

**Isolasi dan Karakterisasi Penyusun Minyak Atsiri Hasil
Distilasi Uap Daun Legundi (*Vitex Trifolia*) dengan
Kromatografi Gas Spektrometer Massa (KG - SM)**

SKRIPSI

Disusun oleh:

Febrianto Tri Cahyono

0810923046



JURUSAN KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS BRAWIJAYA

MALANG

2012

**Isolasi dan Karakterisasi Penyusun Minyak Atsiri Hasil
Distilasi Uap Daun Legundi (*Vitex Trifolia*) dengan
Kromatografi Gas Spektrometer Massa (KG - SM)**

SKRIPSI

**Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
sarjana sains dalam bidang kimia**

Disusun oleh:
Febrianto Tri Cahyono
0810923046



**JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS BRAWIJAYA
MALANG
2012**

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

**Isolasi dan Karakterisasi Penyusun Minyak Atsiri Hasil
Distilasi Uap Daun Legundi (*Vitex Trifolia*) dengan
Kromatografi Gas Spektrometer Massa (KG-SM)**

Oleh:

**Febrianto Tri Cahyono
0810923046**

**Setelah dipertahankan didepan majelis penguji
Pada tanggal.....**

**Dan dinyatakan memenuhi syarat untuk memperoleh gelar
sarjana sains dalam bidang kimia**

Pembimbing I

**Dr. Rurini Retnowati, M.Si
NIP. 19601209 198802 2 001**

Pembimbing II

**Drs. Suratmo, M.Sc
NIP. 19630706 19900 2 002**

**Mengetahui,
Ketua Jurusan Kimia
Fakultas MIPA Universitas Brawijaya**

**Dr. Sasangka Prasetyawan, MS
NIP. 19630404 198701 1 001**

LEMBAR PERNYATAAN

Saya yang bertandatangan dibawah ini :

Nama : Febrianto Tri Cahyono

NIM : 0810923046

Jurusan : Kimia

Penulis skripsi berjudul : **Isolasi dan Karakterisasi Penyusun Minyak Atsiri Hasil Distilasi Uap Daun Legundi (*Vitex Trifolia*) dengan Kromatografi Gas Spektrometer Massa (KG - SM)**

Dengan ini menyatakan bahwa :

1. Isi dari skripsi yang saya buat adalah benar-benar karya sendiri dan tidak menjiplak karya orang lain, selain nama-nama yang tertulis di daftar pustaka dalam skripsi ini.
2. Apabila dikemudian hari ternyata skripsi yang saya tulis terbukti hasil jiplakan, maka saya akan bersedia menanggung segala resiko yang akan saya terima.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan segala kesadaran.

Malang,.....

Yang menyatakan,

Febrianto Tri Cahyono

Nim. 0810923046

Isolasi dan Karakterisasi Penyusun Minyak Atsiri Hasil Distilasi Uap Daun Legundi (*Vitex Trifolia*) dengan Kromatografi Gas Spektrometer Massa (KG - SM)

Abstrak

Legundi merupakan tanaman yang tersebar luas di Asia salah satunya tersebar luas di Indonesia. Banyak masyarakat menggunakan tanaman ini sebagai anti nyamuk karena tanaman ini memiliki aroma khas. Keberadaanya yang melimpah di Indonesia memungkinkan tanaman ini dapat digunakan sebagai komoditi yang dapat dimanfaatkan. Pemanfaatan tanaman ini masih sangat kurang, hal ini dapat ditunjukkan dengan sedikitnya penelitian mengenai tanaman ini, selain itu standart minyak untuk minyak atsiri dari daun legundi masih belum ada sehingga perlu dilakukannya penelitian ini. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui komponen penyusun minyak atsiri dari daun legundi dan sifat fisik dan kimianya. Isolasi minyak atsiri dari daun legundi dilakukan dengan metode distilasi uap dilanjutkan dengan pemisahan dengan gravitasi untuk memperoleh minyak yang memiliki fraksi ringan dari air dan diperoleh rendemen minyak sebesar 0,423%. Lapisan air hasil pemisahan diekstraksi untuk memperoleh minyak yang terdistribusi dalam air dan dilanjutkan dengan pemisahan pelarut dengan minyak atsiri dan diperoleh rendemen sebesar 0,605%. Minyak yang diperoleh kemudian dianalisis sifat fisik dan kimianya. Sifat fisik untuk minyak hasil pemisahan dengan gravitasi diperoleh massa jenis 0,86 ; indeks bias 1,493; dan penentuan bilangan asam sebesar 2,19 sedangkan untuk minyak hasil ekstraksi lapisan air diperoleh massa jenis 0,82; indeks bias 0,457; dan bilangan asam sebesar 1,56. Selain itu minyak yang diperoleh dianalisis dengan menggunakan KG-SM, senyawa yang dapat dipisahkan untuk minyak atsiri hasil pemisahan dengan gravitasi diperoleh sebanyak 40 senyawa dengan senyawa terdeteksi sebanyak 36 senyawa, dan 23 senyawa dengan senyawa terdeteksi sebanyak 18 senyawa untuk minyak hasil ekstraksi lapisan air. Dari kedua minyak tersebut terdapat 6 senyawa yang memiliki kesamaan. Sebagian besar komponen penyusun minyak atsiri dari daun legundi terdiri dari terpenoid (mono terpen dan sesquiterpen).

Kata kunci : Legundi, distilasi uap, minyak atsiri, ekstraksi, sifat fisik, sifat kimia, KG-SM

Isolation and Characterization Essential Oils Compound from steam Distillation Product of Legundi (*Vitex Trifolia*) Leaf With Gas Chromatography Mass Spectrometer (GC - MS)

Abstract

Legundi is a plant that is widespread in Asia one of which is widespread in Indonesia. Many people use this as an anti-mosquito because the plant have different smell. Abundant existence in Indonesia allow this plant can be used as a commodity that can be utilized. Utilization of these plants is still lacking, it can be shown with little research on this plant, besides the standard oil for essential oils from leaves legundi still not there so the need was performed in this study. This study aims to determine the composition of essential oils from leaves legundi and physical and chemical properties. isolation of essential oils from the legundi leaf by steam distillation and then performed by separation by gravity to obtain the oil that has a lighter fraction obtained from the water and oil yield of 0.423%. Water layer was extracted to obtain the separation of oil and water are distributed in a solvent followed by separation of the essential oils and obtained yield of 0,605%. The oil obtained was then analyzed physical and chemical properties. The physical properties of oil by gravity separation results obtained by the density of 0,86; refractive index of 1,493; and the determination of acid number of 2,19; while for the oil extracted water layer density of 0,82 is obtained; refractive index of 0,457; and acid number of 1,56. Additionally oils obtained were analyzed using GC-MS and the composition of essential oils obtained were 40 to 36 compounds were detected components for oil separation by gravity, and 23 compounds with compounds detected a total of 18 compounds to the water layer extracted oil. Of both these oil contained six compounds that have in common. Most of the components of essential oils from leaves legundi consists of terpenoids (monoterpen and sesquiterpen).

Key words: Legundi, steam distillation, essential oils, extraction, physical properties, chemical properties, GC-MS

KATA PENGANTAR

Puji dan syukur penulis panjatkan kehadirat Allah SWT yang telah melimpahkan rahmat, taufik dan hidayah-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan judul **“Karakterisasi Penyusun Minyak Atsiri Hasil Distilasi Uap Daun Legundi (*Vitex Trifolia*) dengan Kromatografi Gas Spektrometer Massa (KG - SM)”**, selain itu penulis juga menyampaikan terimakasih kepada:

1. Dr. Rurini Retnowati, M.Si., selaku Dosen Pembimbing I, atas segala bimbingan, pengarahan, perhatian, dan kesabaran yang diberikan kepada penulis.
2. Drs. Suratmo, M.Sc., selaku Dosen Pembimbing II, dan Dosen Penasehat Akademis atas segala bimbingan, pengarahan, perhatian, dan kesabaran yang diberikan kepada penulis.
3. Dra. Sri Wardhani, M.Si sebagai penguji.
4. Dr. Sasangka Prasetyawan, MS., Selaku Ketua Jurusan Kimia Universitas Brawijaya atas segala bantuan yang diberikan selama ini kepada penulis.
5. Kedua orang tua penulis (Bpk Agus Supriyono dan Ibu Nanik Yuswati) atas doa-doa, motivasi, dorongan semangat, nasihat dan semua hal yang diberikan kepada penulis.
6. Semua dosen Universitas Brawijaya atas semua ilmu yang diberikan.
7. Mbak kristin trima kasih untuk suport dan semangat yang telah diberikan kepada penulis.
8. Mbak yuni trima kasih untuk suport dan semangat yang telah diberikan kepada penulis.
9. Nur fitria lestari ningsih atas semua dukungan, semangat, dan semua bantuan yang diberikan kepada penulis.
10. Teman-teman seperjuangan untuk semua dukungan semangat, motivasi serta shering ilmu yang telah diberikan

11. Mbak-mbak yang ada di lab dan mas widji terimakasih atas semua bantuan dan shering ilmu yang telah diberikan kepada penulis

12. Semua pihak yang telah membantu tersusunnya skripsi ini.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini jauh dari sempurna, oleh karena itu penulis mengharapkan masukan, kritik, dan saran yang bersifat membangun .penulis berharap skripsi ini dapat bermanfaat.

Malang,

2012

Febrianto Tri Cahyono
NIM. 0810923046



DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iii
ABSTRAK	iv
ABSTRACK	v
KATA PENGANTAR	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL	xvi
DAFTAR LAMPIRAN	xvii
 BAB I PENDAHULUAN	
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Batasan Masalah	3
1.4 Tujuan Penelitian	3
1.5 Manfaat Penelitian	3
 BAB II TINJAUAN PUSTAKA	
2.1 Legundi (<i>Vitex trifolia</i>)	5
2.2 Minyak Atsiri	6
2.3 Distilasi Uap	7
2.4 Ekstraksi	8
2.5 Kromatografi Gas – Spektrometer Massa	8
2.6 Penentuan Sifat Fisika dan Kimia	9
 BAB III METODE PENELITIAN	
3.1 Tempat dan Waktu Penelitian	11
3.2 Alat dan Bahan Penelitian	11
3.2.1 Alat	11
3.2.2 Bahan	11
3.3 Tahapan Penelitian	12
3.4 Prosedur Kerja Penelitian	12
3.4.1 Determinasi daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>)	12
3.4.2 Preparasi $\text{MgSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ dari $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	12
3.4.3 Distilasi n-heksan teknis	12

3.4.4	Isolasi minyak atsiri dari daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) menggunakan metode distilasi uap	13
3.4.5	Ekstraksi distilat	13
3.4.6	Pengikatan fasa air dari ekstrak minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan $\text{MgSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$	13
3.4.7	Evaporasi pelarut dengan menggunakan <i>Rotary Evaporator</i> penurun tekanan	13
3.4.8	Pembebasan ekstrak minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dari pelarut n-heksan menggunakan gas nitrogen. 14	
3.4.9	Uji sifat fisik dan kimia	14
3.4.10	Analisis komponen minyak atsiri dari daun Legundi (<i>Vitex trifolia</i>) menggunakan Kromatografi Gas - Spektrometer Massa (KG-SM)	14

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1	Isolasi minyak atsiri dari daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>)	15
4.2	Karakterisasi uji sifat fisik dan kimia	16
4.3	Karakterisasi komponen penyusun minyak atsiri dari daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan menggunakan Kromatografi Gas-Spektrometer Massa (KG-SM)	18

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

5.1	Kesimpulan	93
5.2	Saran	93

DAFTAR PUSTAKA	94
LAMPIRAN	98

DAFTAR GAMBAR

	Halaman
Gambar 1.1 Legundi (<i>Vitex trifolia</i>)	5
Gambar 4.3.1 Kromatogram minyak minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	19
Gambar 4.3.2 Kromatogram minyak atsiri dari daun legundi hasil ekstraksi lapisan air	20
Gambar 4.3.3 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 3,131 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	21
Gambar 4.3.4 Pola fragmentasi α -pinen	22
Gambar 4.3.5 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 3,475 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air	22
Gambar 4.3.6 Pola fragmentasi metil toluen	23
Gambar 4.3.7 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 4,132 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi.	23
Gambar 4.3.8 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 4,152 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air.....	24
Gambar 4.3.9 Pola fragmentasi β -pinen	25
Gambar 4.3.10 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 4,463 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	25
Gambar 4.3.11 Pola fragmentasi sabinen	26
Gambar 4.3.12 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 5,202 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi.	27
Gambar 4.3.13 Pola fragmentasi β -mirsen	28
Gambar 4.3.14 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan	

	waktu retensi 5,947 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	28
Gambar 4.3.15	Pola fragmentasi limonen.....	29
Gambar 4.3.16	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 6,153 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	30
Gambar 4.3.17	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 4,412 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air.....	30
Gambar 4.3.18	Pola fragmentasi senyawa β -pellandren.....	31
Gambar 4.3.19	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 6,313 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	31
Gambar 4.3.20	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 6,455 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air.....	32
Gambar 4.3.21	Pola fragmentasi senyawa 1,8-sineol	33
Gambar 4.3.22	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 13,313 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	33
Gambar 4.3.23	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 13,164 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air.....	33
Gambar 4.3.24	Pola fragmentasi senyawa β -kariofilen	35
Gambar 4.3.25	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 13,531 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air	35
Gambar 4.3.26	Pola fragmentasi senyawa 4-terpineol	36
Gambar 4.3.27	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 14,025 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	36

Gambar 4.3.28	Pola fragmentasi senyawa osimenil asetat	37
Gambar 4.3.29	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 14,193 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi.	38
Gambar 4.3.30	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 14,208 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air.....	38
Gambar 4.3.31	Pola fragmentasi senyawa α -humulen.....	39
Gambar 4.3.32	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 14,500 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air.....	40
Gambar 4.3.33	Pola fragmentasi senyawa α -terpineol	41
Gambar 4.3.34	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 14,720 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	41
Gambar 4.3.35	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 14,734 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air.....	41
Gambar 4.3.36	Pola fragmentasi senyawa α -terpinenil asetat ..	42
Gambar 4.3.37	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 14,853 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air.....	43
Gambar 4.3.38	Pola fragmentasi senyawa germakren-d.....	44
Gambar 4.3.39	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 14,853 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air.....	44
Gambar 4.3.40	Pola fragmentasi senyawa linalil propionat	45
Gambar 4.3.41	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 14,783 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	46
Gambar 4.3.42	Pola fragmentasi senyawa α -Muurolen.....	47

