB
SI:62 Formula:C12 H38 O5 Si6 CAS:995-82-4 MolWeight:430 RetIndex:0
CompName:1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11-dodecamethylhexasiloxane \$\$ Hexasiloxane, 1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11-dodecamethyl- (CAS) 1,11-Dihydrododecamethylh



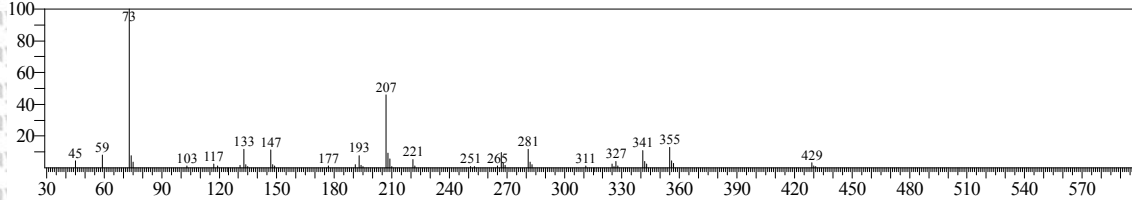
<< Target >>
 Line#:23 R.Time:28.230(Scan#:5047) MassPeaks:364
 RawMode:Averaged 28.225-28.235(5046-5048) BasePeak:73.00(7809)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



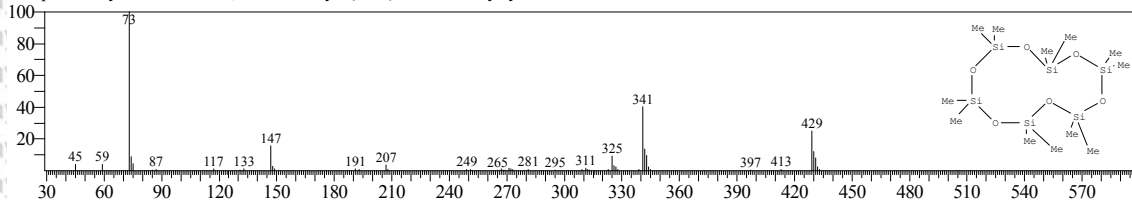
Hit#:1 Entry:317266 Library:WILEY7.LIB
 SI:74 Formula:C14 H44 O6 Si7 CAS:0-00-0 MolWeight:504 RetIndex:0
 CompName:1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13-TETRADECAMETHYL-HEPTASILOXANE \$\$



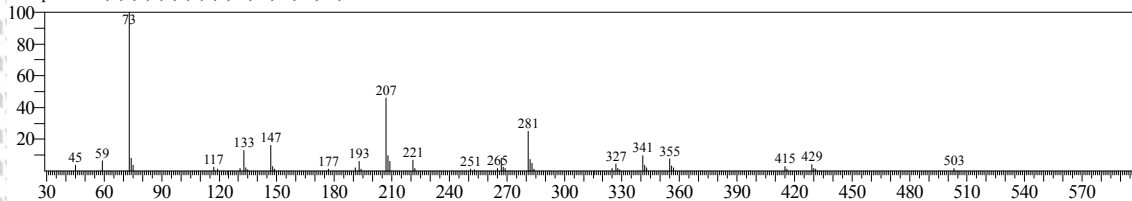
Hit#:2 Entry:317489 Library:WILEY7.LIB
 SI:74 Formula:C14 H44 O6 Si7 CAS:19095-23-9 MolWeight:504 RetIndex:0
 CompName:1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13-tetradecamethylheptasiloxane \$\$ Heptasiloxane, 1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13-tetradecamethyl- (CAS) 1,13-Dihyd



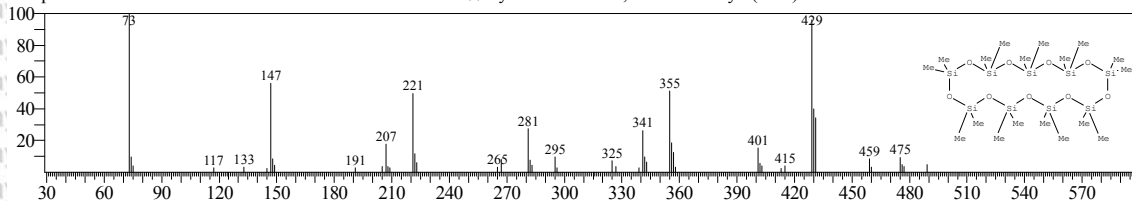
Hit#:3 Entry:302750 Library:WILEY7.LIB
 SI:73 Formula:C12 H36 O6 Si6 CAS:540-97-6 MolWeight:444 RetIndex:0
 CompName:Cyclohexasiloxane, dodecamethyl- (CAS) Dodecamethylcyclohexasiloxane \$\$ DODECAMETHYL-CYCLOHEXASILOXANE \$\$



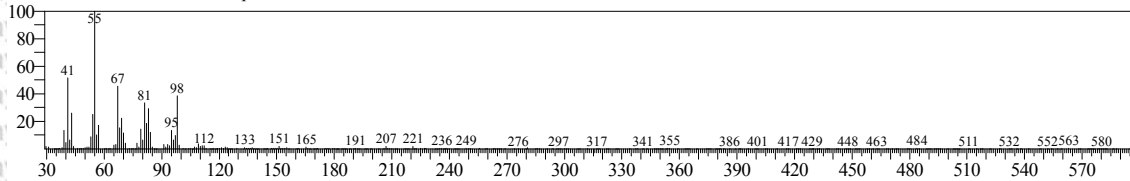
Hit#:4 Entry:326962 Library:WILEY7.LIB
 SI:72 Formula:C16 H50 O7 Si8 CAS:19095-24-0 MolWeight:578 RetIndex:0
 CompName:1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13,15,15-HEXADECAMETHYL-OCTASILOXANE \$\$



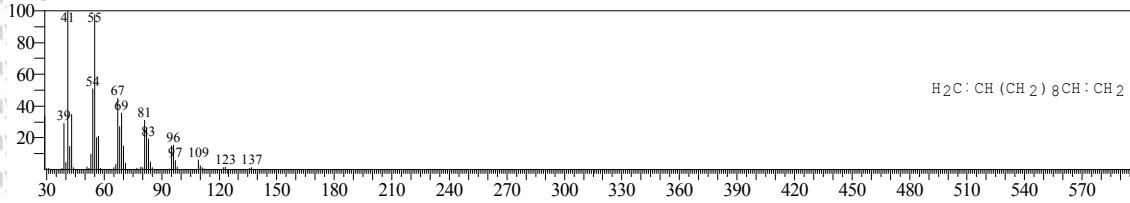
Hit#:5 Entry:332919 Library:WILEY7.LIB
 SI:71 Formula:C18 H54 O9 Si9 CAS:556-71-8 MolWeight:666 RetIndex:0
 CompName:OCTADECAMETHYLCYCLONONASILOXANE \$\$ Cyclononasiloxane, octadecamethyl- (CAS)



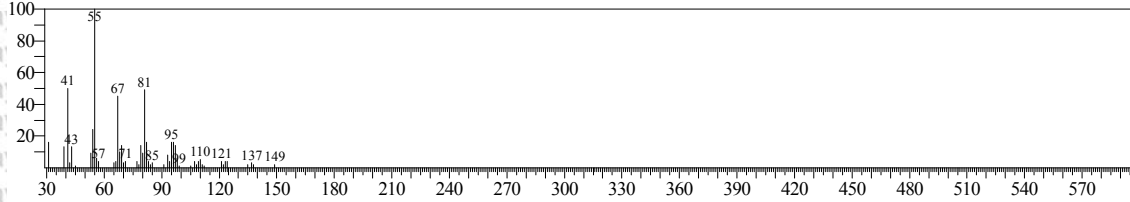
<< Target >>
 Line#:24 R.Time:28.825(Scan#:5166) MassPeaks:313
 RawMode:Averaged 28.820-28.830(5165-5167) BasePeak:54.95(12523)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



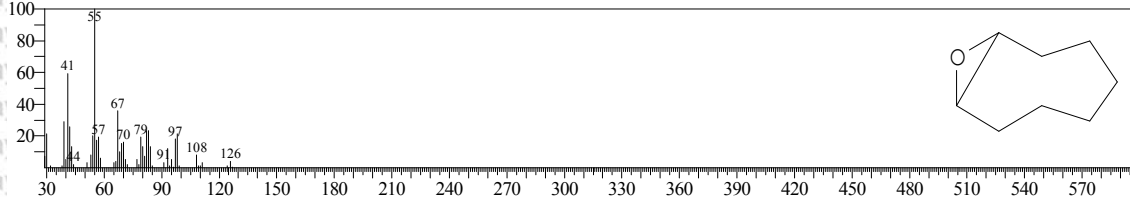
Hit#:1 Entry:56374 Library:WILEY7.LIB
 SI:88 Formula:C12 H22 CAS:5876-87-9 MolWeight:166 RetIndex:0
 CompName:1,11-Dodecadiene (CAS)



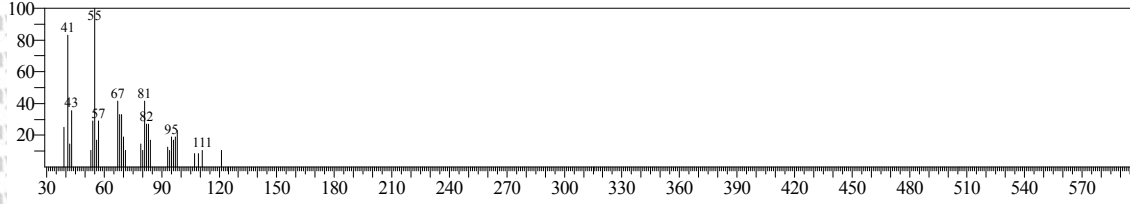
Hit#:2 Entry:143464 Library:WILEY7.LIB
 SI:87 Formula:C16 H30 O CAS:0-00-0 MolWeight:238 RetIndex:0
 CompName:Hexadecadien-7,11 ol-1 \$\$



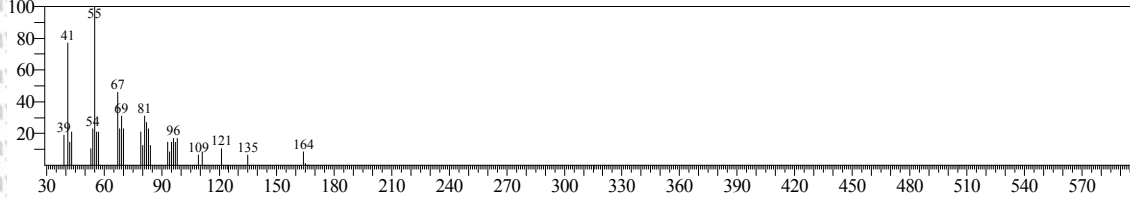
Hit#:3 Entry:18989 Library:WILEY7.LIB
 SI:87 Formula:C8 H14 O CAS:286-62-4 MolWeight:126 RetIndex:0
 CompName:9-Oxabicyclo[6.1.0]nonane (CAS) Cyclooctene oxide \$\$ Cyclooctane, oxide \$\$ Cyclooctane, 1,2-epoxy- \$\$ Epoxycyclooctane \$\$ 1,2-Epoxycyclooctane