Gambar 4.3.43	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 15,240 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	47
Gambar 4.3.44	Pola fragmentasi senyawa δ -kadinen	48
Gambar 4.3.45	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 15,265 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air	49
Gambar 4.3.46	Pola fragmentasi senyawa torreyol	50
Gambar 4.3.47	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 15,308 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	50
Gambar 4.3.48	Pola fragmentasi senyawa γ -muurolen	51
Gambar 4.3.49	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 15,780 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	51
Gambar 4.3.50	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 24,635 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air	52
Gambar 4.3.51	Pola fragmentasi senyawa trikosan	53
Gambar 4.3.52	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 17,335 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	54
Gambar 4.3.53	Pola fragmentasi senyawa 1,1,4,5,6-pentametil-2,3-dihidroinden	55
Gambar 4.3.54	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 18,155 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	55
Gambar 4.3.55	Pola fragmentasi senyawa driminol	56
Gambar 4.3.56	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 18,250 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	57

Gambar 4.3.57	Pola fragmentasi senyawa 1-sikloheksan-1-butanal, α ,2,6,6-tetrametil	58
Gambar 4.3.58	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 18,349 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	58
Gambar 4.3.59	Pola fragmentasi senyawa kariofilen oksida	59
Gambar 4.3.60	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 19,813 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	60
Gambar 4.3.61	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 19,823 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air	60
Gambar 4.3.62	Pola fragmentasi senyawa retinol asetat	61
Gambar 4.3.63	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 19,467 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	61
Gambar 4.3.64	Pola fragmentasi senyawa 6,10,14-Trimethyl-2-pentadecanone	62
Gambar 4.3.65	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 19,813 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	62
Gambar 4.3.66	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 19,823 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air	63
Gambar 4.3.67	Pola fragmentasi senyawa δ -guaien	64
Gambar 4.3.68	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 19,900 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	64
Gambar 4.3.69	Pola fragmentasi senyawa kontortadiol	65
Gambar 4.3.70	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan	

	waktu retensi 19,926 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air	66
Gambar 4.3.71	Pola fragmentasi nonadekan	67
Gambar 4.3.72	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 20,058 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	67
Gambar 4.3.73	Pola fragmentasi bisiklo [4.4.0] dec -1-en, 2-isopropil-5-methyl-9-metilen	68
Gambar 4.3.74	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 20,282 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	69
Gambar 4.3.75	Pola fragmentasi α -dekarvelon.....	70
Gambar 4.3.76	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 21,065 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	70
Gambar 4.3.77	Pola fragmentasi widdrol	71
Gambar 4.3.78	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 21,065 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	72
Gambar 4.3.79	Pola fragmentasi manoil oksida	73
Gambar 4.3.80	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 23,076 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	73
Gambar 4.3.81	Pola fragmentasi 4,4-Dimetil-3-(3-metil-3-buten-1-yliden)-2-metilidenbisiklo [4.1.0] heptan	74
Gambar 4.3.82	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 21,914 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	75
Gambar 4.3.83	Pola fragmentasi biformen	76
Gambar 4.3.84	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan	

	waktu retensi 22,734 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	76
Gambar 4.3.85	Pola fragmentasi 2,3,4,5,6,7,8,9-oktahidro-1,1,4,4,7,7-heksametil	78
Gambar 4.3.86	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 23,076 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	78
Gambar 4.3.87	Pola fragmentasi β -isometil ionon	79
Gambar 4.3.88	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 24,505 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	80
Gambar 4.3.89	Pola fragmentasi Antraken, 9-dodeksiltetradekahidro	81
Gambar 4.3.90	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 23,500 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	81
Gambar 4.3.91	Pola fragmentasi Androsta-4,16-dien-3-one	82
Gambar 4.3.92	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 24,254 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	83
Gambar 4.3.93	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 24,331 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	83
Gambar 4.3.94	Pola fragmentasi 1H-inden, 2,3,3a,4,7,7a-heksahidro-2,2,4,4,7,7-heksametil-, trans	84
Gambar 4.3.95	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 24,505 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	84
Gambar 4.3.96	Pola fragmentasi 1,1,2,3,3,5-heksametil-2,3-dihidroinden	85
Gambar 4.3.97	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan	

	waktu retensi 25,399 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	86
Gambar 4.3.98	Pola fragmentasi 2-heksadekan-1-ol	87
Gambar 4.3.99	Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dengan waktu retensi 27,360 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi	87
Gambar 4.3.100	Pola fragmentasi sklareol	88



DAFTAR TABEL

	Halaman
Tabel 4.2.1 Warna noda dan nilai <i>retardation factor</i> minyak atsiri hasil pemisahan dengan gravitasi.....	17
Tabel 4.2.2 Warna noda dan nilai <i>retardation factor</i> minyak hasil ekstraksi lapisan air.....	17
Tabel 4.3.1 Waktu retensi dan persen area komponen penyusun minyak atsiri dari daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) hasil pemisahan dengan gravitasi	19
Tabel 4.3.2 Waktu retensi dan persen area komponen penyusun minyak atsiri dari daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) untuk minyak hasil ekstraksi lapisan air	20
Tabel 4.3.3 Usulan senyawa dan jenis komponen	90



DAFTAR LAMPIRAN

	Halaman
Lampiran A. Dokumentasi Penelitian	
A.1 Daun legundi yang digunakan	98
A.2 Determinasi oleh UPT Balai Materia Medica Kota Batu...	99
A.3 Distilasi Uap.....	100
A.4 Minyak atsiri dari daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dalam corong pisah	100
A.5 Distilasi Fraksinasi	101
A.6 Rangkaian alat untuk pembebasan minyak atsiri dari daun pelarut dengan menggunakan gas N ₂	101
A.7 Minyak atsiri dari daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>)	102
A.8 Hasil KLT	102
Lampiran B. Diagram Alir Penelitian	
B.1 Preparasi MgSO ₄ .xH ₂ O dari MgSO ₄ .7H ₂ O.....	104
B.2 Redistilasi n-heksan teknis	104
B.3 Isolasi minyak atsiri dari daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) menggunakan metode distilasi uap	104
B.4 Ekstraksi distilat	105
B.5 Pembebasan ekstrak minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dari fasa air dengan MgSO ₄ .xH ₂ O	105
B.6 Evaporasi pelarut dengan menggunakan <i>Rotary Evaporator</i> penurunan tekanan	106
B.7 Pembebasan minyak atsiri daun legundi (<i>Vitex trifolia</i>) dari pelarut n-heksan menggunakan gas nitrogen	106
B.8 Uji sifat fisika	106
B.8.1 Penentuan masa jenis	106
B.8.2 Penentuan indeks bias	106
B.9 Uji sifat kimia	107
B.9.1 Penentuan Bilangan Asam	107
B.9.2 Uji dengan Kromatografi lapis tipis.....	107
B.9.3 Analisis komponen minyak atsiri dari daun Legundi (<i>Vitex trifolia</i>) menggunakan Kromatografi Gas – Spektrometer Massa (KG-SM).....	108
Lampiran C. Perhitungan	
C.1 Preparasi MgSO ₄ .xH ₂ O.....	108
C.2 Perhitungan rendemen minyak atsiri dari daun legundi	

(<i>Vitex trifolia</i>).....	109
C.3 Perhitungan uji sifat fisika	110
C.3.1 Penentuan massa jenis	110
C.3.2 Penentuan indeks bias	111
C.4 Perhitungan sifat kimia	111
C.4.1 Penentuan bilangan asam	111
C.4.2 Perhitungan nilai Rf pada Kromatografi Lapis Tipis	113

Lampiran D. Library Senyawa dengan Analisis Menggunakan Kromatografi Gas Spektrometer Massa (KG-SM)

D.1 Senyawa α -pinen	114
D.2 Senyawa metil toluen	114
D.3 Senyawa β -pinen	115
D.4 Senyawa Sabinen	115
D.5 Senyawa β -mirsen	116
D.6 Senyawa limonen	116
D.7 Senyawa β -pellandren	117
D.8 Senyawa 1,8-sineol	117
D.9 Senyawa β -kariofilen	118
D.10 Senyawa 4-terpineol.....	118
D.11 Senyawa osimenil asetat.....	119
D.12 Senyawa α -humulen	119
D.13 Senyawa α -terpineol	120
D.14 Senyawa α -terpinenil asetat.....	120
D.15 Senyawa germakren-d	121
D.16 Senyawa linalil propionat	121
D.17 Senyawa α -muurolen	122
D.18 Senyawa δ -kadinen	122
D.19 Senyawa torreyol	123
D.20 Senyawa γ -muurolen	123
D.21 Senyawa trikosan	124
D.22 Senyawa 1,1,4,5,6-pentametil-2,3-dihidroinden	124
D.23 Senyawa driminol	125
D.24 Senyawa 1-sikloheksan-1-butanal, α ,2,6,6-tetrametil	125
D.25 Senyawa kariofilen oksida.....	126
D.26 Senyawa retinol asetat.....	126
D.27 Senyawa 6,10,14-trimetil-2-pentadecanon.....	127
D.28 Senyawa δ -guaien	127
D.29 Senyawa kontortadiol	128

D.30	Senyawa nonadekan	128
D.31	Senyawa bisiklo [4.4.0]Dec-1-En, 2-isopropil-5-metil-9-metilen.....	129
D.32	Senyawa α -dekarvelon	129
D.33	Senyawa widdrol	130
D.34	Senyawa manoil oksida	130
D.35	Senyawa 4,4-dimetil-3-(3-metil-3-buten-1-yliden)-2-metilidenbisiklo [4.1.0] heptan	131
D.36	Senyawa biformen	131
D.37	Senyawa 2,3,4,5,6,7,8,9-oktahidro-1,1,4,4,7,7-heksametil	132
D.38	Senyawa β -isometil ionon	132
D.39	Senyawa antraken, 9-dodeksiltetradekahidro	133
D.40	Senyawa androsta-4,16-dien-3-one	133
D.41	Senyawa 1H-inden, 2,3,3a,4,7,7a-heksahidro-2,2,4,4,7,7-heksametil-, trans	134
D.42	Senyawa 1,1,2,3,3,5-heksametil-2,3-dihidroinden	134
D.23	Senyawa 2-heksadeken-1-ol	135
D.35	Senyawa sklareol	135

Lampiran E. Perbandingan Antara Minyak Legundi (<i>Vitex trifolia</i>) hasil pemisahan dengan gravitasi dan ekstraksi distilat	136
---	------------

Lampiran F. Perbandingan % area Antara Minyak Legundi (<i>Vitex trifolia</i>) hasil pemisahan dengan gravitasi, ekstraksi lapisan air, dan hasil distilasi air dari literature.....	139
--	------------

BAB I

PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Legundi merupakan tanaman yang tersebar luas di Asia, tanaman ini tumbuh pada tempat yang tandus, panas, dan berpasir [1]. Tanaman ini banyak tumbuh di daerah pesisir pantai. Indonesia merupakan negara yang memiliki daerah pesisir pantai yang luas sehingga legundi (*Vitex trifolia*) banyak tersebar di negara ini.

Masyarakat biasanya menggunakan tanaman ini sebagai anti malaria atau sebagai anti nyamuk [2]. Tanaman ini dapat digunakan sebagai anti nyamuk dikarenakan sensor nyamuk peka terhadap hal-hal tertentu salah satunya adalah aroma yang terlalu menyengat [3].

Tanaman legundi memiliki aroma menyengat yang khas [2]. Aroma khas dari tanaman legundi berasal dari senyawa-senyawa volatil yang terkandung di dalamnya. Senyawa-senyawa ini mampu dibawa medium udara dan ditangkap oleh sensor nyamuk. Oleh karena itu, tanaman legundi sering digunakan sebagai penolak serangga (nyamuk) [4]. Keberadaan tanaman ini yang tersebar luas di Indonesia dapat memungkinkan tanaman ini digunakan sebagai komoditi yang memiliki nilai ekonomi tinggi. Aroma yang khas dan keberadaan tanaman yang melimpah menyebabkan tanaman ini dapat digunakan sebagai salah satu tanaman penghasil minyak atsiri. Minyak atsiri merupakan zat berbau yang terkandung dalam tanaman, minyak ini disebut juga minyak menguap, minyak eteris karena pada temperatur kamar mudah menguap [5]. Minyak atsiri dari beberapa tanaman memiliki manfaat dan kegunaan tertentu [6].

Untuk memperoleh minyak atsiri dari tanaman dapat dilakukan dengan beberapa cara, salah satunya adalah distilasi. Distilasi adalah suatu metode yang dilakukan dengan cara pemanasan dengan menggunakan air atau uap air terhadap sampel sehingga minyak atsiri akan menguap dari jaringan bersama uap air dan dikondensasikan kembali dari fasa uap kembali ke fasa air [7].

Metode yang pernah digunakan untuk mengisolasi senyawa minyak atsiri dari daun legundi yakni dengan menggunakan distilasi air oleh abaz azimi dan kawan-kawan, namun dalam penelitian tersebut belum mencakup karakter sifat fisik dan kimia dari minyak

atsiri dari daun legundi. Pada penelitian tersebut hanya melakukan karakterisasi komponen penyusun minyak atsiri dari daun legundi dengan uji menggunakan KG-SM varian 3400 dengan kolom DBI berisi silika dengan panjang kolom 60 m dan diperoleh 17 komponen terdeteksi [8].

Penyulingan dengan air memiliki beberapa kekurangan diantaranya sampel terendam dalam air, hal ini dapat menyebabkan minyak atsiri dari daun legundi akan tercampur kedalam air dan hanya sedikit minyak yang keluar menuju pendingin, beda halnya dengan distilasi uap, distilasi uap menggunakan paparan uap panas sehingga akan terjadi hidrodifusi karena perbedaan tekanan dan uap akan membawa minyak keluar melaui pendingin [9].