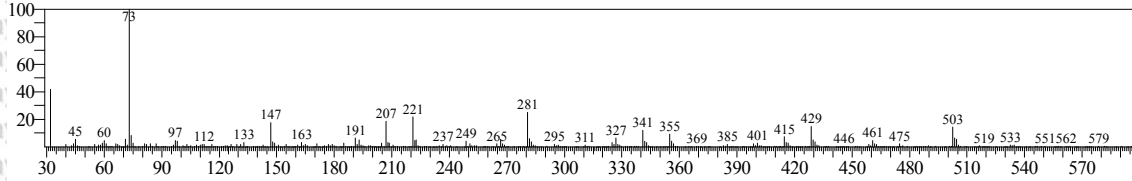
Hit#:4 Entry:73943 Library:WILEY7.LIB
 SI:87 Formula:C12 H22 O CAS:0-00-0 MolWeight:182 RetIndex:0
 CompName:11-DODECEN-1-AL \$\$



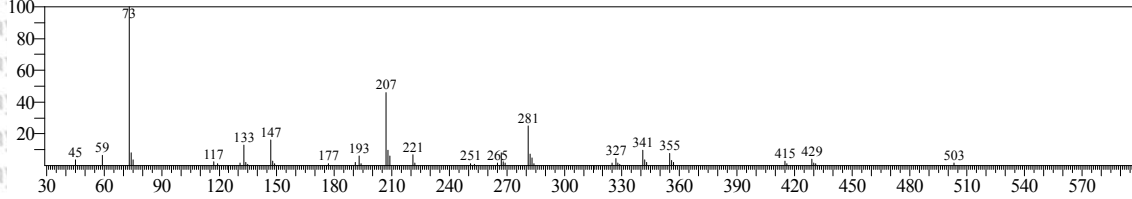
Hit#:5 Entry:73940 Library:WILEY7.LIB
 SI:87 Formula:C12 H22 O CAS:0-00-0 MolWeight:182 RetIndex:0
 CompName:8-DODECEN-1-AL \$\$



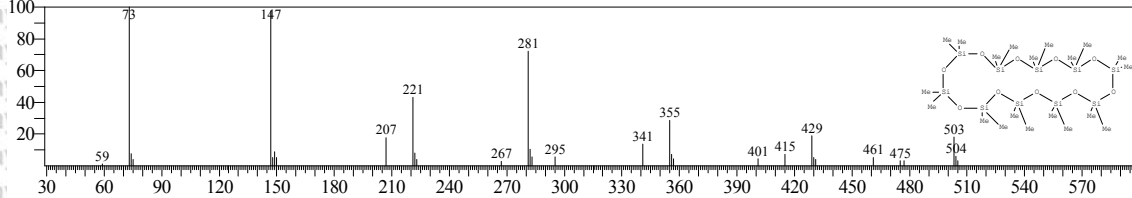
<< Target >>
 Line#:26 R.Time:31.330(Scan#:5667) MassPeaks:395
 RawMode:Averaged 31.325-31.335(5666-5668) BasePeak:73.00(5935)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



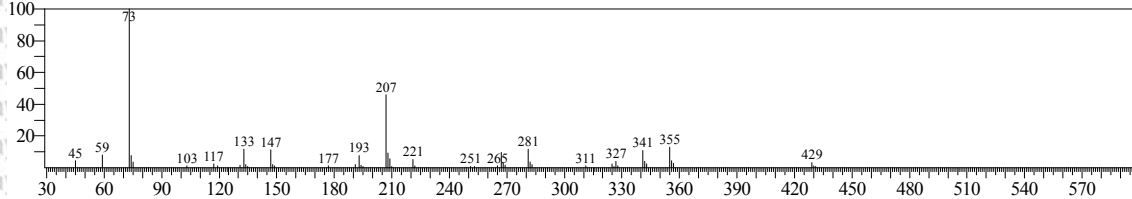
Hit#:1 Entry:326962 Library:WILEY7.LIB
 SI:75 Formula:C16 H50 O7 S18 CAS:19095-24-0 MolWeight:578 RetIndex:0
 CompName:1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13,15,15-HEXADECAMETHYL-OCTASILOXANE \$\$



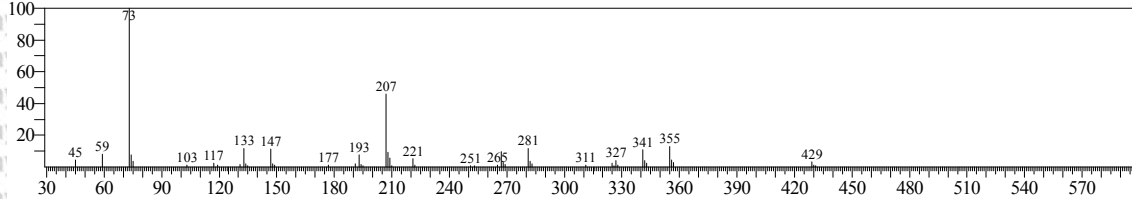
Hit#:2 Entry:335377 Library:WILEY7.LIB
 SI:73 Formula:C20 H60 O10 S110 CAS:18772-36-6 MolWeight:740 RetIndex:0
 CompName:EICOSAMETHYLCYCLODECASILOXANE \$\$ CYCLODECASILOXANE, EICOSAMETHYL- \$\$



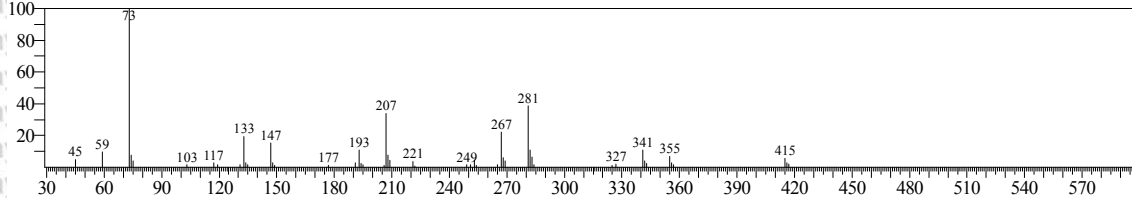
Hit#:3 Entry:317266 Library:WILEY7.LIB
 SI:71 Formula:C14 H44 O6 S17 CAS:0-00-0 MolWeight:504 RetIndex:0
 CompName:1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13-TETRADECAMETHYL-HEPTASILOXANE \$\$



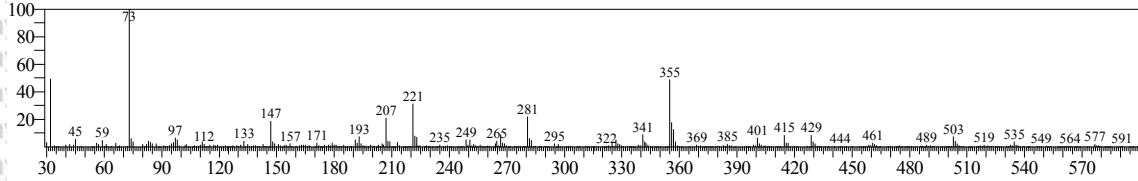
Hit#:4 Entry:317489 Library:WILEY7.LIB
 SI:71 Formula:C14 H44 O6 S17 CAS:19095-23-9 MolWeight:504 RetIndex:0
 CompName:1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13-tetradecamethylheptasiloxane \$\$ Heptasiloxane, 1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13-tetradecamethyl- (CAS) 1,13-Dihydro



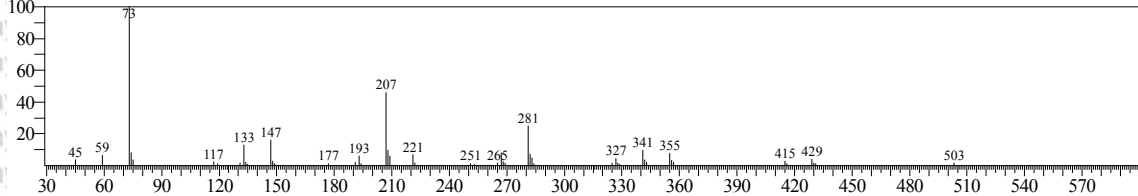
Hit#:5 Entry:297897 Library:WILEY7.LIB
 SI:71 Formula:C12 H38 O5 S16 CAS:995-82-4 MolWeight:430 RetIndex:0
 CompName:1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11-dodecamethylhexasiloxane \$\$ Hexasiloxane, 1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11-dodecamethyl- (CAS) 1,11-Dihydrododecamethylh



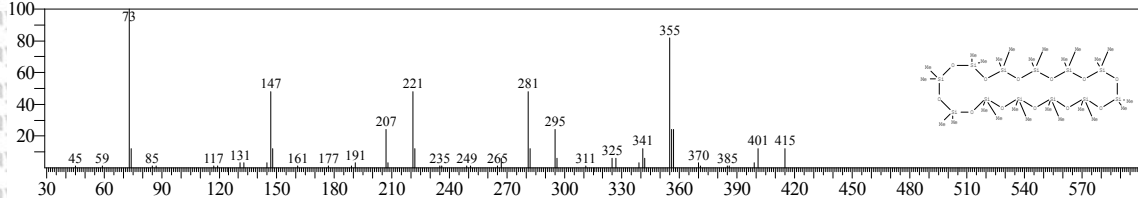
<< Target >>
 Line#:27 R.Time:34.170(Scan#:6235) MassPeaks:424
 RawMode:Averaged 34.165-34.175(6234-6236) BasePeak:73.00(6211)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



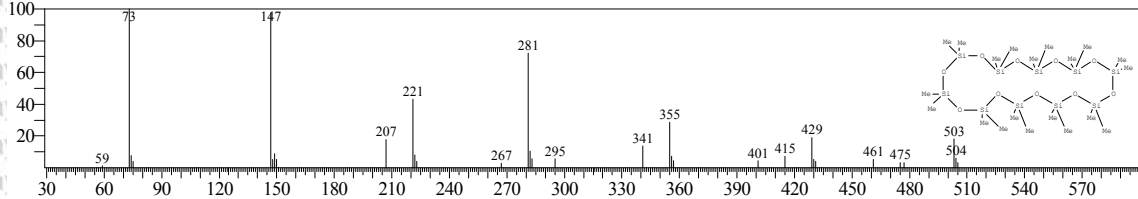
Hit#:1 Entry:326962 Library:WILEY7.LIB
 SI:73 Formula:C16 H50 O7 S18 CAS:19095-24-0 MolWeight:578 RetIndex:0
 CompName:1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13,15,15-HEXADECAMETHYL-OCTASILOXANE \$\$



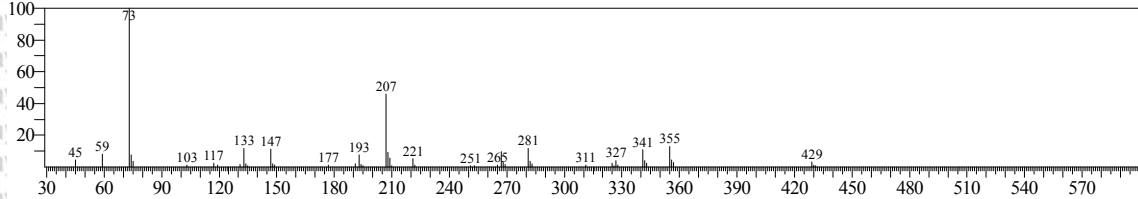
Hit#:2 Entry:337317 Library:WILEY7.LIB
 SI:72 Formula:C24 H72 O12 S112 CAS:18919-94-3 MolWeight:888 RetIndex:0
 CompName:TETRACOSAMETHYLCYCLODODECASILOXANE \$\$ Cyclododecasiloxane, tetracosamethyl- (CAS)



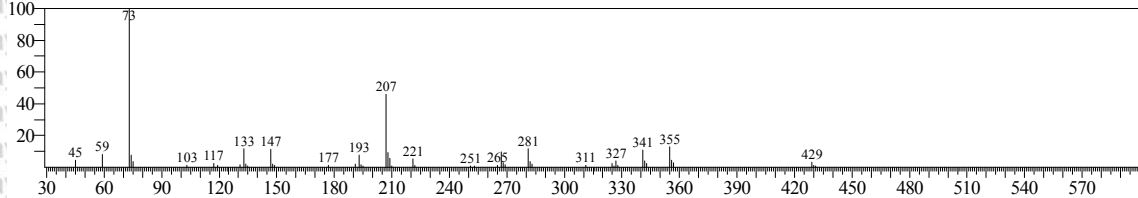
Hit#:3 Entry:335377 Library:WILEY7.LIB
 SI:71 Formula:C20 H60 O10 S110 CAS:18772-36-6 MolWeight:740 RetIndex:0
 CompName:EICOSAMETHYLCYCLODECASILOXANE \$\$ CYCLODECASILOXANE, EICOSAMETHYL- \$\$



Hit#:4 Entry:317489 Library:WILEY7.LIB
 SI:70 Formula:C14 H44 O6 S17 CAS:19095-23-9 MolWeight:504 RetIndex:0
 CompName:1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13-tetradecamethylheptasiloxane \$\$ Heptasiloxane, 1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13-tetradecamethyl- (CAS) 1,13-Dihyd



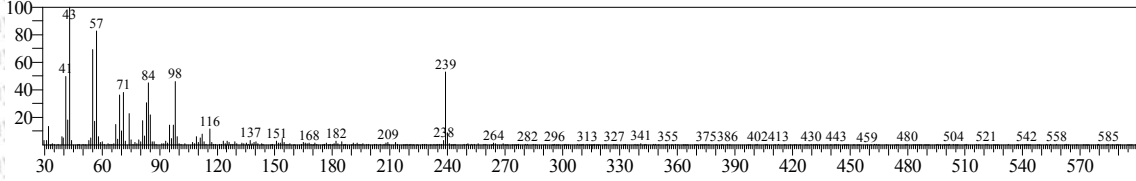
Hit#:5 Entry:317266 Library:WILEY7.LIB
 SI:70 Formula:C14 H44 O6 S17 CAS:0-00-0 MolWeight:504 RetIndex:0
 CompName:1,1,3,3,5,5,7,7,9,9,11,11,13,13-TETRADECAMETHYL-HEPTASILOXANE \$\$



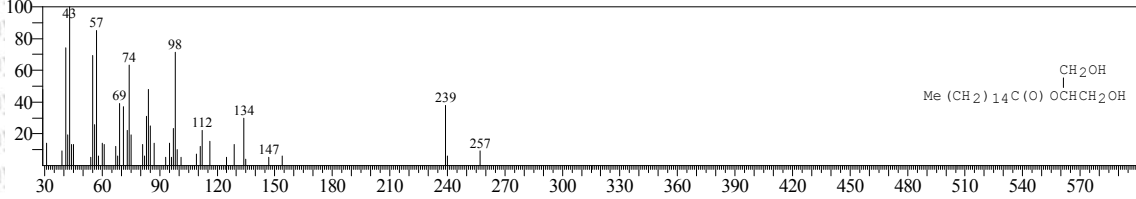


<< Target >>

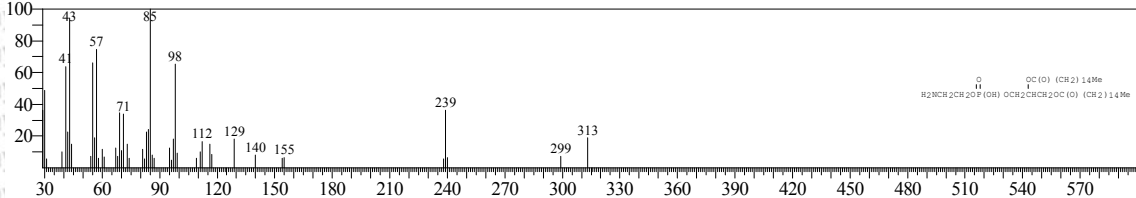
Line#:28 R.Time:34.990(Scan#:6399) MassPeaks:344
 RawMode:Averaged 34.985-34.995(6398-6400) BasePeak:42.95(8464)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



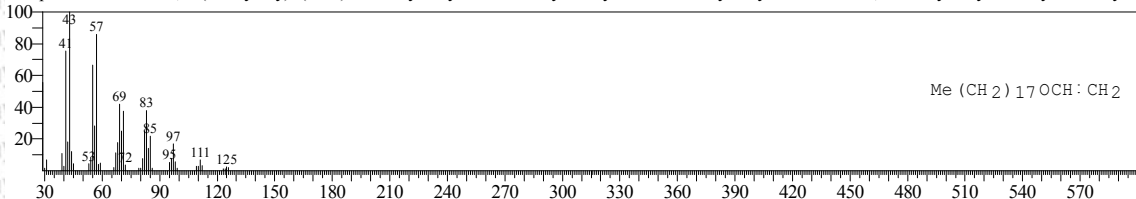
Hit#:1 Entry:239090 Library:WILEY7.LIB
 SI:84 Formula:C19 H38 O4 CAS:23470-00-0 MolWeight:330 RetIndex:0
 CompName:Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1-(hydroxymethyl)ethyl ester (CAS) 2-Monopalmitin \$\$ Palmitin, 2-mono- \$\$ 2-Hexadecanoyl glycerol \$\$ 2-Monop



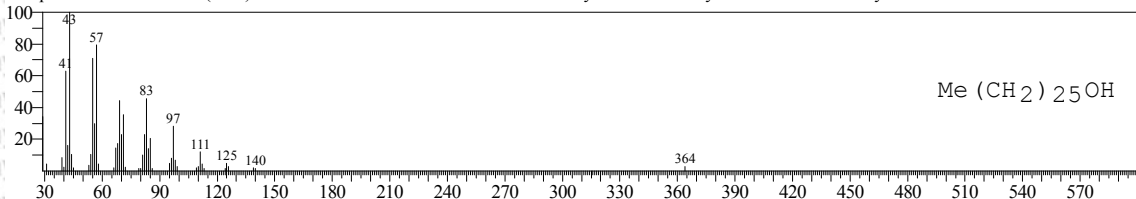
Hit#:2 Entry:333908 Library:WILEY7.LIB
 SI:83 Formula:C37 H74 N O8 P CAS:3026-45-7 MolWeight:692 RetIndex:0
 CompName:Hexadecanoic acid, 1-[[[(2-aminoethoxy)hydroxyphosphinyl]oxy]methyl]-1,2-ethanediyl ester (CAS) DIPALMITOYL PHOSPHATIDYL ETHANO



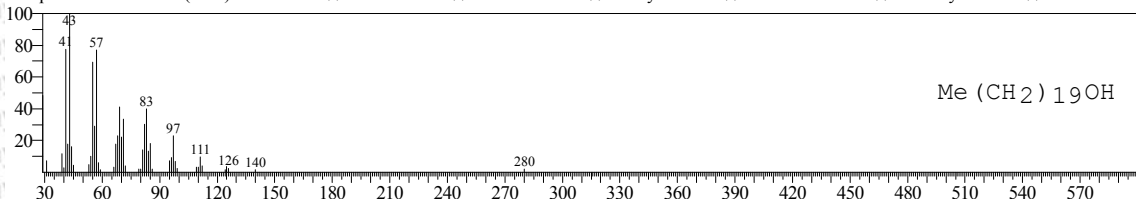
Hit#:3 Entry:207635 Library:WILEY7.LIB
 SI:83 Formula:C20 H40 O CAS:930-02-9 MolWeight:296 RetIndex:0
 CompName:Octadecane, 1-(ethenoxy)- (CAS) Octadecyl vinyl ether \$\$ Vinyl stearyl ether \$\$ Stearyl vinyl ether \$\$ Ether, octadecyl vinyl \$\$ Vinyl octadecyl e



Hit#:4 Entry:274885 Library:WILEY7.LIB
 SI:82 Formula:C26 H54 O CAS:506-52-5 MolWeight:382 RetIndex:0
 CompName:1-Hexacosanol (CAS) HEXACOSANOL-1 \$\$ n-Hexacosanol \$\$ Ceryl alcohol \$\$ Cerylic alcohol \$\$ Hexacosyl alcohol \$\$



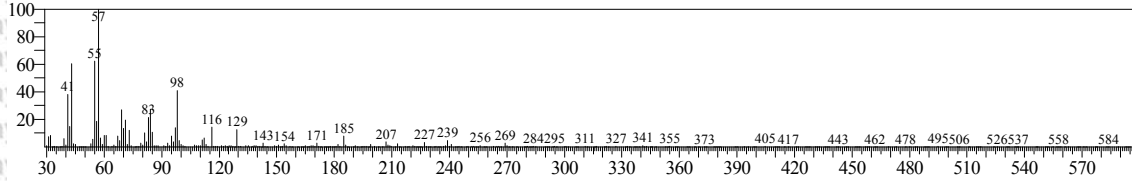
Hit#:5 Entry:209945 Library:WILEY7.LIB
 SI:82 Formula:C20 H42 O CAS:629-96-9 MolWeight:298 RetIndex:0
 CompName:1-Eicosanol (CAS) n-Eicosanol \$\$ n-1-Eicosanol \$\$ Arachic alcohol \$\$ Eicosyl alcohol \$\$ Arachidic alcohol \$\$ Arachidyl alcohol \$\$ EICOSANOL