Informasi mengenai minyak atsiri dari daun legundi sangatlah sedikit, hal ini ditunjukkan dengan belum adanya parameter standar yang dapat digunakan sebagai acuan karakter dari minyak atsiri dari daun legundi. Berdasarkan uraian sebelumnya maka dilakukanlah penelitian mengenai isolasi dan karakterisasi penyusun minyak atsiri hasil distilasi uap daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan kromatografi gas spektrometer massa (KG - SM), sehingga dapat digunakan sebagai pertimbangan penentuan sifat fisik dan profil komponen minyak atsiri dari daun legundi (*Vitex trifolia*).

Metode penelitian yang digunakan dalam penelitian ini dilakukan dengan cara didistilasi uap hingga distilat tidak menghasilkan minyak lagi dengan parameter uji fisik dengan kertas saring yang kemudian dilanjutkan dengan mengekstrak distilat yang telah diperoleh, sehingga diperoleh ekstrak minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*). Ekstrak yang diperoleh dibebaskan dari fasa air dengan menggunakan $\text{MgSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ dan dilanjutkan dengan menguapkan pelarut organik dengan gas N_2 . Minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) Setelah bebas dari pelarut, minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) kemudian dianalisis komponen penyusunnya dengan menggunakan kromatografi gas-spektrometer massa (KG-MS).

1.2. Perumusan Masalah

1. Apa saja komponen penyusun minyak atsiri yang terkandung dalam daun legundi (*Vitex trifolia*)?
2. Bagaimanakah sifat fisik dan kimia dari minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*)?

1.3. Batasan Masalah

1. Lama distilasi uap dilakukan hingga distilat tidak mengandung minyak dengan parameter warna distilat dan penetesan distilat pada kertas saring.
2. Analisis komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dilakukan dengan Kromatografi Gas - Spektrometer Massa (KG-SM).

1.4. Tujuan Penelitian

1. Mengidentifikasi komponen penyusun minyak atsiri yang terkandung dalam daun legundi (*Vitex trifolia*).
2. Menentukan sifat fisik dan kimia dari minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*).

1.5. Manfaat Penelitian

Hasil dari penelitian ini diharapkan dapat memberikan informasi tentang kualitas rendemen dan komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) sehingga dapat digunakan sebagai acuan pengembangan minyak atsiri di Indonesia.

UNIVERSITAS BRAWIJAYA

Halaman ini sengaja dikosongkan



BAB II TINJAUAN PUSTAKA

2.1. Legundi (*Vitex Trifolia*)

Legundi (*Vitex trifolia*) tumbuh sebagai tanaman maupun semak belukar, dan oleh beberapa orang digunakan sebagai pagar halaman [10]. Tanaman tersebut juga dilaporkan memiliki beberapa efek farmakologi, selain itu tanaman ini mempunyai peluang digunakan sebagai obat. Hal ini dapat dimungkinkan karena di dalam buah maupun daun legundi terdapat senyawa-senyawa yang dapat dimanfaatkan [11].



Gambar 1.1 Legundi (*Vitex trifolia*)

Klasifikasi dari tanaman legundi (*Vitex trifolia*) adalah sebagai berikut [12]:

Nama Indonesia	: <i>Vitex trifolia</i>
Sinonim	: <i>Simpleleaf chatetree</i> (Inggris)
Kingdom	: <i>Plantae</i> (Tumbuhan)
Subkingdom	: <i>Tracheobionta</i> (Tumbuhan berpembuluh)
Super Divisi	: <i>Spermatophyta</i> (Menghasilkan biji)
Divisi	: <i>Magnoliophyta</i> (Tumbuhan berbunga)
Kelas	: <i>Magnoliopsida</i> (Berkeping dua / dikotil)
Sub Kelas	: <i>Asteridae</i>
Ordo	: <i>Lamiales</i>
Famili	: <i>Verbenaceae</i>
Genus	: <i>Vitex</i>
Spesies	: <i>Vitex trifolia L</i>

Genus *Vitex* mempunyai banyak spesies yang berupa tanaman maupun semak belukar, dan beberapa referensi melaporkan *Vitex* mempunyai 70 spesies diantaranya adalah *V. agnus-castus*., *V. incisa*, *V. divaricata*., *V. glabrata*., *V. negundo*., *V. parviflora* , *V. trifolia*. *V. negundo* dan *V. incisa* berasal dari Asia, *V. Agnus-castus*, L. berasal dari Mediterania, sedangkan *V. trifolia* berasal dari India dan Meksico. *V. trifolia* atau disebut sebagai tanaman legundi, mempunyai beberapa varietas yaitu *V. trifolia* var. *bicolor* (Willd.) Moldenke, var. *subtrisecta* (Kuntze) Moldenke, var. *trifolia*, dan var. *variegata* Moldenke. Ada satu lagi yaitu *V. trifolia* L. var. *simplicifolia* Cham. dengan nama lain *V. rotundifolia* L. f. atau *V. ovata* Thunb [13].

Tanaman legundi merupakan tanaman yang perkembangannya banyak tumbuh di daerah tropis dan di daerah berpasir seperti di daerah pesisir pantai. Pada daerah sungai yang kering tanaman ini banyak ditemukan sebagai tanaman merayap atau banyak ditemukan sebagi semak belukar [1].

2.2. Minyak Atsiri

Minyak atsiri disebut juga sebagai minyak menguap, minyak eteris, atau minyak esensial karena pada temperatur kamar mudah menguap. Istilah atsiri digunakan untuk mewakili aroma dari tanaman asalnya. Minyak atsiri umumnya tidak berwarna dalam keadaan segar dan murni. Namun, pada penyimpanan lama minyak atsiri dapat teroksidasi. Untuk mencegah terjadinya oksidasi, minyak atsiri harus disimpan dalam bejana gelas yang berwarna gelap, diisi penuh, ditutup rapat, serta disimpan di tempat yang kering dan sejuk [5].

Minyak atsiri merupakan produk cair distilasi uap atau air dari bagian tanaman (daun, batang, kulit kayu, biji, buah, akar, dan eskudat tanaman). Minyak atsiri berisi beberapa hingga ratusan kompleks campuran senyawa kimia yang memberikan rasa dan aroma yang khas [10]. Minyak atsiri larut dalam pelarut organik dan tidak larut dalam air [14]. Komponen minyak atsiri dari beberapa tanaman memiliki senyawa aktif yang dapat dimanfaatkan untuk pengobatan ataupun sebagai parfum [15]. Minyak atsiri dapat dipisahkan dari jaringan tanaman melalui proses distilasi ataupun dengan metode ekstraksi [9].

Kualitas minyak atsiri ditentukan oleh karakter alamiah dari masing-masing minyak tersebut serta bahan-bahan asing yang tercampur di dalamnya. Selain itu, faktor lain yang menentukan mutu minyak adalah sifat fisika dan kimia dari minyak, seperti jenis tanaman, umur panen, perlakuan bahan sebelum ekstraksi, jenis peralatan yang digunakan, kondisi prosesnya, bahan-bahan yang digunakan saat ekstraksi, serta perlakuan minyak setelah ekstraksi (kemasan atau wadah penyimpanan) [4].

2.3. Distilasi Uap

Distilasi merupakan suatu metode isolasi menggunakan prinsip penguapan zat cair dan kondensasi. Metode ini digunakan untuk memisahkan zat-zat berdasarkan pada titik didih [16]. Distilasi dilakukan dengan cara jaringan tanaman dikontakkan dengan uap air sehingga minyak atsiri akan menguap dari jaringan bersama uap air yang terbentuk. Campuran uap air dan minyak atsiri dikondensasikan pada suatu saluran yang temperaturnya relatif rendah. Hasil kondensasi berupa campuran air dan minyak atsiri yang dapat dipisahkan karena kedua bahan tidak dapat saling melarutkan [16].

Pada sistem distilasi uap ini, air sebagai sumber uap panas terdapat dalam *boiler* yang letaknya terpisah dari ketel penyulingan. Uap yang dihasilkan mempunyai tekanan lebih tinggi dari tekanan udara luar sehingga uap air akan menuju ke tekanan rendah [17]. Sampel secara terus menerus dipanaskan dengan menggunakan uap air yang kemudian uap air akan membawa komponen yang dapat menguap melewati kondensor sehingga uap air beserta komponen yang menguap akan terkondensasi kembali [15].

Distilasi uap sangat baik digunakan untuk mendapatkan komponen minyak atsiri yang berada dalam tanaman. Distilasi menciptakan kondisi yang lebih baik untuk proses osmosis minyak atsiri. Uap yang digunakan pada distilasi uap adalah uap jenuh yang memiliki tekanan melebihi 1 atmosfer. Dalam keadaan tersebut, seluruh minyak atsiri dalam sampel akan terpisah dari tanaman. Distilasi uap merupakan metode distilasi yang lebih baik bila dibandingkan dengan distilasi air ataupun uap dan air jika ditinjau dari segi biaya, kecepatan distilasi, dan kapasitas produksi minyak [19].

2.4. Ekstraksi

Ekstraksi adalah pemisahan satu atau beberapa bahan dari suatu padatan atau cairan dengan bantuan pelarut. Ekstraksi juga merupakan proses pemisahan satu atau lebih komponen dari suatu campuran homogen menggunakan pelarut cair (solven) sebagai *separating agent*. Pemisahan terjadi atas dasar kelarutan yang berbeda dari komponen-komponen dalam campuran [20].

Prinsip dari metode ini berdasarkan pada distribusi zat terlarut antara dua pelarut yang tidak saling bercampur [16]. Ekstraksi dilakukan dengan menambahkan pelarut (solven) yang tidak bercampur dengan fasa air, kemudian dilakukan pengocokan sehingga terjadi kesetimbangan konsentrasi zat yang akan diekstraksi pada kedua lapisan. Setelah itu lapisan didiamkan dan dipisahkan.

Pelarut yang umumnya digunakan dalam ekstraksi antara lain dietil eter, toluena, dikloro metana, petroleum eter, etil asetat, benzena, karbon tetraklorida, dan kloroform [16]. Pelarut yang dapat digunakan harus memenuhi syarat sebagai berikut [18]:

1. Harus dapat melarutkan semua zat wangi bunga dengan cepat dan sempurna, dan sedikit mungkin melarutkan bahan seperti: lilin, pigmen, senyawa albumin, dengan kata lain pelarut harus bersifat selektif.
2. Harus mempunyai titik didih yang cukup rendah, agar pelarut mudah diuapkan tanpa menggunakan temperatur tinggi. Namun titik didih pelarut tidak boleh terlalu rendah, karena hal ini akan mengakibatkan hilangnya sebagian pelarut akibat penguapan pada musim panas.
3. Pelarut tidak boleh larut dalam air.
4. Pelarut harus bersifat inert, sehingga tidak bereaksi dengan komponen minyak bunga.
5. Harga pelarut harus serendah mungkin, dan tidak mudah terbakar.

2.5. Kromatografi Gas – Spektrometer Massa

KG - SM adalah perpaduan dua instrumen analisis dengan teknik yang berbeda, yaitu alat kromatografi gas dan spektrometer massa [21]. Prinsip kerja dari KG-SM yaitu penggabungan teknik pemisahan selektif dan teknik analisis spesifik dengan menggunakan gas inert sebagai fasa geraknya [22]. Prinsip kerja kromatografi gas didasarkan pada perbedaan interaksi antara fasa diam dan fasa gerak

menggunakan perbedaan titik didih suatu senyawa. Senyawa yang memiliki waktu retensi lama menunjukkan senyawa tersebut bertitik didih paling tinggi [23].

Sistem kromatografi gas terdiri dari beberapa komponen yaitu gas pembawa (helium, nitrogen, argon, dan hidrogen) yang bersifat inert, injektor, kolom, dan detektor. Kolom merupakan tempat terjadinya proses pemisahan campuran dalam sampel. Apabila molekul-molekul komponen berinteraksi secara lemah dengan fasa diam dalam kolom maka komponen tersebut akan bergerak lebih cepat meninggalkan fasa diam [24].

Spektrometer massa merupakan detektor paling mutakhir dalam kromatografi gas. Detektor ini dihubungkan dengan *output* kromatografi gas. Ketika gas *solute* memasuki spektrometer massa, maka molekul senyawa organik ditembak dengan elektron dengan kecepatan 70 eV. Tabrakan antara molekul organik dengan elektron berenergi tinggi menyebabkan lepasnya sebuah elektron dari molekul itu dan terbentuknya suatu ion organik. Ion organik yang dihasilkan oleh tembakan elektron tersebut tidak stabil dan terfragmentasi menjadi fragmen kecil, baik berbentuk radikal bebas maupun ion-ion lain. Dalam sebuah spektrometer massa, fragmen bermuatan positif akan terdeteksi [25].

Spektrum massa merupakan data *output* dari spektrometer massa dalam bentuk grafik komposisi *versus* rasio massa/muatan (m/z) dari partikel bermuatan positif yang diperoleh dari tembakan elektron berenergi tinggi terhadap sebuah molekul [26]. Setiap puncak dalam spektrum massa menyatakan suatu fragmen molekul. Intensitas puncak sebanding dengan komposisi relatif fragmen-fragmen. Puncak tertinggi dalam suatu spektrum, yang disebut *base peak*, dinyatakan dengan nilai komposisi 100 % [27].

2.6. Penentuan Sifat Fisik dan Kimia

Penentuan sifat fisik dan kimia dari suatu komponen minyak atsiri perlu dilakukan untuk mengetahui hal-hal yang mempengaruhi karakter dari minyak atsiri tersebut. Penentuan sifat fisik dari minyak atsiri meliputi warna, berat jenis dan indeks bias [28]. Penentuan sifat kimia dilakukan dengan penentuan bilangan asam [29], sehingga dapat digunakan untuk standar sifat dari minyak atsiri.

UNIVERSITAS BRAWIJAYA

Halaman ini sengaja dikosongkan

BAB III

METODOLOGI PENELITIAN

3.1. Tempat dan Waktu Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan pada bulan Maret 2012 hingga bulan Juni 2012. Sampel yang digunakan untuk penelitian dideterminasi oleh Dinas Kesehatan Propinsi Jawa Timur UPT Materia Medica Batu (lampiran A2). Lokasi untuk isolasi, penentuan sifat fisik dan kimia minyak atsiri dari daun legundi (*Vitex trifolia*) dilaksanakan di Laboratorium Kimia Organik, jurusan Kimia Fakultas Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Brawijaya Malang, dan karakterisasi komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan menggunakan kromatografi gas-spektrometer massa dilaksanakan di Laboratorium Kimia Organik, Jurusan Kimia, Fakultas Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Gajah Mada Yogyakarta.

3.2. Alat dan Bahan Penelitian

3.2.1. Alat

Alat yang digunakan dalam penelitian ini adalah seperangkat alat distilasi uap, seperangkat alat distilasi dengan menggunakan kolom *vigroux*, seperangkat alat evaporator pengurang tekanan, gelas kimia 500 mL, gelas ukur 100 mL, pipet tetes, corong pisah 500 mL, aluminium foil, kertas label, botol sampel, keranjang, gunting, spatula, mortar, cawan porselen, corong gelas, gelas arloji, neraca analitik, piknometer 2 mL, refraktometer, dan Kromatografi Gas - Spektrometer Massa Shimadzu-QP2010S.

3.2.2. Bahan

Sampel yang digunakan adalah daun legundi (*Vitex trifolia*) yang diperoleh dari Dinas Kesehatan Propinsi Jawa Timur UPT Materia Medica Batu. Bahan yang digunakan dalam penelitian ini adalah n-heksan teknis, $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$, gas nitrogen, KOH, dan etanol.

3.3. Tahapan Penelitian

1. Determinasi daun legundi (*Vitex trifolia*)
2. Preparasi MgSO_4 anhidrat dari $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$
3. Distilasi n-heksan teknis
4. Isolasi minyak atsiri dari daun legundi (*Vitex trifolia*) menggunakan metode distilasi uap
5. Ekstraksi lapisan air
6. Pengikatan fasa air dari ekstrak minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan $\text{MgSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$
7. Evaporasi pelarut dengan menggunakan *Rotary Evaporator* pengurang tekanan
8. Pembebasan minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dari pelarut n-heksan menggunakan gas nitrogen
9. Uji sifat fisika dan kimia
10. Analisis komponen minyak legundi (*Vitex trifolia*) menggunakan Kromatografi Gas - Spektrometer Massa (KG-SM)

3.4. Prosedur Kerja Penelitian

3.4.1. Determinasi Daun Legundi (*Vitex trifolia*)

Daun legundi (*Vitex trifolia*) yang digunakan, dideterminasi terlebih dahulu oleh Dinas Kesehatan Propinsi Jawa Timur UPT Materia Medica Batu.

3.4.2. Preparasi $\text{MgSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ dari $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$

Padatan $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ digerus dengan menggunakan mortar hingga berbentuk serbuk halus dan ditimbang sebanyak 50 g, kemudian dipindahkan kedalam cawan porselen yang telah diketahui massanya. Padatan $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ dalam cawan porselen dikeringkan dalam oven dengan temperatur 120°C , kemudian dilakukan penimbangan. Pengeringan dilakukan hingga diperoleh berat konstan. Setelah diperoleh berat konstan, padatan dipindahkan ke dalam desikator.

3.4.3. Distilasi n-heksan Teknis

N-heksan teknis didistilasi dengan cara menyiapkan satu set alat distilasi, kemudian n-heksan teknis dan batu didih dimasukkan ke dalam labu alas bulat. Setelah itu pompa air dinyalakan dan *heating mantle* dipanaskan. Proses distilasi dimulai dan distilat yang

terbentuk ditampung saat termometer menunjukkan temperatur uap sebesar 68,5 °C.

3.4.4. Isolasi Minyak Atsiri dari Daun Legundi (*Vitex trifolia*) Menggunakan Metode Distilasi Uap

Isolasi minyak legundi dilakukan dengan cara disiapkan satu set alat distilasi uap. Daun legundi (*Vitex trifolia*) dimasukkan ke dalam ketel distilasi dan dirangkai, kemudian dialirkan air pada kondensor. Setelah semua peralatan terpasang, distilasi siap dilakukan dengan memanaskan sumber uap kemudian menampung distilat dalam corong pisah, fasa air dan fasa organik kemudian dipisahkan.

3.4.5. Ekstraksi Lapisan Air dengan n-heksan

Distilat yang diperoleh diekstraksi dengan mengambil n-heksan sebanyak 100 mL, kemudian ditambahkan distilat sebanyak 300 mL lalu dilakukan ekstraksi untuk memisahkan fasa air dan fasa organiknya. Fasa organik ditempatkan kembali pada corong pisah dan dilakukan pengulangan prosedur sebelumnya hingga fasa organik berubah menjadi kuning kemudian fasa organik ditempatkan pada wadah tersendiri.

3.4.6. Pengikatan Fasa Air dari Ekstrak Minyak Atsiri Daun Legundi (*Vitex trifolia*) dengan $\text{MgSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$

Fasa organik yang diperoleh ditambahkan dengan $\text{MgSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ untuk mengikat sisa air yang ikut terbawa saat ekstraksi. Penambahan $\text{MgSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ dilakukan dengan cara fasa organik dimasukkan ke dalam gelas kimia 500 mL dan kemudian ditambahkan $\text{MgSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ sedikit demi sedikit hingga terbentuk endapan putih sehingga dapat mempermudah proses pemisahan dengan dekantasi.

3.4.7. Evaporasi Pelarut dengan Rotary Evaporator Pengurang Tekanan

Fasa organik kemudian dievaporasi menggunakan *rotary evaporator* pengurang tekanan. Fasa organik yang telah terbebas dari fasa air dimasukkan ke dalam labu alas bulat dan kemudian dipasang pada rangkaian alat *rotary evaporator* pengurang tekanan. Setelah

pelarut terevaporasi, fasa organik yang tersisa di dalam labu alas bulat dipindahkan ke wadah minyak yang telah disediakan dan telah diketahui berat dari wadah tersebut.

3.4.8. Pembebasan Minyak Atsiri Daun Legundi (*Vitex Trifolia*) dari Pelarut n-heksan Menggunakan Gas Nitrogen

Pembebasan minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dari pelarut dilakukan dengan cara memberikan paparan N_2 secara langsung ke minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*), kemudian dilakukan penimbangan hingga diperoleh berat konstan.

3.4.9. Penentuan Sifat Fisik dan Kimia

Penentuan sifat fisik minyak atsiri dari daun legundi meliputi penentuan warna dengan menggunakan indra penglihatan, berat jenis dengan menggunakan piknometer 2 mL, dan indeks bias dengan menggunakan refraktometer. Uji sifat kimia meliputi penentuan bilangan asam dengan titrasi minyak atsiri dari daun legundi (*Vitex trifolia*) yang dilarutkan dalam etanol 95% menggunakan KOH 0,01 M dan indikator PP, serta identifikasi dengan Kromatografi Lapis Tipis.

3.4.10. Analisis Komponen Minyak Atsiri dari Daun Legundi (*Vitex trifolia*) Menggunakan Kromatografi Gas - Spektrometer Massa (KG-SM)

Minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dianalisis komponen penyusunnya dengan menggunakan Kromatografi Gas - Spektrometer Massa dengan karakterisasi:

Merk	: GCMS-QP2010S Shimadzu
Kolom	: RASTEK RXi-5MS
Panjang	: 30 Meter
Gas pembawa	: Helium
Pengion	: EI 70 eV
Temperatur injeksi	: 225 °C
Tekanan	: 12 kPa
Temperatur kolom	: 60 °C-215 °C dengan kenaikan 5 °C per menit

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1. Isolasi Minyak Atsiri dari Daun Legundi (*Vitex trifolia*)

Isolasi minyak atsiri dari daun legundi dilakukan dengan menggunakan metode distilasi uap dengan sampel dalam kondisi kering dengan berat susut 30%. Dalam proses pengeringan sebagian ikatan glikosida akan terurai sehingga dapat mempercepat proses distilasi [9]. Alat distilasi yang dipergunakan di tambahkan dengan corong pisah pada ujung kondensor (lampiran A3), hal ini dilakukan untuk memisahkan antara minyak atsiri dan air. dengan bantuan grafitasi minyak yang memiliki fraksi ringan akan terpisah (lampiran A4).

Minyak atsiri hasil pemisahan dengan gravitasi ditambahkan *drying agent* $\text{MgSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ yang diperoleh dari preparasi $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ dengan pemanasan pada temperatur 120°C untuk melepaskan hidrat yang terikat pada MgSO_4 . Pada preparasi tersebut MgSO_4 yang diperoleh kehilangan 6 molekul H_2O , sehingga MgSO_4 yang diperoleh dapat digunakan untuk menyerap air [30] (lampiran C.1). minyak yang diperoleh dipisahkan dari $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ dengan dekantasi. Rendemen minyak yang diperoleh dari proses pemisahan sebesar 3,38 g atau 0,423 %.

Lapisan air hasil pemisahan dengan gravitasi diekstraksi dengan menggunakan n-heksan untuk memperoleh minyak atsiri yang terdistribusi di dalam air. Ekstrak minyak dipisahkan dari pelarutnya dengan menggunakan rotary pengurang tekanan, pengurangan tekanan dilakukan untuk menurunkan tekanan pada sistem sehingga titik didih pelarut mudah tercapai. Untuk mempercepat tercapainya titik didih pelarut ditambahkan dengan sedikit pemanasan saat proses pemisahan dengan *rotary* pengurang tekanan. diperoleh berat minyak sebesar 12,90 g, minyak tersebut menyisakan sedikit pelarut sehingga perlu dilakukan pembebasan pelarut dengan menggunakan paparan dengan gas N_2 , paparan N_2 dilakukan untuk menurunkan tekanan pada system sehingga pelarut mudah teruapkan, selain dapat menguapkan pelarut paparan N_2 dilakukan untuk mengusir oksigen sehingga dapat mencegah terjadinya oksidasi. Dari proses ini diperoleh berat rendemen minyak

sebesar 4,84 g atau 0,605 %, sehingga total rendemen minyak atsiri dari daun legundi yang diperoleh sebesar 8,22 g atau 1,028 %.

4.2 Karakterisasi Sifat Fisik, Kimia dan Karakterisasi dengan Kromatografi Lapis Tipis

Minyak atsiri yang diperoleh kemudian ditentukan sifat fisiknya meliputi warna, berat jenis, dan indeks bias, sedangkan untuk uji sifat kimia meliputi uji penentuan bilangan asam. Uji sifat fisika dan kimia dilakukan untuk mengetahui karakteristik dari minyak atsiri yang diperoleh. Penentuan warna dilakukan dengan indra penglihatan dan diperoleh warna minyak orange kemerahan untuk minyak hasil pemisahan dengan gravitasi dan warna orange gelap untuk minyak yang diperoleh dari ekstraksi lapisan air.

Penentuan berat jenis dilakukan dengan menggunakan piknometer 2 mL dan diperoleh dengan perbandingan antara berat jenis minyak atsiri dengan berat jenis air dan diperoleh berat 0,86 untuk minyak hasil pemisahan dengan gravitasi dan 0,82 untuk minyak hasil ekstraksi lapisan air. Penentuan berat jenis dilakukan untuk mengetahui berat molekul komponen penyusun minyak tersebut, semakin berat fraksi komponen yang terkandung dalam minyak tersebut maka berat minyak tersebut akan semakin tinggi.

Nilai yang diperoleh dalam penentuan indeks bias untuk minyak atsiri dari daun legundi diperoleh 1,493 untuk minyak hasil pemisahan dengan gravitasi dan 1,457 untuk minyak hasil ekstraksi lapisan air. Indeks bias dipengaruhi oleh banyaknya komponen bergugus karbonil yang terdapat dalam minyak yang diperoleh, selain itu juga dipengaruhi oleh banyaknya ikatan rangkap. Banyaknya rantai karbon dan ikatan rangkap dapat memperpendek jarak antar medium dari masing-masing komponen sehingga dengan semakin rapatnya medium, cahaya yang datang akan lebih sukar untuk teruskan dan akan menyebabkan indeks bias meningkat.

Penentuan bilangan asam dari minyak atsiri dari daun legundi diperoleh sebesar 2,19 untuk minyak hasil pemisahan dengan gravitasi dan 1,56 untuk minyak hasil ekstraksi lapisan air. Penentuan bilangan asam dilakukan untuk menentukan asam bebas yang terdapat dalam minyak atsiri. Dalam sebagian besar minyak atsiri terkandung sebagian kecil asam bebas yang dapat ditentukan dengan jumlah KOH 0,01 mol dalam 1 g minyak atsiri. Besar nilai

bilangan asam juga dapat dipengaruhi oleh lama penyimpanan minyak, selain itu oksidasi dari minyak dapat meningkatkan bilangan asam [9]

Perbedaan sifat fisik dan kimia yang diperoleh menunjukkan adanya perbedaan komposisi komponen penyusun minyak atsiri dari daun legundi hasil pemisahan dengan menggunakan gravitasi dan hasil ekstraksi distilat. Identifikasi dengan KLT dilakukan untuk memisahkan komponen-komponen penyusun minyak atsiri dari daun legundi berdasarkan kemampuan terdistribusi antara senyawa dengan fasa diam. Kromatografi lapis tipis digunakan untuk mengetahui jenis komponen secara kualitatif berdasarkan noda yang terbentuk (letak warna, bentuk, dan ukuran suatu noda).

Uji dengan menggunakan KLT untuk minyak yang langsung terbentuk saat pemisahan dengan gravitasi diperoleh 8 noda dengan nilai Rf sebagai berikut: (Lampiran C.4.2).