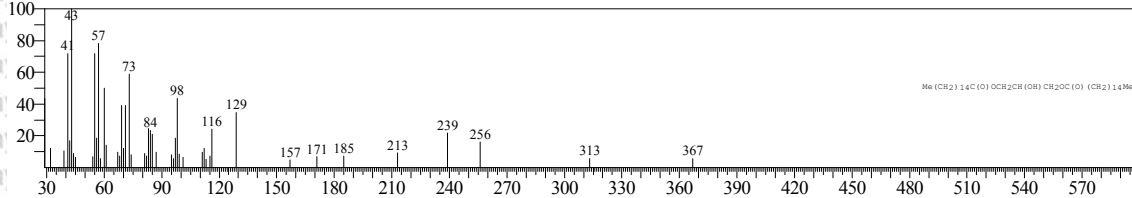


<< Target >>

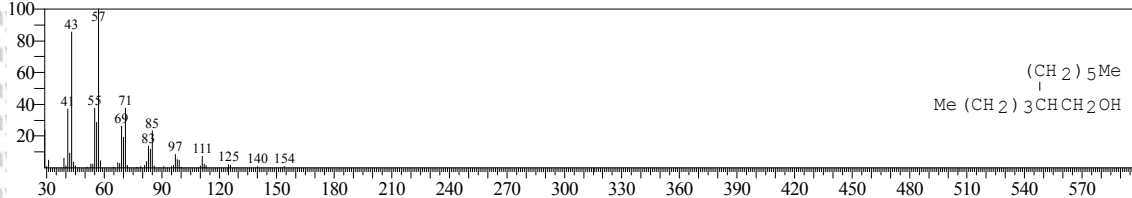
Line#:29 R.Time:35.800(Scan#:6561) MassPeaks:331
RawMode:Averaged 35.795-35.805(6560-6562) BasePeak:57.00(13755)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



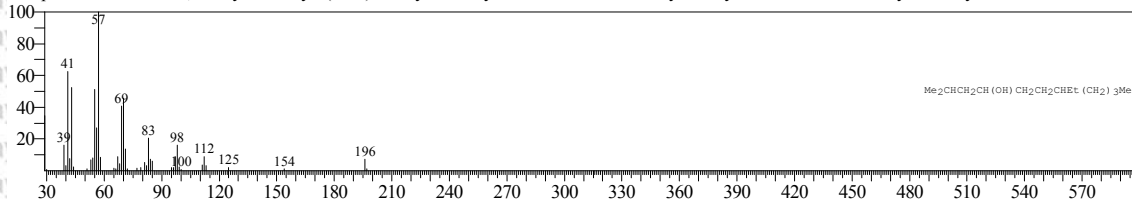
Hit#:1 Entry:326223 Library:WILEY7.LIB
SI:83 Formula:C35 H68 O5 CAS:502-52-3 MolWeight:569 RetIndex:0
CompName:Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1,3-propanediyl ester (CAS) GLYCEROL 1,3-DIHEXADECANOATE \$\$ 1,3-Dipalmitin \$\$ Palmitin, 1,3-di- \$\$ 1,3-



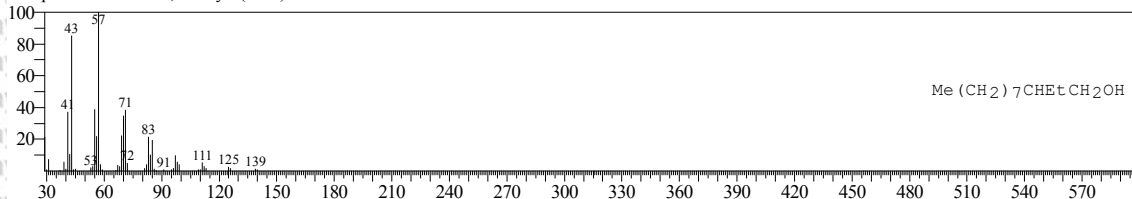
Hit#:2 Entry:79279 Library:WILEY7.LIB
SI:82 Formula:C12 H26 O CAS:3913-02-8 MolWeight:186 RetIndex:0
CompName:1-Octanol, 2-butyl- (CAS) 2-Butyl-1-octanol \$\$ 2-Butyloctanol \$\$ 2-Butyloctyl alcohol \$\$ 5-(Hydroxymethyl)undecane \$\$



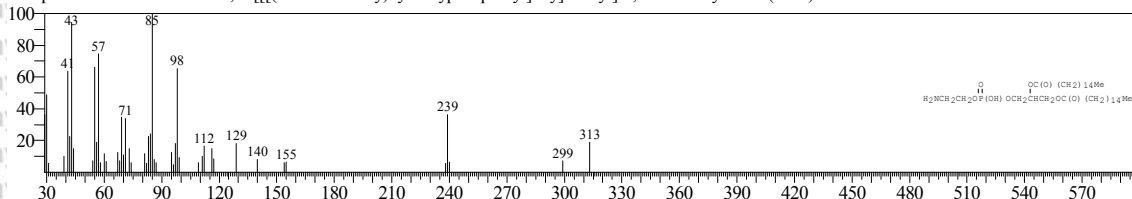
Hit#:3 Entry:113632 Library:WILEY7.LIB
SI:81 Formula:C14 H30 O CAS:103-20-8 MolWeight:214 RetIndex:0
CompName:4-Undecanol, 7-ethyl-2-methyl- (CAS) 7-Ethyl-2-methyl-4-undecanol \$\$ 2-Methyl-7-ethyl-4-undecanol \$\$ 7-Ethyl-2-methyl-4-hendecanol \$\$



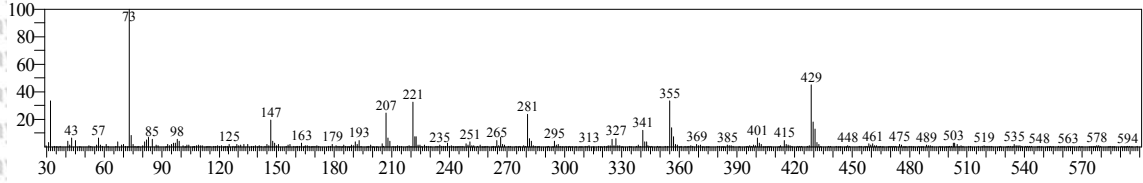
Hit#:4 Entry:78625 Library:WILEY7.LIB
SI:81 Formula:C12 H26 O CAS:21078-65-9 MolWeight:186 RetIndex:0
CompName:1-Decanol, 2-ethyl- (CAS)



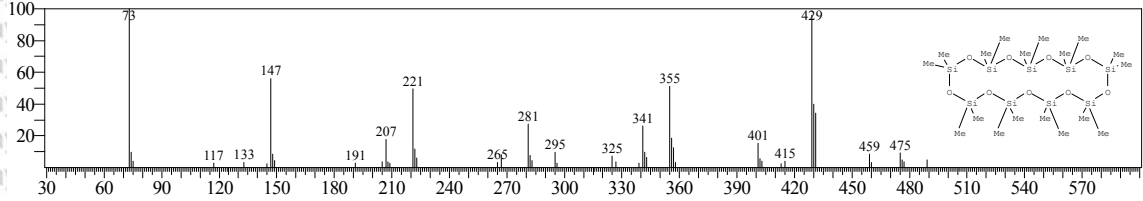
Hit#:5 Entry:333908 Library:WILEY7.LIB
SI:81 Formula:C37 H74 N O8 P CAS:3026-45-7 MolWeight:692 RetIndex:0
CompName:Hexadecanoic acid, 1-[[[(2-aminoethoxy)hydroxyphosphinyl]oxy]methyl]-1,2-ethanediyl ester (CAS) DIPALMITOYL PHOSPHATIDYL ETHANO



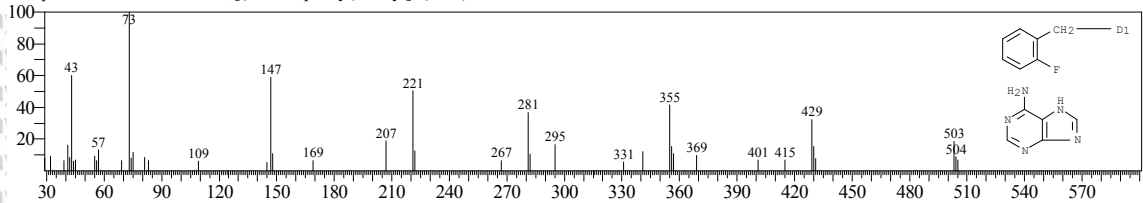
<< Target >>
 Line#:31 R.Time:36.755(Scan#:6752) MassPeaks:413
 RawMode:Averaged 36.750-36.760(6751-6753) BasePeak:73.00(6404)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



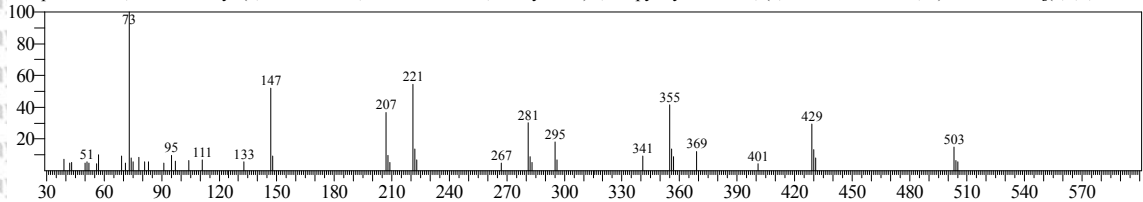
Hit#:1 Entry:332919 Library:WILEY7.LIB
 SI:75 Formula:C18 H54 O9 Si9 CAS:556-71-8 MolWeight:666 RetIndex:0
 CompName:OCTADECAMETHYLCYCLONONASILOXANE \$\$ Cyclononasiloxane, octadecamethyl- (CAS)



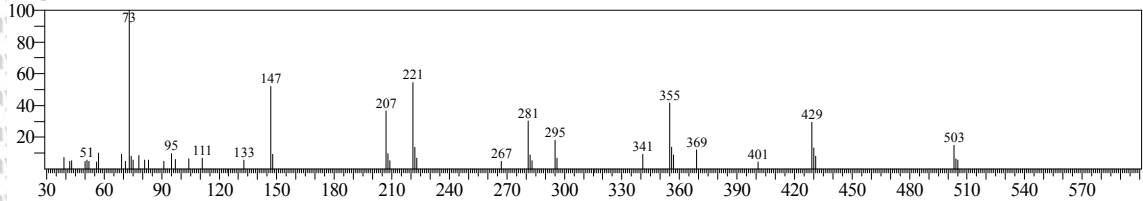
Hit#:2 Entry:148639 Library:WILEY7.LIB
 SI:73 Formula:C12 H10 F N5 CAS:74421-44-6 MolWeight:243 RetIndex:0
 CompName:1H-Purin-6-amine, [(2-fluorophenyl)methyl]- (CAS)