Tabel 4.2.1 Warna noda dan nilai *retardation factor* minyak atsiri hasil pemisahan dengan gravitasi

Noda ke	Warna noda	Nilai Rf
1	Ungu kebiruan	0,813
2	Ungu	0,367
3	Biru	0,483
4	Ungu muda	0,6
5	Hijau tua	0,717
6	Ungu muda	0,883
7	Ungu tua	0,95
8	Ungu tua	1

Sedangkan untuk minyak hasil ekstraksi pelarut diperoleh 5 noda dengan nilai Rf sebagai berikut :

Tabel 4.2.2 Warna noda dan nilai *retardation factor* minyak hasil ekstraksi lapisan air

Noda ke	Warna noda	Nilai Rf
1	Biru	0,15
2	Biru	0,283
3	Biru	0,617
4	Ungu muda	0,95
5	Ungu tua	1

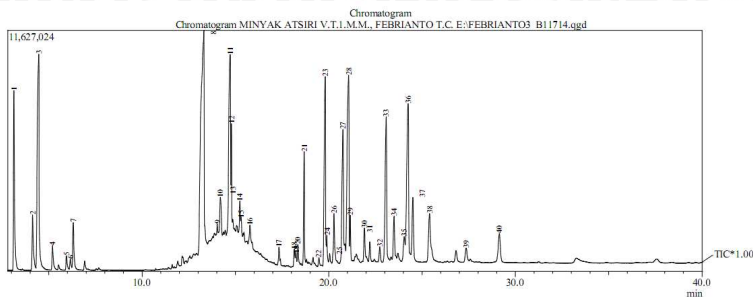
Banyaknya noda yang diperoleh merupakan banyaknya komponen yang dapat dipisahkan oleh plat silika berdasarkan kemampuan terdistribusi antara senyawa terhadap fasa diam dan fasa geraknya. Berdasarkan uraian tersebut warna dominan yang dihasilkan adalah warna ungu dan biru yang menunjukkan senyawa yang terpisah merupakan senyawa golongan terpenoid (monoterpen, sesquiterpen, dan diterpen) dari minyak atsiri [33]. Usulan komponen penyusun minyak atsiri dari daun legundi kemudian dengan analisis dengan menggunakan Kromatografi Gas-spektrometer massa.

4.3 Karakterisasi Komponen Penyusun Minyak Atsiri dari Daun Legundi (*Vitex trifolia*) dengan Menggunakan Kromatografi Gas-Spektrometer Massa (KG-SM)

Minyak atsiri dari daun legundi dikarakterisasi dengan menggunakan KG-SM untuk mengetahui komponen penyusun minyak atsiri dari daun legundi. Kromatografi gas akan memisahkan komponen penyusun minyak atsiri berdasarkan koefisien distribusi antara fasa diam dan fasa geraknya. Spektrometer Massa sebagai detektor yang dapat menentukan struktur komponen dengan menembak fragmen yang diperoleh dari kromatografi gas dengan elektron sebesar 70 eV, sehingga senyawa akan membelah berdasarkan fragmen-fragmen yang spesifik. Hasil dari KG-SM berupa *Total Ion Current* (TIC) yang terdiri dari kromatogram dan spektrum massa.

Instrumen KG-SM yang digunakan yaitu GCMS-QP2010S Shimadzu yang menggunakan kolom Rastek RXi-5MS dengan panjang 30 m. Kolom tersebut berisi senyawa yang terdiri dari senyawa non polar 5 % difenil dan 95 % dimetilpolisiloksan, sehingga senyawa yang memiliki tingkat kepolaran yang rendah (non polar) akan tertahan lebih lama dalam kolom dan yang memiliki tingkat kepolaran yang lebih tinggi akan terlebih dahulu keluar dari kolom menuju ke detektor.. Berdasarkan kromatogram dapat diketahui banyaknya komponen yang dapat dipisahkan oleh kromatografi gas. Masing-masing puncak pada kromatogram total ionik minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dipindai (*scan*) sehingga diperoleh spektrum massa dan dianalisis pola fragmentasinya.

Respon Detektor

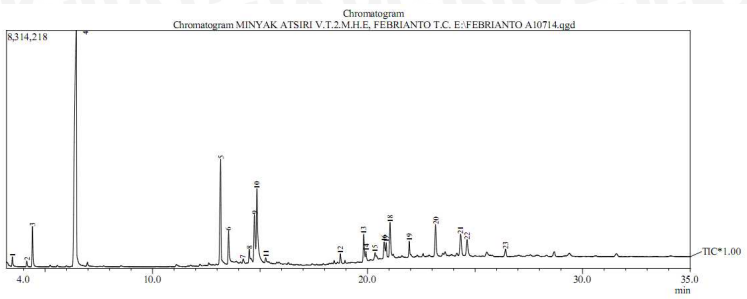


Waktu retensi (menit)

Gambar 4.3.1 Kromatogram minyak atsiri hasil pemisahan dengan gravitasi

Tabel 4.3.1 Waktu retensi dan persen komposisi komponen penyusun minyak atsiri dari daun legundi (*Vitex trifolia*) hasil pemisahan dengan gravitasi

No	Waktu retensi	Komposisi (%)	No	Waktu retensi	Komposisi (%)
1	3,131	4,50	21	18,682	2,40
2	4,132	1,70	22	19,467	0,21
3	4,463	9,51	23	19,813	6,43
4	5,202	0,68	24	19,900	0,58
5	5,947	0,43	25	20,058	0,22
6	6,153	0,30	26	20,282	1,34
7	6,313	1,40	27	20,762	4,87
8	13,313	17,21	28	21,065	8,88
9	14,025	0,22	29	21,154	0,94
10	14,193	1,39	30	21,914	0,87
11	14,720	7,90	31	22,201	0,54
12	14,783	1,45	32	22,734	0,47
13	14,875	0,20	33	23,076	5,40
14	15,240	0,69	34	23,500	1,24
15	15,308	0,37	35	24,046	0,96
16	15,780	0,56	36	24,254	7,52
17	17,335	0,55	37	24,505	2,35
18	18,155	0,44	38	25,399	2,53
19	18,250	0,36	39	27,360	0,54
20	18,349	0,51	40	29,141	1,34

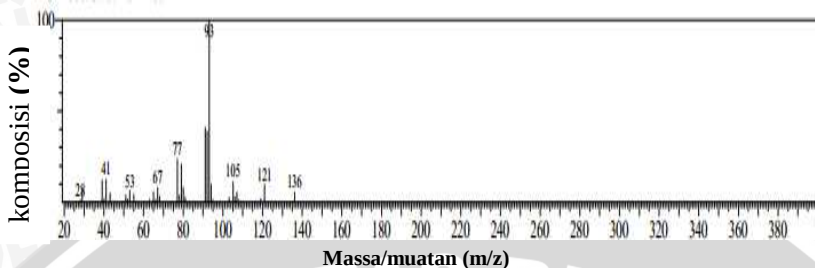


Waktu retensi (menit)

Gambar 4.3.2 Kromatogram minyak atsiri dari daun legundi hasil ekstraksi lapisan air

Tabel 4.3.2 Waktu retensi dan persen komposisi komponen penyusun minyak atsiri dari daun legundi (*Vitex trifolia*) untuk minyak hasil ekstraksi lapisan air

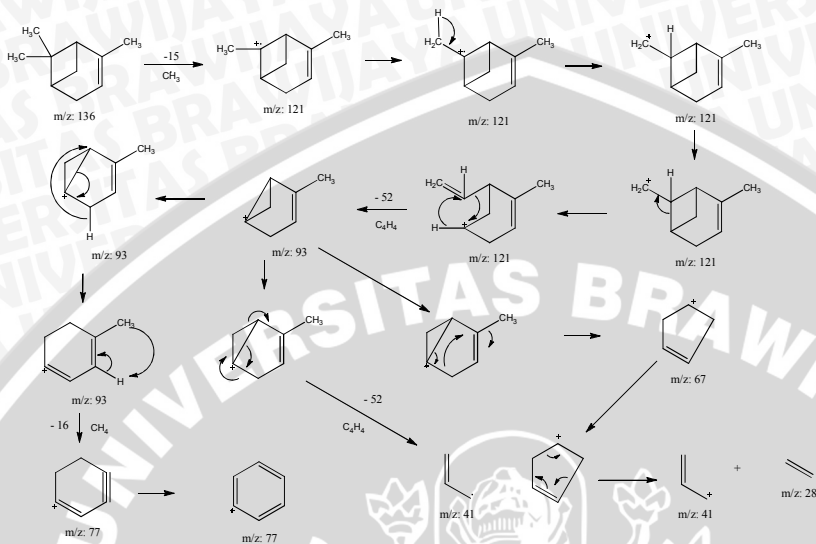
No	Waktu retensi	Komposisi (%)	No	Waktu retensi	Komposisi (%)
1	3,475	0,66	13	19,823	2,71
2	4,152	0,44	14	19,926	0,82
3	4,412	3,32	15	20,345	0,42
4	6,455	43,43	16	20,772	1,87
5	13,164	9,93	17	20,870	1,11
6	13,531	2,88	18	21,049	3,47
7	14,208	0,42	19	21,943	1,10
8	14,500	1,23	20	23,165	3,49
9	14,734	5,88	21	24,331	2,96
10	14,853	9,68	22	24,635	2,21
11	15,265	0,37	23	26,421	0,77
12	18,737	0,81			



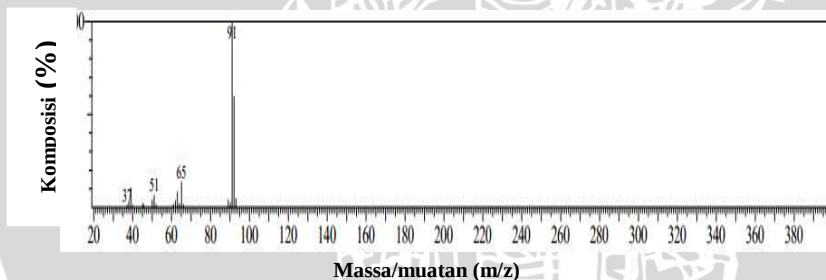
Gambar 4.3.3 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 3,131 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.3 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut : 28, 41, 23, 67, 77, 93, 105, 121, 136. Puncak-puncak yang muncul pada gambar 4.3.3 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi α -pinen pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.1)

Berdasarkan spektrum massa, diperoleh puncak $m/z = 136$ yang mengalami pelepasan metil (CH_3) sehingga dihasilkan puncak $m/z = 121$. Kemudian mengalami penataan ulang atom H pada molekul metil lalu terjadi pelepasan molekul C_4H_4 sehingga diperoleh puncak $m/z = 93$. Selain itu akan dihasilkan 3 kemungkinan siklus pelepasan yaitu pelepasan C_4H_4 yang menghasilkan puncak $m/z = 41$, pelepasan CH_4 yang menghasilkan puncak $m/z = 77$ dan pelepasan CH_3 yang menghasilkan puncak $m/z = 41$ dan $m/z = 28$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 3,13 menit adalah α -pinen dengan didukung oleh library WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa α -pinen yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.4.



Gambar 4.3.4 Pola fragmentasi α -pinen

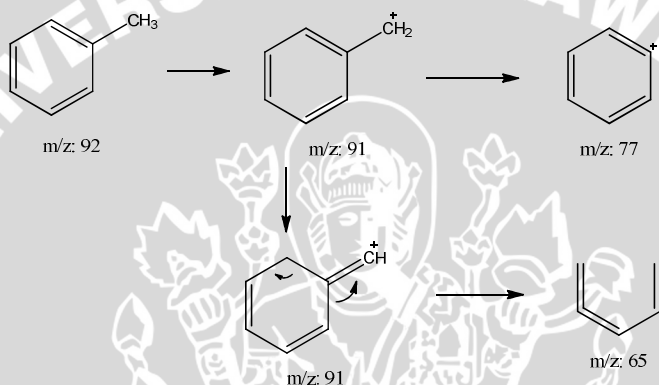


Gambar 4.3.5 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 3,475 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

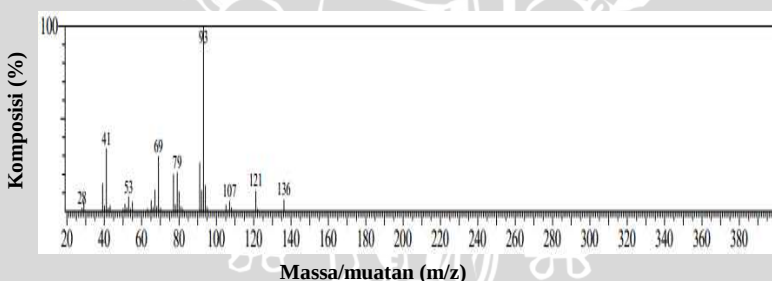
Spektrum massa pada Gambar 4.3.5 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 91, 65, 51. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.5 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi metil toluen pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.2).