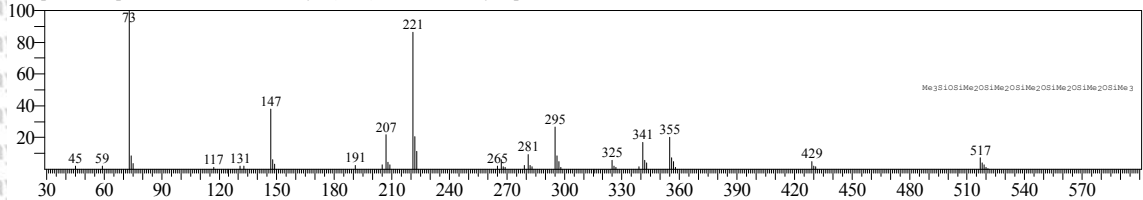
Hit#:3 Entry:300653 Library:WILEY7.LIB
 SI:72 Formula:C21 H22 FE N2 O5 CAS:109007-87-6 MolWeight:438 RetIndex:0
 CompName:Iron, monocarbonyl-(1,3-butadiene-1,4-dicarboxylic acid, diethyl ester) a,a'-dipyridyl \$\$ IRON, (2,2'-BIPYRIDINE-N,N')CARBONYL[(2,3,4,5-ETA



Hit#:4 Entry:338296 Library:WILEY7.LIB
 SI:72 Formula: CAS:0-00-0 MolWeight:9999 RetIndex:0
 CompName:SILIKONFETT SE30 (GREVELS) \$\$ Silicone oil \$\$



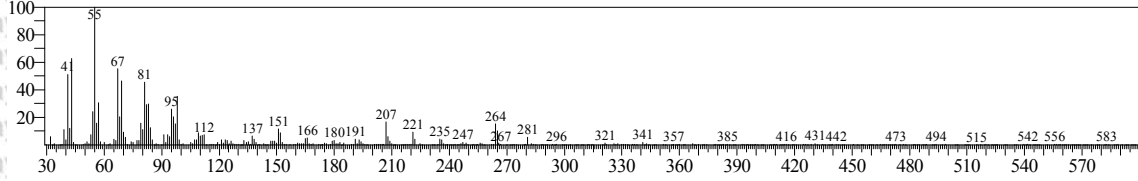
Hit#:5 Entry:321725 Library:WILEY7.LIB
 SI:71 Formula:C16 H48 O6 Si7 CAS:541-01-5 MolWeight:532 RetIndex:0
 CompName:Heptasiloxane, hexadecamethyl- (CAS) Hexadecamethylheptasiloxane \$\$



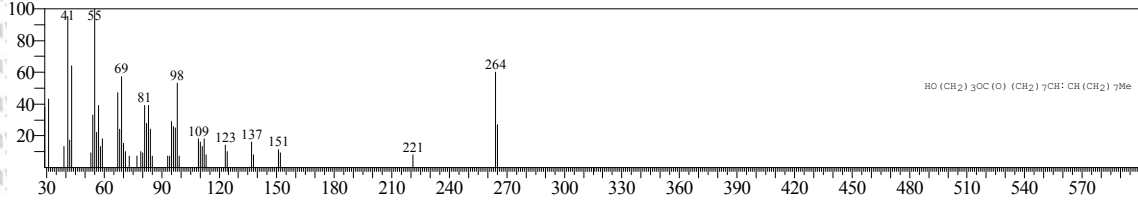


<< Target >>

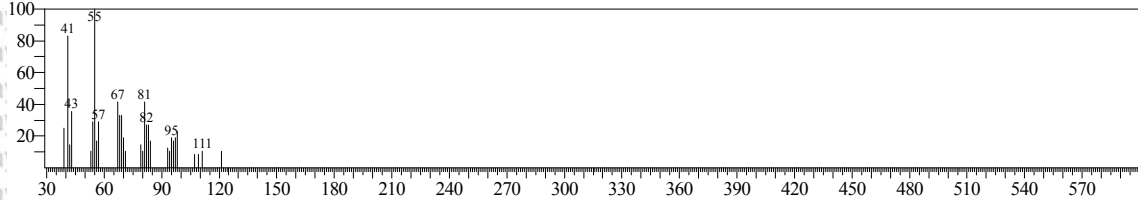
Line#:32 R.Time:37.890(Scan#:6979) MassPeaks:399
RawMode:Averaged 37.885-37.895(6978-6980) BasePeak:55.00(8841)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



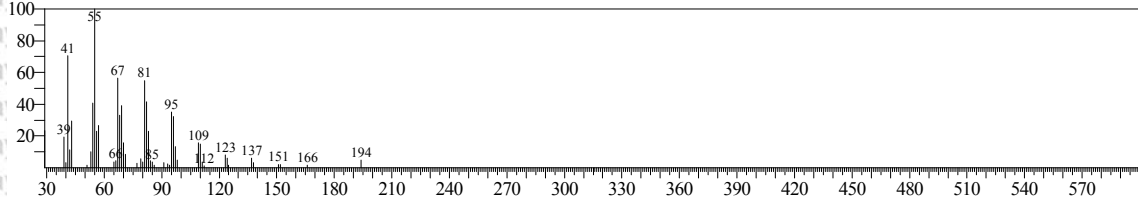
Hit#:1 Entry:246839 Library:WILEY7.LIB
SI:85 Formula:C21 H40 O3 CAS:821-17-0 MolWeight:340 RetIndex:0
CompName:Oleic acid, 3-hydroxypropyl ester (CAS) 1-O-CIS-9-OCTADECENOYL-1,3-PROPANEDIOL \$\$



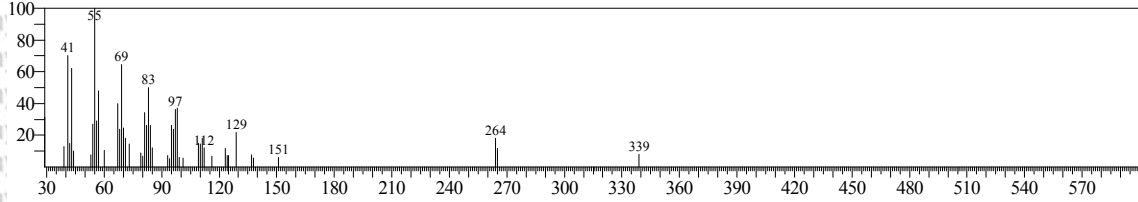
Hit#:2 Entry:73943 Library:WILEY7.LIB
SI:84 Formula:C12 H22 O CAS:0-00-0 MolWeight:182 RetIndex:0
CompName:11-DODECEN-1-AL \$\$



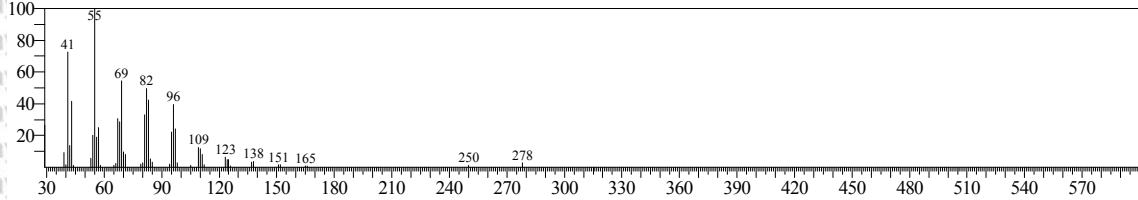
Hit#:3 Entry:88007 Library:WILEY7.LIB
SI:84 Formula:C14 H26 CAS:112929-06-3 MolWeight:194 RetIndex:0
CompName:1,9-TETRADECADIENE (CAS)



Hit#:4 Entry:330530 Library:WILEY7.LIB
SI:83 Formula:C39 H72 O5 CAS:2465-32-9 MolWeight:621 RetIndex:0
CompName:DI-(9-OCTADECENOYL)-GLYCEROL \$\$ 9-OCTADECENOIC ACID (Z)-, 2-HYDROXY-1,3-PROPANEDIYL ESTER \$\$

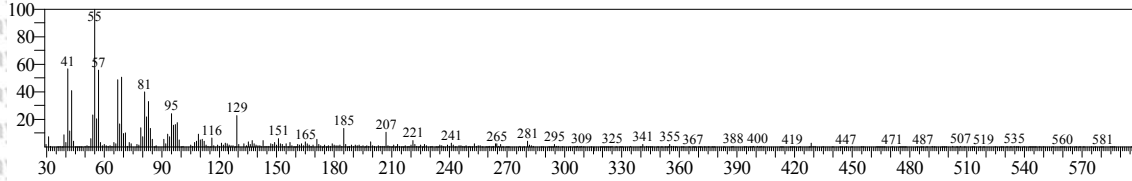


Hit#:5 Entry:188801 Library:WILEY7.LIB
SI:83 Formula:C20 H38 CAS:14811-95-1 MolWeight:278 RetIndex:0
CompName:1,19-EICOSADIENE \$\$

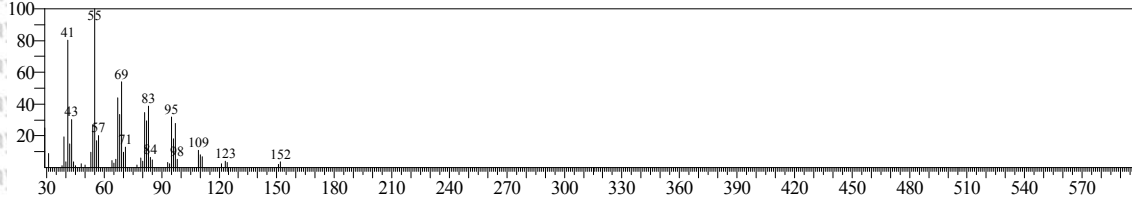




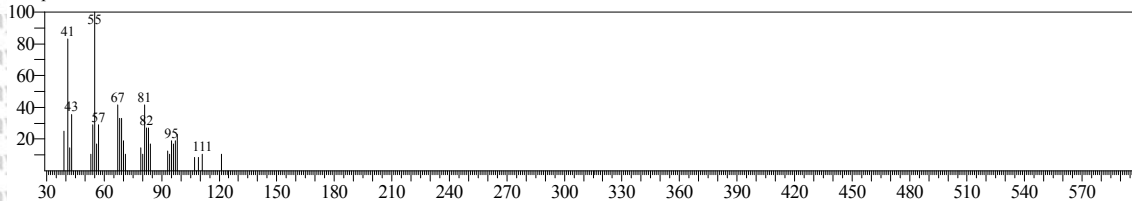
<< Target >>
 Line#:33 R.Time:38.670(Scan#:7135) MassPeaks:368
 RawMode:Averaged 38.665-38.675(7134-7136) BasePeak:55.00(14771)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