Berdasarkan spektrum massa, diperoleh puncak $m/z = 92$ yang membentuk radikal karena adanya hidrogen yang terlepas digantikan oleh radikal positif. Kemudian mengalami penataan ulang sehingga

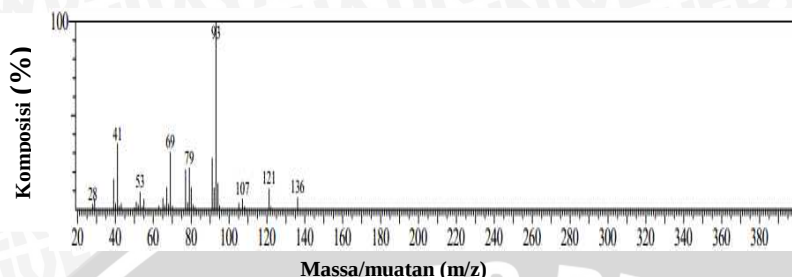
terjadi dua kemungkinan pemutusan yaitu pemutusan pada CH_2 yang menghasilkan puncak $m/z = 77$ sedangkan untuk jalur kedua akan mengalami penataan ulang sehingga diperoleh puncak $m/z = 65$ dengan terjadinya pemutusan C_2H_2 . Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 3,475 menit adalah metil toluein dengan didukung oleh *library* WILLEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa metil toluein yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.6



Gambar 4.3.6 Pola fragmentasi senyawa metil toluein



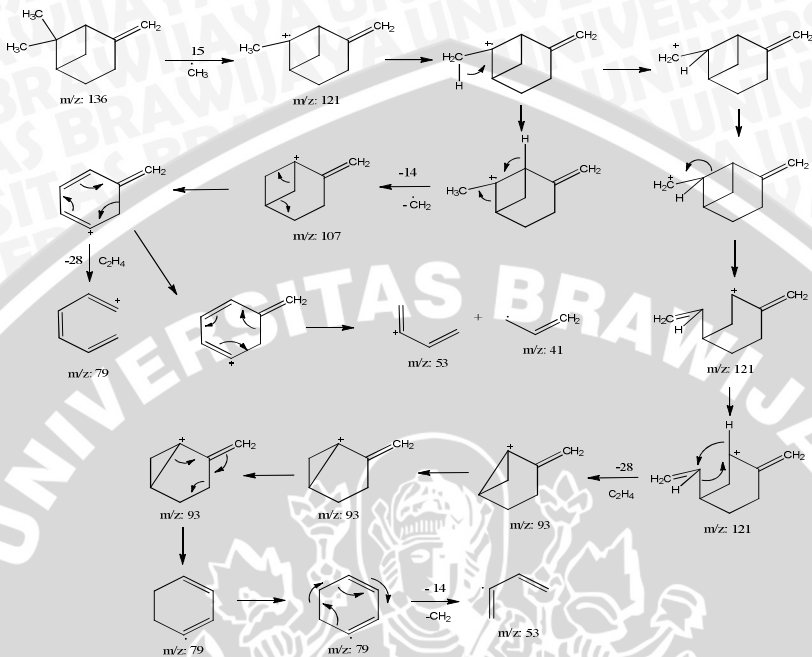
Gambar 4.3.7 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 4,132 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi



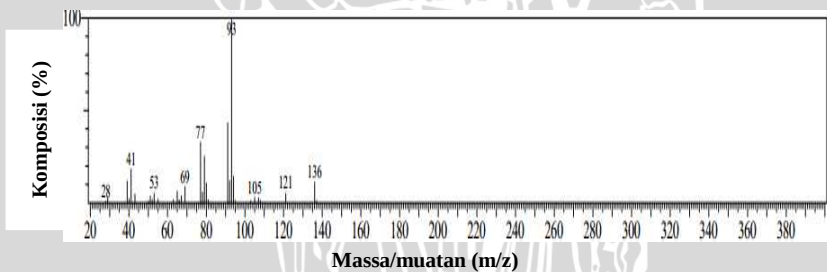
Gambar 4.3.8 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 4,152 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

Spektrum massa pada Gambar 4.3.7 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 53, 69, 79, 93, 107, 121, 136. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.7 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi yang diperoleh pada Gambar 4.3.8 dengan puncak yang dihasilkan yaitu 28, 41, 53, 69, 79, 93, 107, 121, 136. Fraksi tersebut mirip dengan senyawa β -pinen pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.3).

Berdasarkan spektrum massa, diperoleh puncak $m/z = 136$ mengalami pelepasan metil (CH_3) kemudian atom H pada metil mengalami peataan ulang yang memungkinkan terjadinya 2 jalur pemutusan yaitu pemutusan metil yang menghasilkan puncak $m/z = 107$ dan pemutusan C_2H_4 yang menghasilkan puncak $m/z = 121$. Puncak $m/z = 107$ akan terjadi 2 kemungkinan pemutusan yakni pemutusan C_2H_4 yang menghasilkan puncak 79 dan penataan ulang yang menyebabkan terbentuknya 2 puncak yaitu puncak $m/z = 53$ dan $m/z = 41$. Untuk jalur $m/z = 121$ akan menghasilkan puncak $m/z = 93$ karena adanya pemutusan C_2H_4 dan kemudian dilanjutkan dengan pemutusan CH_2 yang menghasilkan $m/z = 79$. Selain itu adanya penataan ulang menyebabkan terputusnya CH_2 yang menghasilkan puncak $m/z = 53$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 4,132 menit dari minyak tanpa ekstraksi dan 4,152 menit adalah β -pinen dengan didukung oleh library WILEY229.LIB. Pola fragmentasi β -pinen yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.9.



Gambar 4.3.9 Pola fragmentasi β -pinen

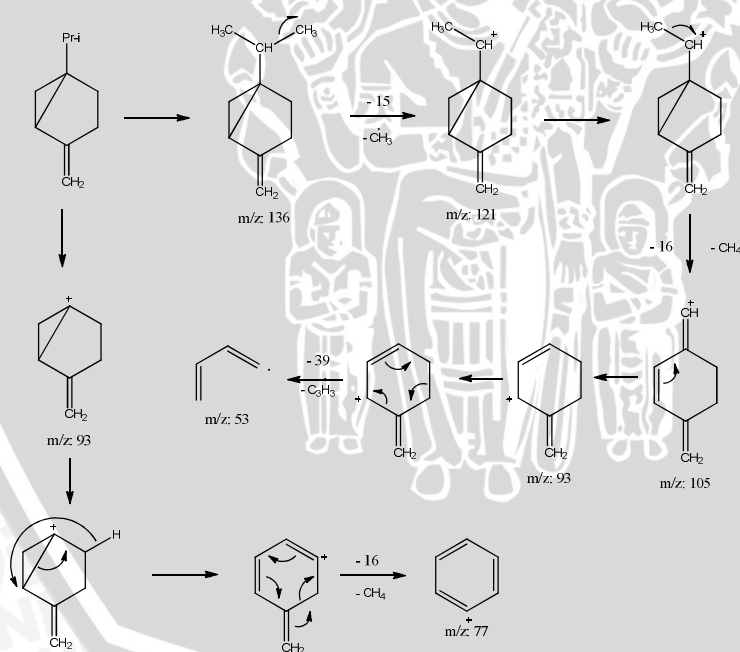


Gambar 4.3.10 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 4,463 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

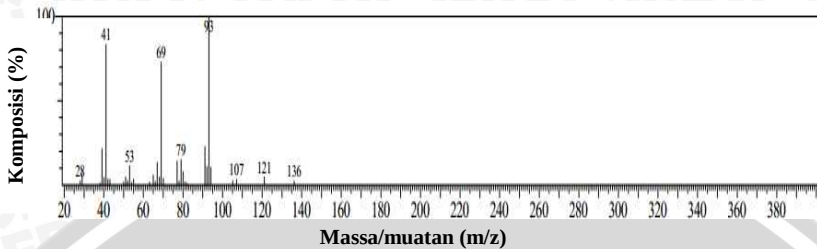
Spektrum massa pada Gambar 4.3.10 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 53, 69, 77, 93, 105, 121, 136. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.10 memiliki

kemiripan dengan pola fragmentasi sabinene pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.4).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui puncak $m/z = 136$ akan mengalami 2 kemungkinan jalur pemutusan yaitu dengan pemutusan isopropil yang menghasilkan puncak $m/z = 93$ dan pemutusan metil CH_3 sebanyak 2 kali berturut-turut yang menghasilkan puncak $m/z = 121$ dan $m/z = 105$. Jalur $m/z = 93$ maka akan mengalami penataan ulang atom hidrogen yang menyebabkan putusnya CH_2 dan menghasilkan puncak $m/z = 77$. Untuk jalur pemutusan melalui $m/z = 105$ akan mengalami pemutusan CH_2 yang menghasilkan puncak $m/z = 93$ yang selanjutnya mengalami penataan ulang dan menghasilkan menghasilkan puncak $m/z = 53$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 4,463 menit adalah sabinene dengan didukung oleh library WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa sabinene yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.11.



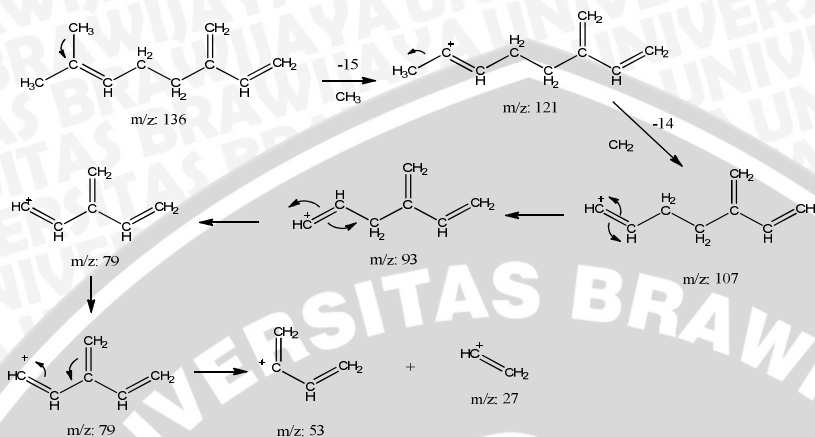
Gambar 4.3.11 Pola fragmentasi sabinene



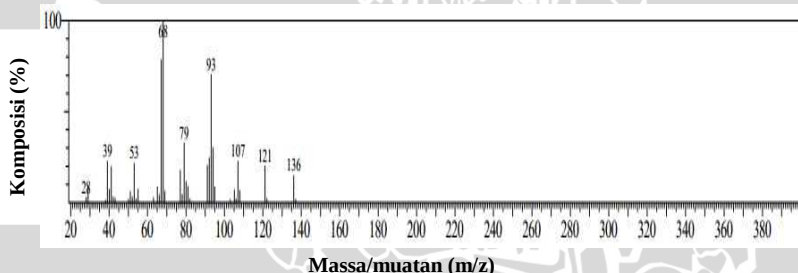
Gambar 4.3.12 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 5,202 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.12 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 53, 69, 79, 93, 107, 121, 136. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.12 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi β -mirsen pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.5).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui puncak m/z = 136 akan mengalami pemutusan metil yang menghasilkan puncak m/z = 121 kemudian dilanjutkan dengan penataan ulang secara berturut-turut yang menghasilkan puncak m/z = 107, m/z = 93, dan m/z = 79. Selanjutnya terjadi pemutusan ikatan C tunggal yang menghasilkan ikatan rangkap dengan puncak m/z = 27 dan menghasilkan puncak m/z = 23. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 5,202 menit adalah β -mirsen dengan didukung oleh *library* WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa β -mirsen yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.13.



Gambar 4.3.13 Pola fragmentasi β -mircen

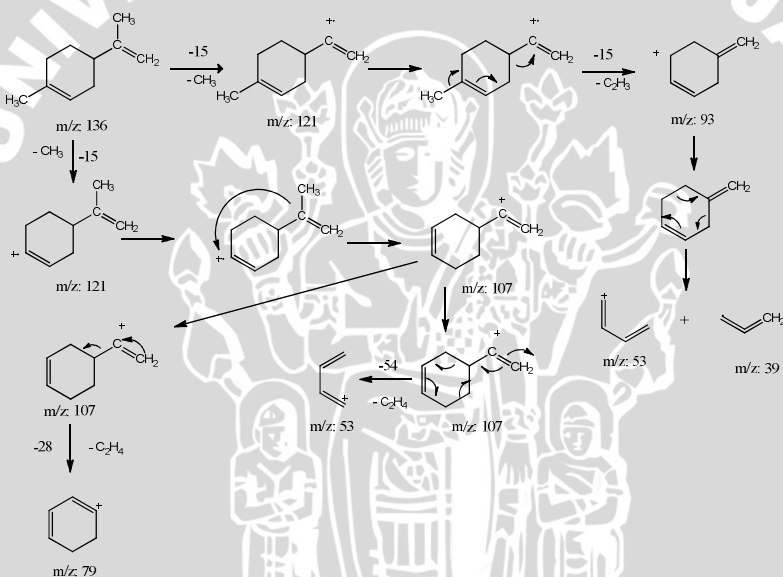


Gambar 4.3.14 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 5,947 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

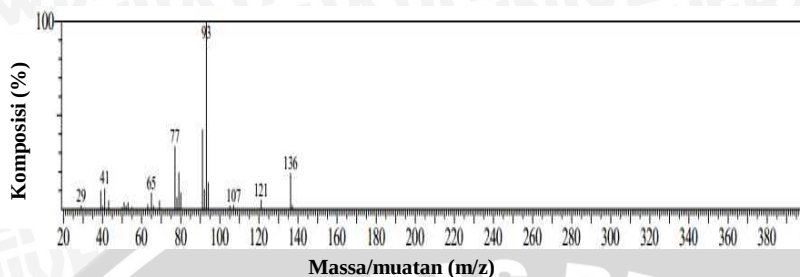
Spektrum massa pada Gambar 4.3.14 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 39, 53, 68, 79, 93, 107, 121, 136. Puncak-puncak yang muncul pada gambar 4.3.14 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi limonen pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.6).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui puncak m/z = 136 akan mengalami pemutusan metil dengan dua jalur pemutusan. Pemutusan pada kedua jalur tersebut akan menghasilkan puncak m/z = 121 dan m/z = 107. Untuk jalur pertama akan mengalami pelepasan metil yang menghasilkan puncak m/z = 93, selanjutnya

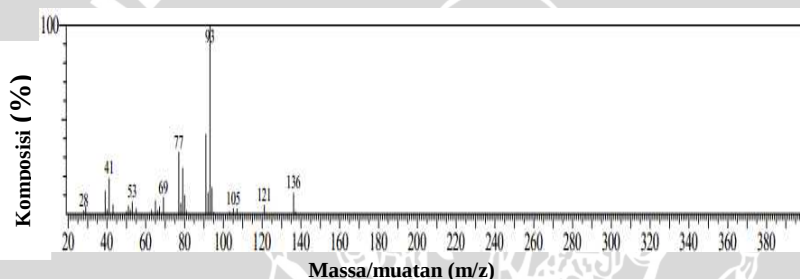
akan mengalami penataan ulang yang menghasilkan puncak $m/z = 53$ dan $m/z = 39$. Untuk jalur kedua akan mengalami pelepasan metil yang menghasilkan puncak $m/z = 107$ dan terbentuk kembali dua jalur pemutusan. Jalur pertama akan mengalami pemutusan C_4H_6 dan dilanjutkan dengan penataan ulang menghasilkan puncak $m/z = 53$, sedangkan untuk jalur kedua akan mengalami pemutusan C_2H_4 yang akan menghasilkan puncak $m/z = 79$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 5,947 menit adalah limonen dengan didukung oleh *library* WILLEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa limonen yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.15.



Gambar 4.3.15 Pola fragmentasi limonen



Gambar 4.3.16 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 6,153 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

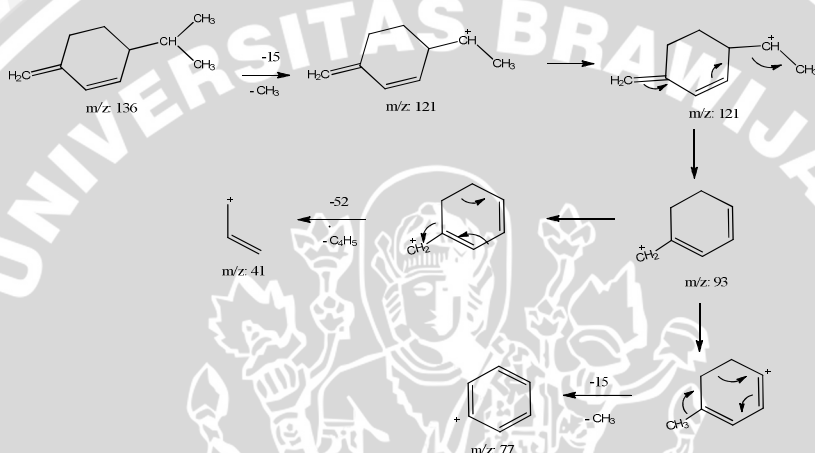


Gambar 4.3.17 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 4,412 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

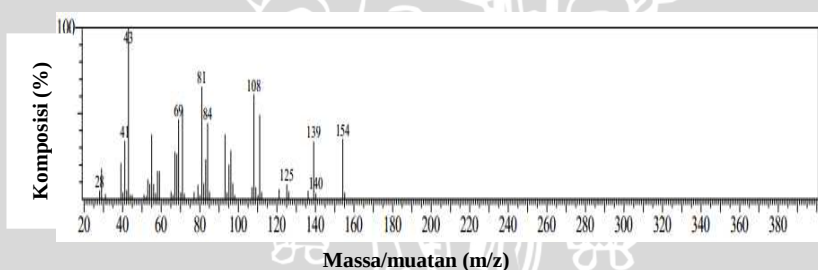
Spektrum massa pada Gambar 4.3.16 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 29, 41, 65, 77, 93, 107, 121, 136. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.16 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi pada Gambar 4.3.17 yang memiliki puncak m/z : 28, 41, 53, 69, 77, 93, 105, 121, 136. Pola fragmentasi tersebut mirip dengan struktur dari senyawa β -pellandren pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.7).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak m/z = 136 akan mengalami pemutusan metil sehingga diperoleh puncak m/z = 121 kemudian mengalami pemutusan C_2H_4 sehingga diperoleh puncak m/z = 93. Kedua puncak tersebut akan mengalami dua jalur pemutusan yaitu dengan penataan ulang diperoleh puncak dengan m/z = 41 dan dengan pemutusan ikatan

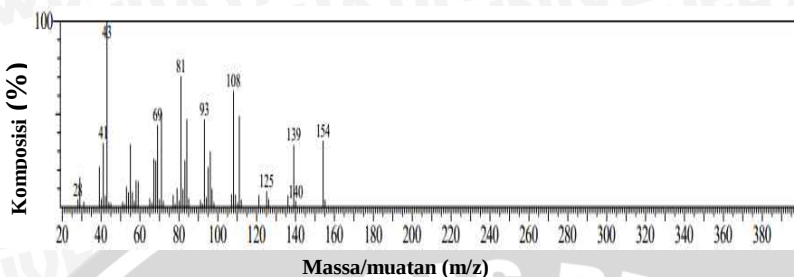
metil diperoleh puncak $m/z = 77$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 6,153 menit untuk minyak tanpa ekstraksi dan 4,412 menit dari minyak hasil ekstraksi adalah β -pellandren dengan didukung oleh *library* WILLEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa β -pellandren yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.18.



Gambar 4.3.18 Pola fragmentasi senyawa β -pellandren



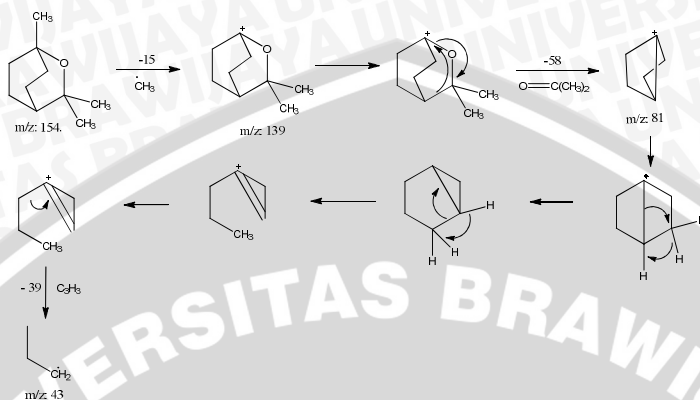
Gambar 4.3.19 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 6,313 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi



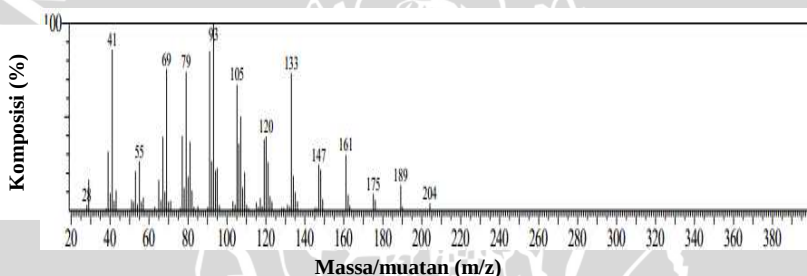
Gambar 4.3.20 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 6,455 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

Spektrum massa pada Gambar 4.3.19 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 43, 69, 81, 93, 108, 125, 139, 140, 154. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.19 memiliki kemiripan dengan Gambar 4.3.20 dengan puncak yang dihasilkan yaitu 28, 41, 43, 69, 81, 84, 108, 125, 139, 140, 154. Pola fragmentasi tersebut mirip dengan pola yang dihasilkan oleh senyawa 1,8-sineol pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.8).

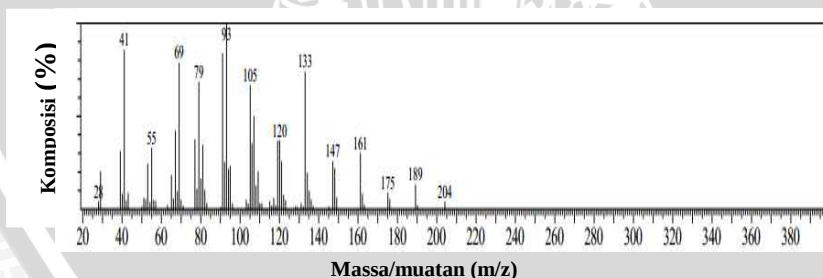
Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 154$ akan mengalami pemutusan metil dan diperoleh puncak $m/z = 139$. Kemudian akan mengalami penataan ulang yang menyebabkan pelepasan $\text{O}=\text{C}(\text{CH}_3)_2$ sehingga diperoleh puncak $m/z = 81$ yang kembali mengalami penataan ulang dan mengalami pemutusan C_3H_3 sehingga diperoleh $m/z = 43$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 6,313 menit untuk minyak hasil tanpa ekstraksi dan 6,455 menit untuk minyak hasil ekstraksi adalah 1,8-sineol dengan didukung oleh library WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa 1,8-sineol yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.21.



Gambar 4.3.21 Pola fragmentasi senyawa 1,8-sineol



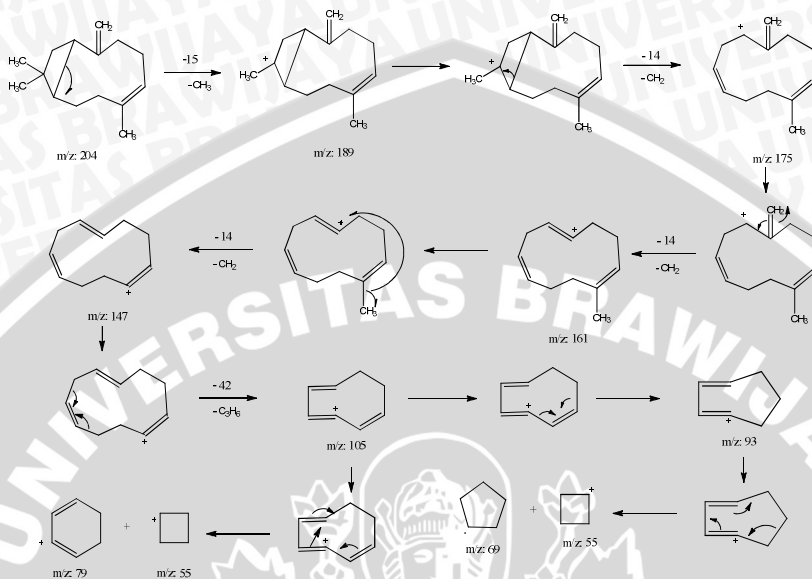
Gambar 4.3.22 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 13,313 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi



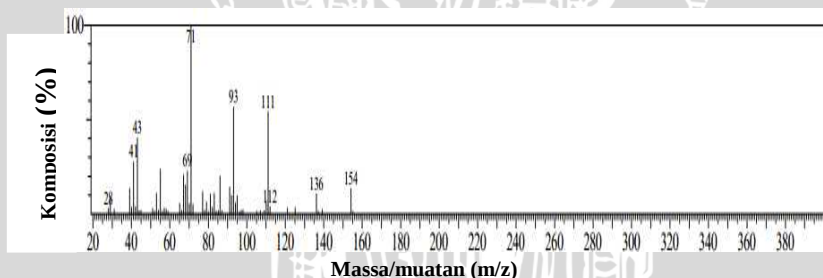
Gambar 4.3.23 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 13,164 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

Spektrum massa pada Gambar 4.3.22 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 55, 69, 79, 105, 120, 133, 147, 161, 175, 189, 204. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.22 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi pada Gambar 4.3.23 dengan puncak m/z = 28, 41, 55, 69, 79, 93, 105, 120, 133, 147, 161, 175, 189, 204. Pola fragmentasi tersebut mirip dengan pola yang dihasilkan oleh senyawa β -kariofilen pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.9).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak m/z = 204 akan mengalami pemutusan metil membentuk puncak m/z = 189. Kemudian mengalami penataan ulang yang menyebabkan ikatan CH_2 terputus tiga kali berturut-turut yang menghasilkan puncak m/z = 175, m/z = 161, dan m/z = 147. Puncak tersebut akan mengalami penataan ulang kembali yang memutuskan ikatan C_3H_6 yang menghasilkan puncak m/z = 105, dari puncak ini akan terjadi dua jalur pemutusan ikatan. Untuk jalur pertama akan mengalami penataan ulang kembali dan dihasilkan puncak m/z = 55 dan m/z = 69, sedangkan untuk jalur kedua akan menghasilkan puncak m/z = 55 dan m/z = 79. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 13,313 menit untuk minyak tanpa ekstraksi dan 13,164 menit merupakan pola yang diperoleh dari struktur β -kariofilen dengan didukung oleh *library* WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa β -kariofilen yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.24.



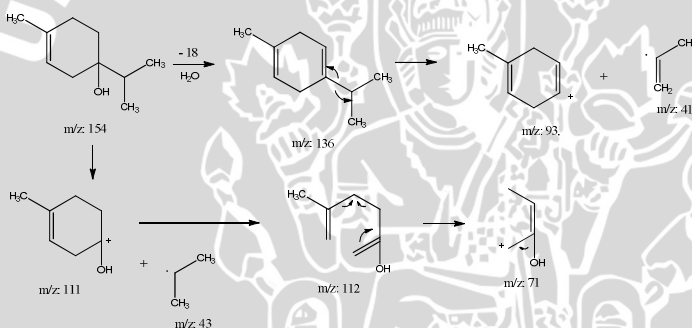
Gambar 4.3.24 Pola fragmentasi senyawa β -kariofilen



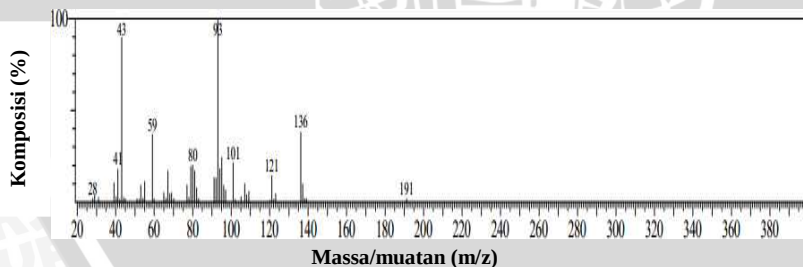
Gambar 4.3.25 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 13,531 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

Spektrum massa pada Gambar 4.3.25 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 43, 69, 78, 93, 111, 112, 136, 154. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.25 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi 4-terpineol pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.10)

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 154$ akan mengalami pemutusan melalui 2 jalur pemutusan. Untuk jalur pertama akan melepaskan H_2O sehingga diperoleh puncak $m/z = 136$ yang selanjutnya akan terbentuk puncak $m/z = 93$ dengan melepaskan C_3H_5 . Untuk jalur kedua akan mengalami pemutusan isopropil sehingga diperoleh puncak $m/z = 111$ dan $m/z = 43$, setelah terjadi pemutusan isopropil dilanjutkan dengan penataan ulang sehingga diperoleh puncak $m/z = 71$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 13,531 menit merupakan pola yang diperoleh dari struktur 4-terpineol dengan didukung oleh *library* WILLEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa 4-terpineol yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.26.