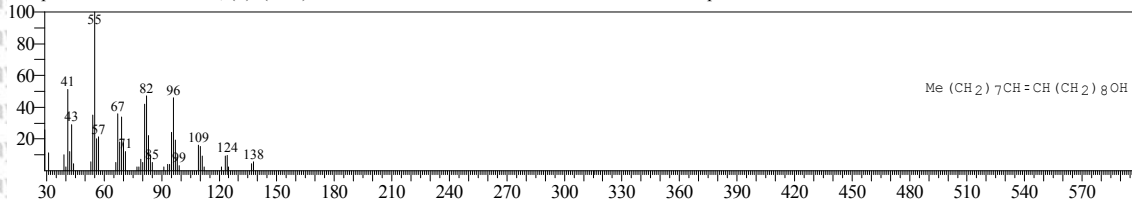
Hit#:1 Entry:161847 Library:WILEY7.LIB
 SI:84 Formula:C16 H30 O2 CAS:0-00-0 MolWeight:254 RetIndex:0
 CompName:VALERIANSAEURE, 10-UNDECENYLESTER \$\$



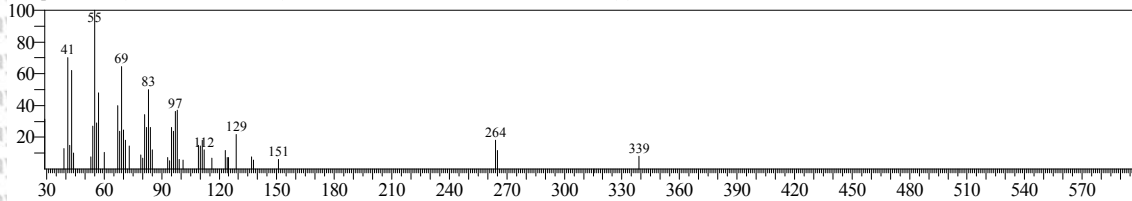
Hit#:2 Entry:73943 Library:WILEY7.LIB
 SI:84 Formula:C12 H22 O CAS:0-00-0 MolWeight:182 RetIndex:0
 CompName:11-DODECEN-1-AL \$\$



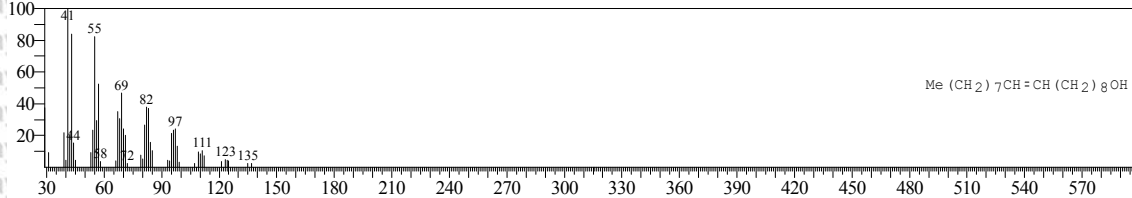
Hit#:3 Entry:178158 Library:WILEY7.LIB
 SI:84 Formula:C18 H36 O CAS:143-28-2 MolWeight:268 RetIndex:0
 CompName:9-Octadecen-1-ol, (Z)- (CAS) cis-9-Octadecen-1-ol \$\$ Oleol \$\$ Satol \$\$ Ocenol \$\$ Sipol O \$\$ Adol 85 \$\$ Atalco O \$\$ Adol 320 \$\$ Loxanol M \$\$



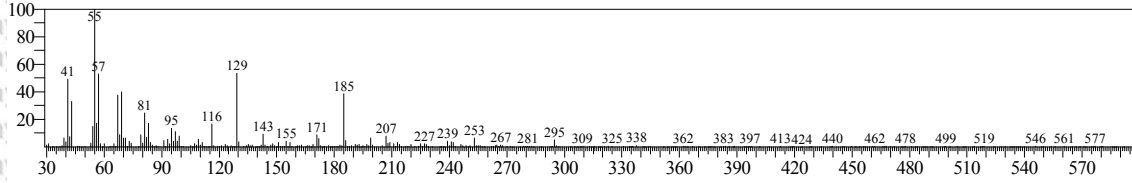
Hit#:4 Entry:330530 Library:WILEY7.LIB
 SI:84 Formula:C39 H72 O5 CAS:2465-32-9 MolWeight:621 RetIndex:0
 CompName:DI-(9-OCTADECENOYL)-GLYCEROL \$\$ 9-OCTADECENOIC ACID (Z)-, 2-HYDROXY-1,3-PROPANEDIYL ESTER \$\$



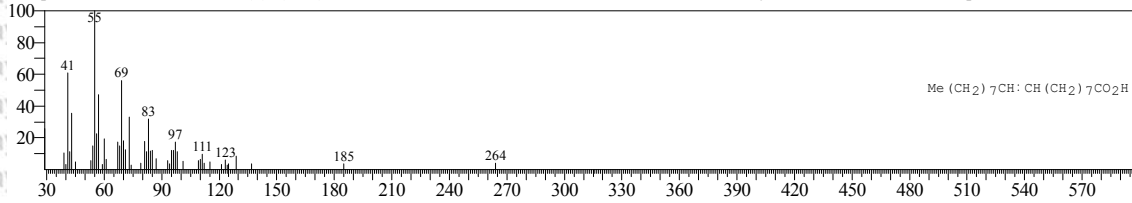
Hit#:5 Entry:178160 Library:WILEY7.LIB
 SI:84 Formula:C18 H36 O CAS:143-28-2 MolWeight:268 RetIndex:0
 CompName:9-Octadecen-1-ol, (Z)- (CAS) cis-9-Octadecen-1-ol \$\$ Oleol \$\$ Satol \$\$ Ocenol \$\$ Sipol O \$\$ Adol 85 \$\$ Atalco O \$\$ Adol 320 \$\$ Loxanol M \$\$



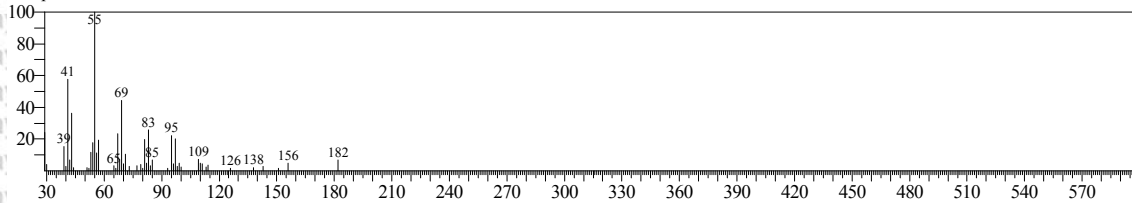
<< Target >>
 Line#:34 R.Time:38.765(Scan#:7154) MassPeaks:334
 RawMode:Averaged 38.760-38.770(7153-7155) BasePeak:55.00(8570)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



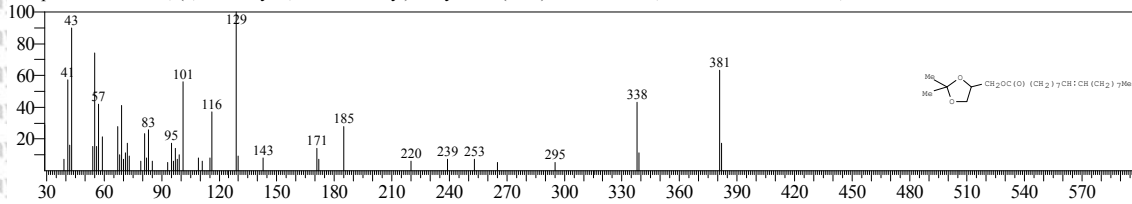
Hit#:1 Entry:193350 Library:WILEY7.LIB
 SI:75 Formula:C18 H34 O2 CAS:112-80-1 MolWeight:282 RetIndex:0
 CompName:9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) Oleic acid \$\$ Red oil \$\$ Oelsauree \$\$ Oleine 7503 \$\$ Pamolyn 100 \$\$ Emersol 211 \$\$ Vopcolene 27 \$\$ cis-Oleic acid



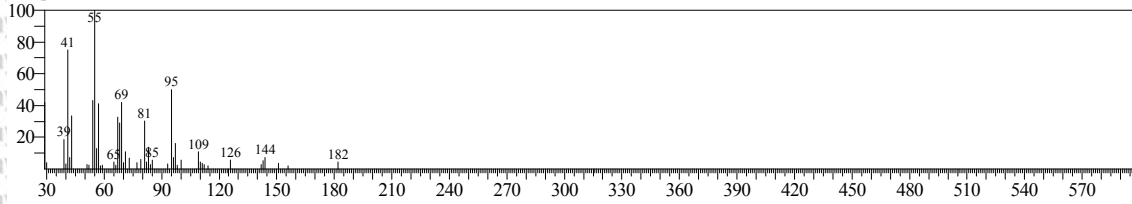
Hit#:2 Entry:94069 Library:WILEY7.LIB
 SI:75 Formula:C11 H21 N O2 CAS:0-00-0 MolWeight:199 RetIndex:0
 CompName:6-NITRO-UNDEC-5-ENE \$\$



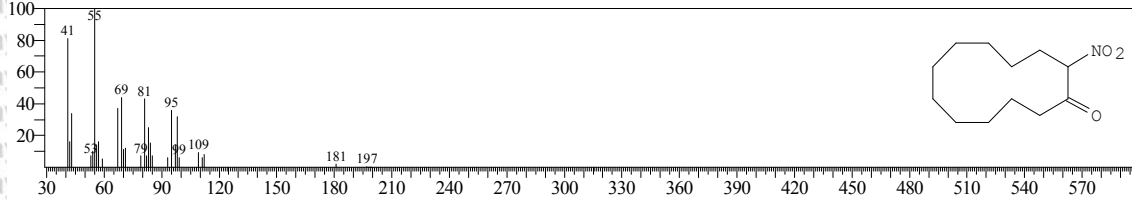
Hit#:3 Entry:282234 Library:WILEY7.LIB
 SI:75 Formula:C24 H44 O4 CAS:33001-45-5 MolWeight:396 RetIndex:0
 CompName:Oleic acid, (2,2-dimethyl-1,3-dioxolan-4-yl)methyl ester (CAS) GLYCERYL-1,2-ISOPROPYLIDENE-3,9-CIS-OCTADECENOYL \$\$



Hit#:4 Entry:94070 Library:WILEY7.LIB
 SI:74 Formula:C11 H21 N O2 CAS:0-00-0 MolWeight:199 RetIndex:0
 CompName:3-BUTYL-2-NITRO-HEPT-1-ENE \$\$

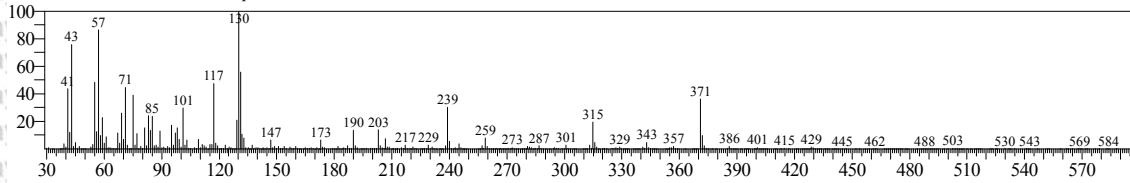


Hit#:5 Entry:129462 Library:WILEY7.LIB
 SI:74 Formula:C12 H21 N O3 CAS:95338-32-2 MolWeight:227 RetIndex:0
 CompName:2-Nitrocyclododecanone \$\$ Cyclododecanone, 2-nitro-, (+,-)- (CAS)

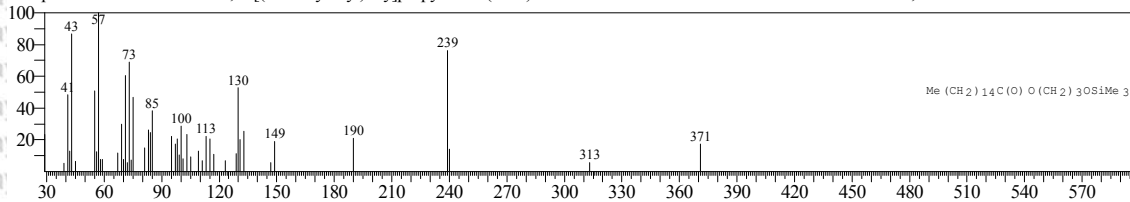


<< Target >>

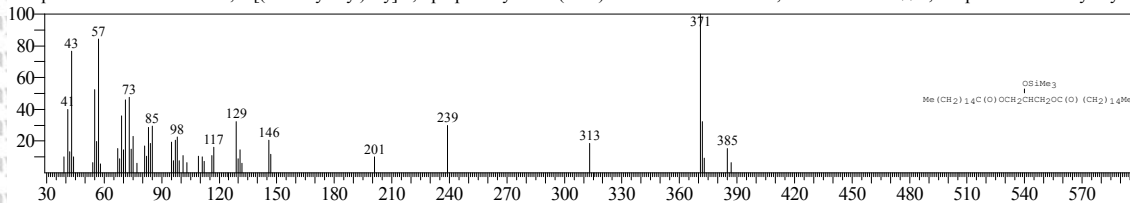
Line#:35 R.Time:38.920(Scan#:7185) MassPeaks:419
RawMode:Averaged 38.915-38.925(7184-7186) BasePeak:130.05(27712)
BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



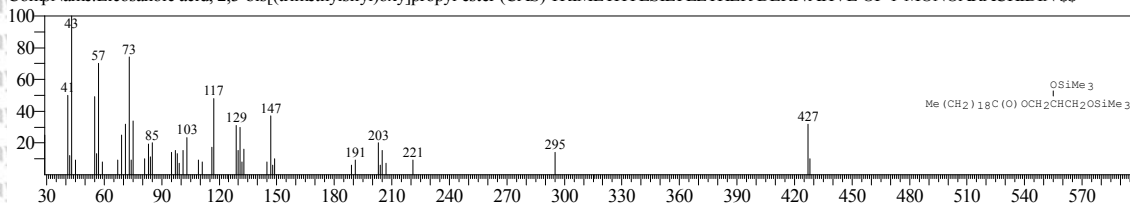
Hit#1 Entry:277200 Library:WILEY7.LIB
SI:76 Formula:C22 H46 O3 SI CAS:56630-48-9 MolWeight:386 RetIndex:0
CompName:Hexadecanoic acid, 3-[(trimethylsilyl)oxy]propyl ester (CAS) 1-0-HEXADECANOYL-3-0-TRIMETHYL SILYL-1,3-PROPANEDIOL \$\$ 1-PALMI



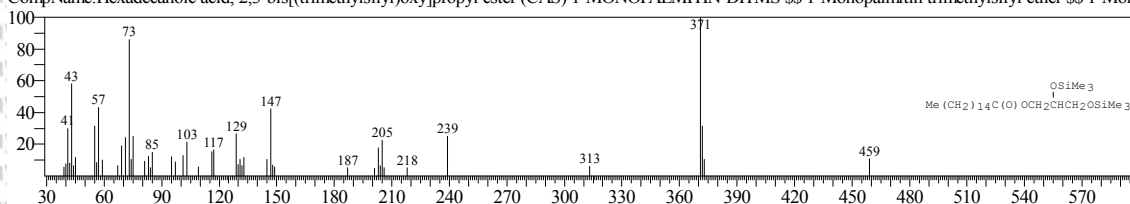
Hit#2 Entry:331708 Library:WILEY7.LIB
SI:74 Formula:C38 H76 O5 SI CAS:53212-95-6 MolWeight:641 RetIndex:0
CompName:Hexadecanoic acid, 2-[(trimethylsilyl)oxy]-1,3-propanediyl ester (CAS) 3-TRIMETHYLSIYL-1,3-DIPALMITIN \$\$ 1,3-Dipalmitin trimethylsilyl et



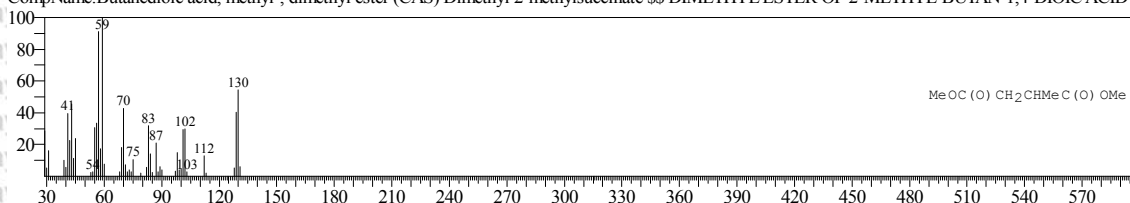
Hit#3 Entry:321616 Library:WILEY7.LIB
SI:72 Formula:C29 H62 O4 SI2 CAS:55517-94-7 MolWeight:530 RetIndex:0
CompName:Eicosanoic acid, 2,3-bis[(trimethylsilyl)oxy]propyl ester (CAS) TRIMETHYLSIYLETHER DERIVATIVE OF 1-MONOARACHIDIN \$\$



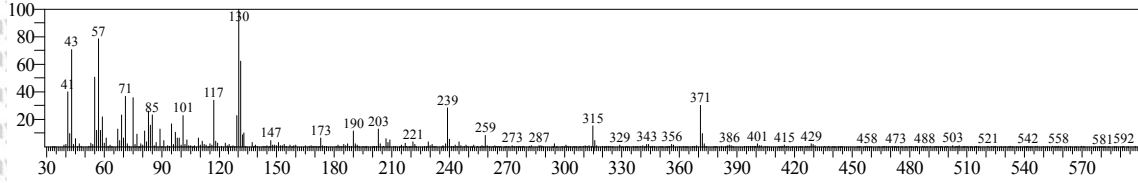
Hit#4 Entry:311323 Library:WILEY7.LIB
SI:67 Formula:C25 H54 O4 SI2 CAS:1188-74-5 MolWeight:474 RetIndex:0
CompName:Hexadecanoic acid, 2,3-bis[(trimethylsilyl)oxy]propyl ester (CAS) 1-MONOPALMITIN-DITMS \$\$ 1-Monopalmitin trimethylsilyl ether \$\$ 1-Monc



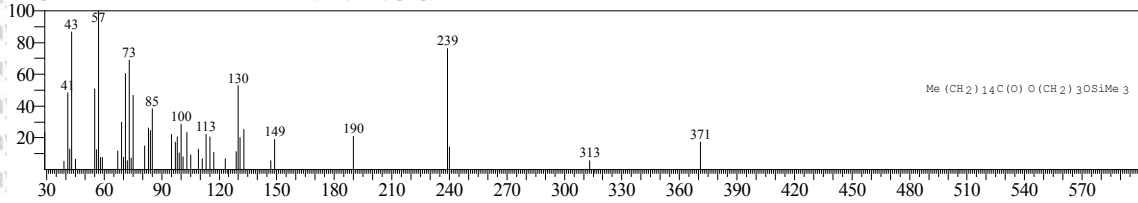
Hit#5 Entry:49393 Library:WILEY7.LIB
SI:65 Formula:C7 H11 D O4 CAS:1604-11-1 MolWeight:160 RetIndex:0
CompName:Butanedioic acid, methyl-, dimethyl ester (CAS) Dimethyl 2-methylsuccinate \$\$ DIMETHYL ESTER OF 2-METHYL-BUTAN-1,4-DIOIC ACID \$



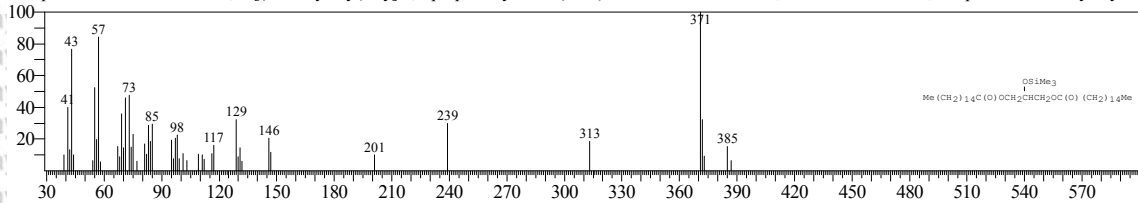
<< Target >>
 Line#:36 R.Time:39.035(Scan#:7208) MassPeaks:392
 RawMode:Averaged 39.030-39.040(7207-7209) BasePeak:130.05(6398)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



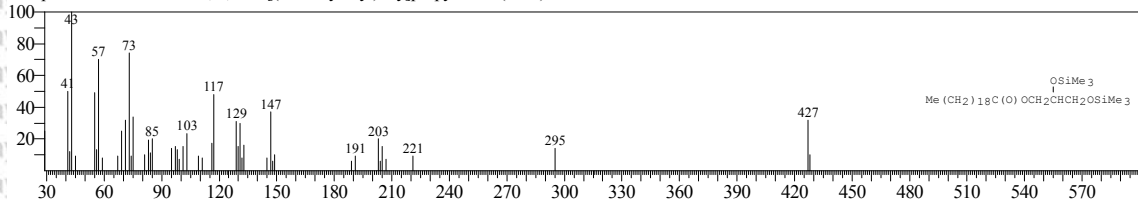
Hit#1 Entry:277200 Library:WILEY7.LIB
 SI:76 Formula:C22 H46 O3 SI CAS:56630-48-9 MolWeight:386 RetIndex:0
 CompName:Hexadecanoic acid, 3-[(trimethylsilyl)oxy]propyl ester (CAS) 1-0-HEXADECANOYL-3-0-TRIMETHYL SILYL-1,3-PROPANEDIOL \$\$ 1-PALMI



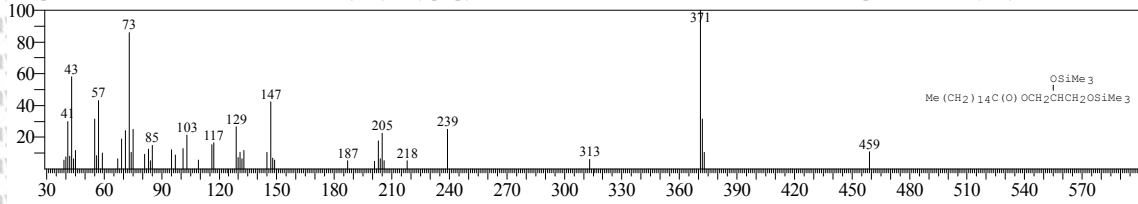
Hit#2 Entry:331708 Library:WILEY7.LIB
 SI:74 Formula:C38 H76 O5 SI CAS:53212-95-6 MolWeight:641 RetIndex:0
 CompName:Hexadecanoic acid, 2-[(trimethylsilyl)oxy]-1,3-propanediyl ester (CAS) 3-TRIMETHYLSIYL-1,3-DIPALMITIN \$\$ 1,3-Dipalmitin trimethylsilyl et



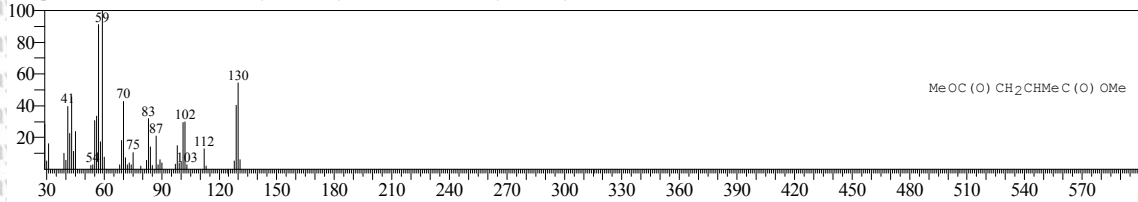
Hit#3 Entry:321616 Library:WILEY7.LIB
 SI:72 Formula:C29 H62 O4 SI2 CAS:55517-94-7 MolWeight:530 RetIndex:0
 CompName:Eicosanoic acid, 2,3-bis[(trimethylsilyl)oxy]propyl ester (CAS) TRIMETHYLSIYLETHER DERIVATIVE OF 1-MONOARACHIDIN \$\$



Hit#4 Entry:311323 Library:WILEY7.LIB
 SI:68 Formula:C25 H54 O4 SI2 CAS:1188-74-5 MolWeight:474 RetIndex:0
 CompName:Hexadecanoic acid, 2,3-bis[(trimethylsilyl)oxy]propyl ester (CAS) 1-MONOPALMITIN-DITMS \$\$ 1-Monopalmitin trimethylsilyl ether \$\$ 1-Monc



Hit#5 Entry:49393 Library:WILEY7.LIB
 SI:65 Formula:C7 H11 D O4 CAS:1604-11-1 MolWeight:160 RetIndex:0
 CompName:Butanedioic acid, methyl-, dimethyl ester (CAS) Dimethyl 2-methylsuccinate \$\$ DIMETHYL ESTER OF 2-METHYL-BUTAN-1,4-DIOIC ACID \$



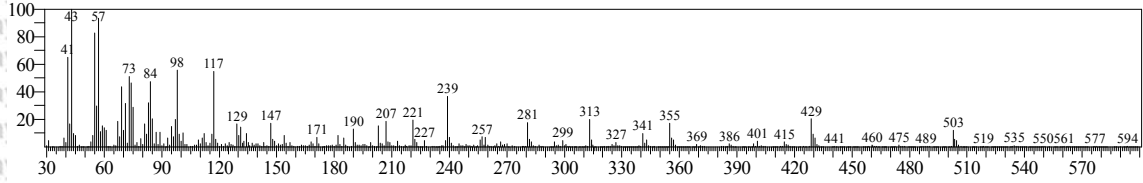
Hit#6 Entry:49393 Library:WILEY7.LIB
 SI:65 Formula:C7 H11 D O4 CAS:1604-11-1 MolWeight:160 RetIndex:0
 CompName:Butanedioic acid, methyl-, dimethyl ester (CAS) Dimethyl 2-methylsuccinate \$\$ DIMETHYL ESTER OF 2-METHYL-BUTAN-1,4-DIOIC ACID \$



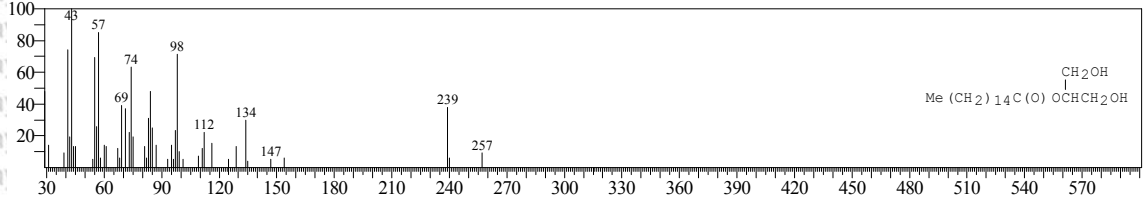
Hit#7 Entry:49393 Library:WILEY7.LIB
 SI:65 Formula:C7 H11 D O4 CAS:1604-11-1 MolWeight:160 RetIndex:0
 CompName:Butanedioic acid, methyl-, dimethyl ester (CAS) Dimethyl 2-methylsuccinate \$\$ DIMETHYL ESTER OF 2-METHYL-BUTAN-1,4-DIOIC ACID \$



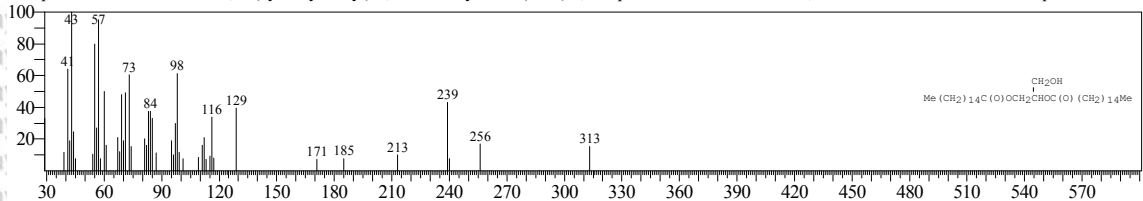
<< Target >>
 Line#:37 R.Time:39.145(Scan#:7230) MassPeaks:487
 RawMode:Averaged 39.140-39.150(7229-7231) BasePeak:42.95(16383)
 BG Mode:Calc. from Peak Group 1 - Event 1 Scan



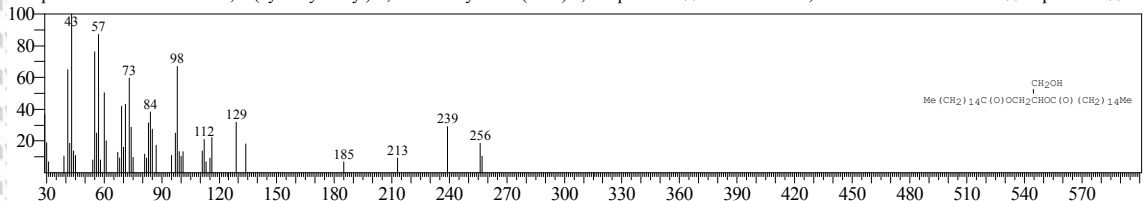
Hit#1 Entry:239090 Library:WILEY7.LIB
 SI:80 Formula:C19 H38 O4 CAS:23470-00-0 MolWeight:330 RetIndex:0
 CompName:Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1-(hydroxymethyl)ethyl ester (CAS) 2-Monopalmitin \$\$ Palmitin, 2-mono- \$\$ 2-Hexadecanoyl glycerol \$\$ 2-Monop



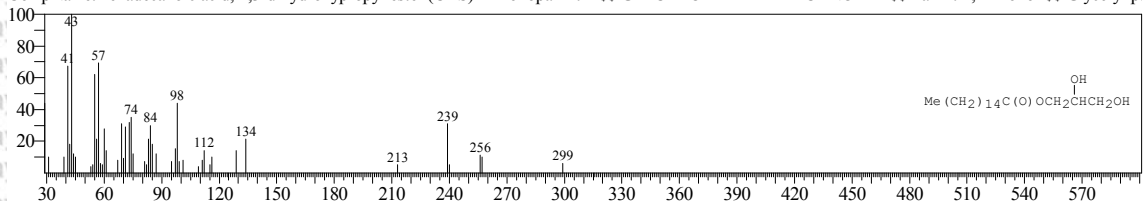
Hit#2 Entry:326225 Library:WILEY7.LIB
 SI:79 Formula:C35 H68 O5 CAS:761-35-3 MolWeight:569 RetIndex:0
 CompName:Hexadecanoic acid, 1-(hydroxymethyl)-1,2-ethanediyl ester (CAS) 1,2-Dipalmitin \$\$ GLYCEROL-1,2-DIHEXADECANOATE \$\$ Dipalmitin \$\$ Pe



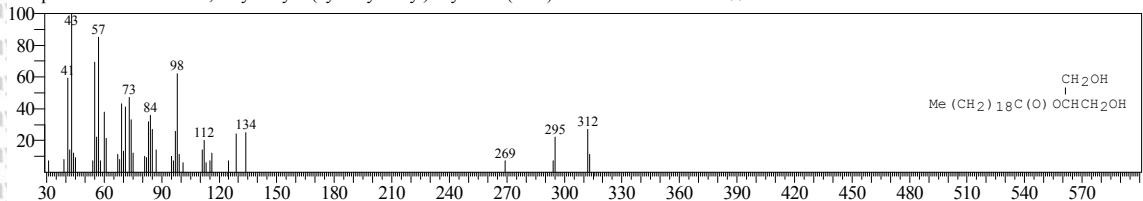
Hit#3 Entry:326226 Library:WILEY7.LIB
 SI:79 Formula:C35 H68 O5 CAS:761-35-3 MolWeight:569 RetIndex:0
 CompName:Hexadecanoic acid, 1-(hydroxymethyl)-1,2-ethanediyl ester (CAS) 1,2-Dipalmitin \$\$ GLYCEROL-1,2-DIHEXADECANOATE \$\$ Dipalmitin \$\$ Pe



Hit#4 Entry:239087 Library:WILEY7.LIB
 SI:78 Formula:C19 H38 O4 CAS:542-44-9 MolWeight:330 RetIndex:0
 CompName:Hexadecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester (CAS) 1-Monopalmitin \$\$ GLYCEROL-1-HEXADECANOATE \$\$ Palmitin, 1-mono- \$\$ Glycerol p



Hit#5 Entry:277205 Library:WILEY7.LIB
 SI:77 Formula:C23 H46 O4 CAS:55334-78-6 MolWeight:386 RetIndex:0
 CompName:Eicosanoic acid, 2-hydroxy-1-(hydroxymethyl)ethyl ester (CAS) 2-MONOARACHIDIN \$\$



Method

[Comment]

==== Analytical Line 1 =====

[AOC-20i+s]
 # of Rinses with Presolvent :2
 # of Rinses with Solvent(post) :10
 # of Rinses with Sample :2