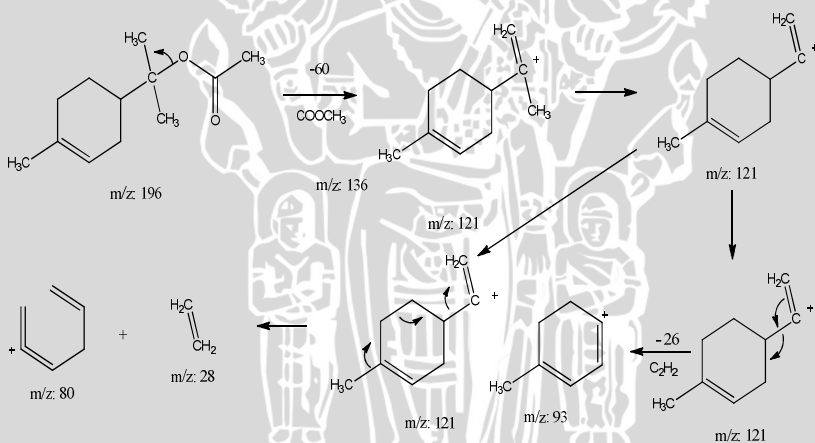
Gambar 4.3.26 Pola fragmentasi senyawa 4-terpineol



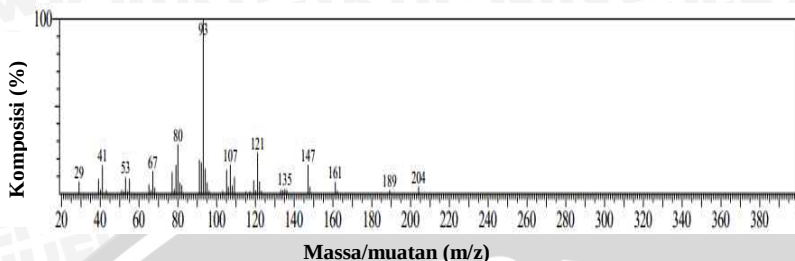
Gambar 4.3.27 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 14,025 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.27 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 43, 59, 80, 93, 101, 121, 136, 191. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.27 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi osimenil asetat pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.11).

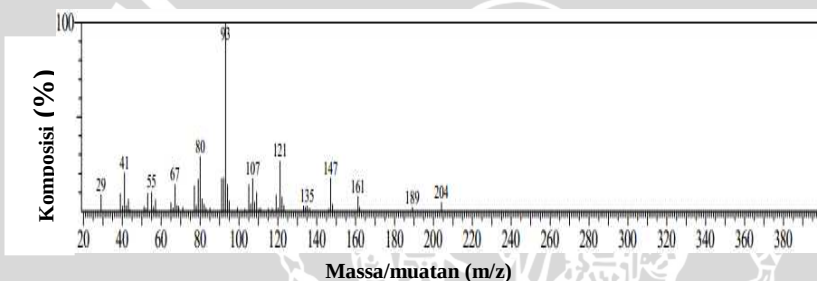
Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 196$ akan mengalami pemutusan COOCH_3 dan menghasilkan puncak $m/z = 136$. Kemudian akan terjadi pemutusan metil dan dihasilkan puncak $m/z = 121$, dari puncak ini akan terjadi dua jalur pemutusan. Jalur pertama akan mengalami pemutusan C_2H_2 menghasilkan puncak $m/z = 93$, sedangkan untuk jalur kedua akan mengalami penataan ulang dan dihasilkan puncak $m/z = 80$ dan $m/z = 28$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 14,025 menit adalah osimenil asetat dengan didukung oleh library WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa osimenil asetat yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.28.



Gambar 4.3.28 Pola fragmentasi senyawa osimenil asetat



Gambar 4.3.29 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 14,193 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

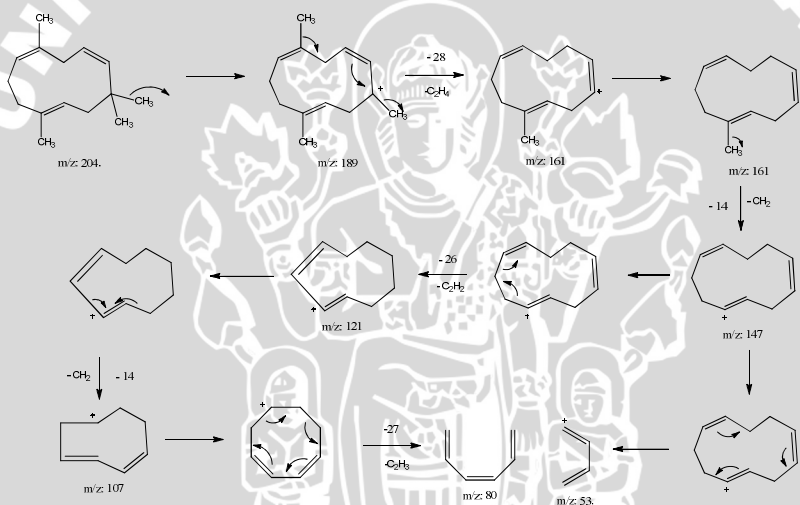


Gambar 4.3.30 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 14,208 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

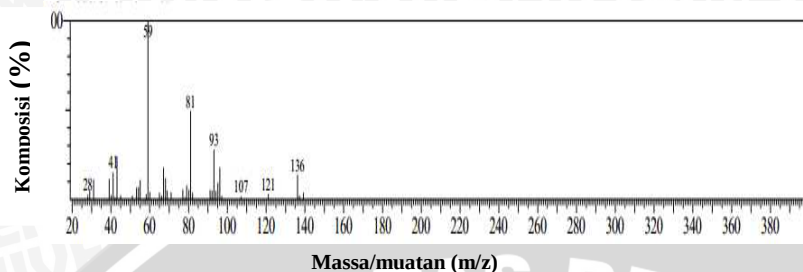
Spektrum massa pada Gambar 4.3.29 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 29, 41, 53, 67, 80, 93, 107, 121, 135, 147, 161, 189, 204. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.29 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi pada Gambar 4.3.30 dengan pola m/z = 29, 41, 55, 67, 80, 93, 107, 121, 135, 147, 161, 189, 204. Pola fragmentasi tersebut mirip dengan α -humulen pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.12).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak m/z = 204 yang kemudian akan mengalami pemutusan ikatan metil dan menghasilkan puncak m/z = 189. Pemutusan tersebut dilanjutkan dengan pemutusan C_2H_4 yang menghasilkan puncak m/z = 161 dan dilanjutkan dengan pemutusan metil yang menghasilkan puncak m/z = 147. Pada puncak m/z = 147 akan terbentuk dua jalur

pemutusan, pada jalur pertama akan menghasilkan puncak $m/z = 53$ sedangkan untuk jalur kedua akan menghasilkan puncak $m/z = 121$ karena terputusnya ikatan C_2H_2 . Kemudian dilanjutkan dengan penataan ulang yang menghasilkan puncak $m/z = 107$ karena terlepasnya CH_2 yang dilanjutkan dengan penataan ulang yang menyebabkan terlepasnya C_2H_3 sehingga diperoleh puncak $m/z = 53$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 14,193 menit untuk minyak tanpa ekstraksi dan 14,208 menit untuk minyak hasil ekstraksi adalah α -humulen dengan didukung oleh *library* WILLEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa α -humulen yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.31.



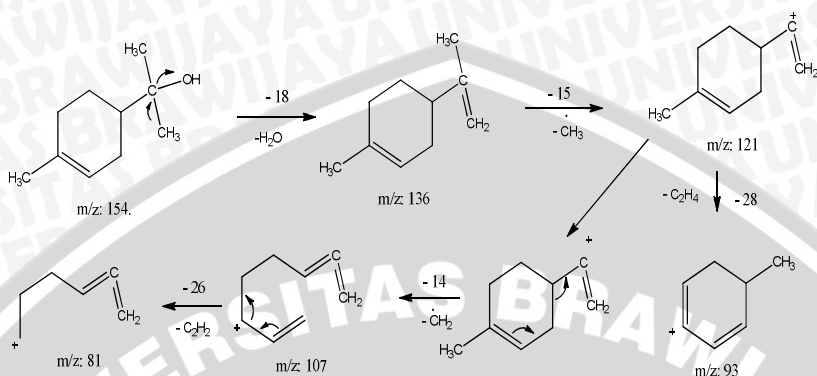
Gambar 4.3.31 Pola fragmentasi senyawa α -humulen



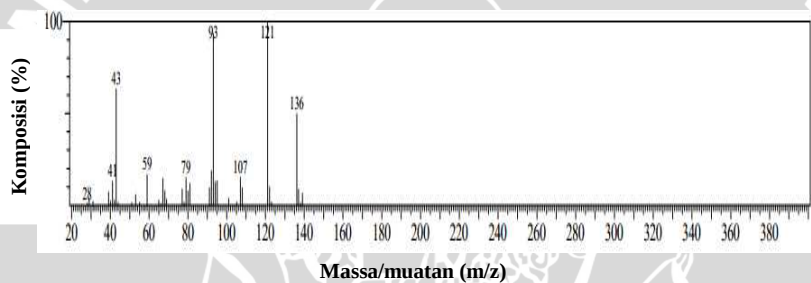
Gambar 4.3.32 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 14,500 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

Spektrum massa pada Gambar 4.3.32 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 59, 81, 93, 107, 121, 136. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.32 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi α -terpineol pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.13).

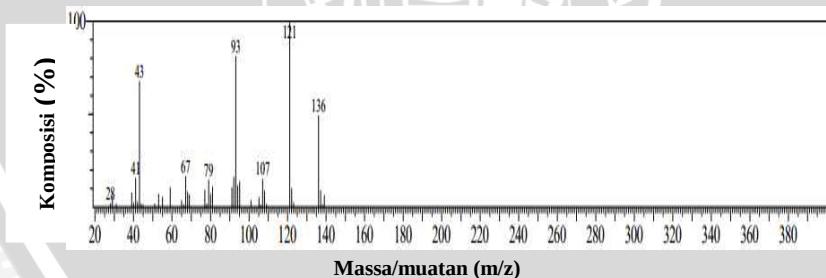
Puncak dengan $m/z = 136$ diperoleh dari pemutusan H_2O kemudian melepaskan metil sehingga diperoleh puncak dengan $m/z = 121$. Puncak tersebut akan mengalami dua jalur pemutusan, pada jalur pertama akan diperoleh puncak $m/z = 93$ dengan memutuskan ikatan C_2H_4 , sedangkan untuk jalur kedua mengalami penataan ulang dan diperoleh puncak $m/z = 107$ yang diperoleh dari pemutusan ikatan CH_3 . Selain itu juga terjadi penataan ulang kembali dengan memutuskan C_2H_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 81$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 14,500 menit adalah α -terpineol dengan didukung oleh *library* WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa α -terpineol yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.33.



Gambar 4.3.33 Pola fragmentasi senyawa α -terpineol



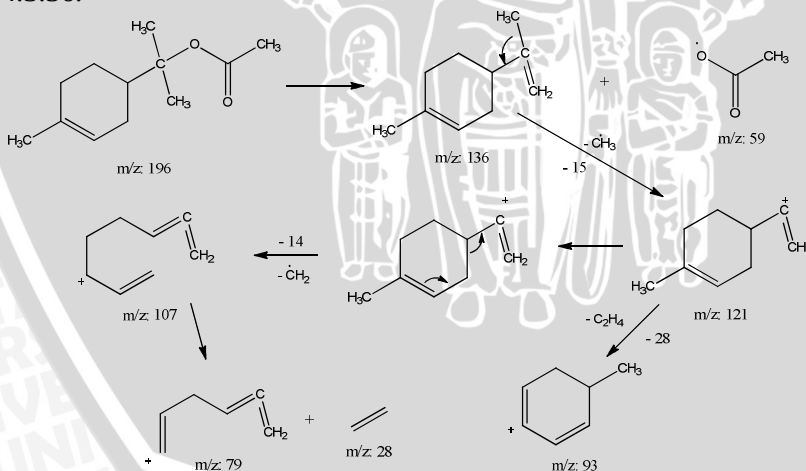
Gambar 4.3.34 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 14,720 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi



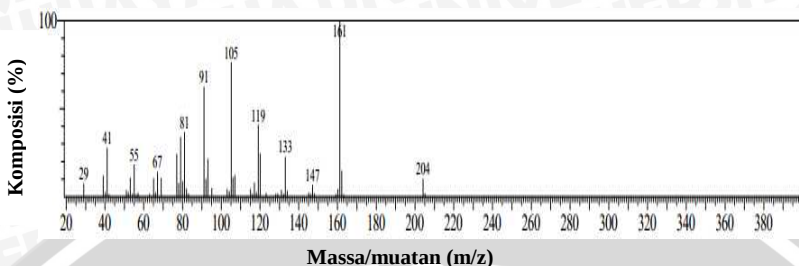
Gambar 4.3.35 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 14,734 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

Spektrum massa pada Gambar 4.3.34 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 59, 79, 93, 107, 121, 136. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.34 memiliki kemiripan dengan pola yang diperoleh pada Gambar 4.3.35 dengan pola fragmentasi 28, 41, 43, 67, 79, 93, 107, 121, 136. Kedua pola tersebut mirip dengan pola fragmentasi α -terpinenil asetat pada pustaka WILEY229.LIB (disajikan lampiran D.14)

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 196$ akan mengalami pemutusan pada gugus asetat radikal sehingga menghasilkan puncak $m/z = 136$ dan $m/z = 59$. Kemudian puncak $m/z = 136$ akan mengalami pemutusan CH_3 yang menghasilkan puncak $m/z = 121$, pada puncak ini akan mengalami pemutusan melalui dua jalur berbeda. Pada jalur pertama akan mengalami pemutusan ikatan C_2H_4 dan menghasilkan puncak $m/z = 93$, sedangkan untuk jalur kedua akan mengalami pemutusan ikatan CH_2 dan menghasilkan puncak $m/z = 79$ dan puncak $m/z = 28$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 14,720 menit untuk minyak tanpa ekstraksi dan 14,734 menit untuk minyak hasil ekstraksi adalah α -terpinenil asetat dengan didukung oleh library WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa α -terpinenil asetat yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.36.



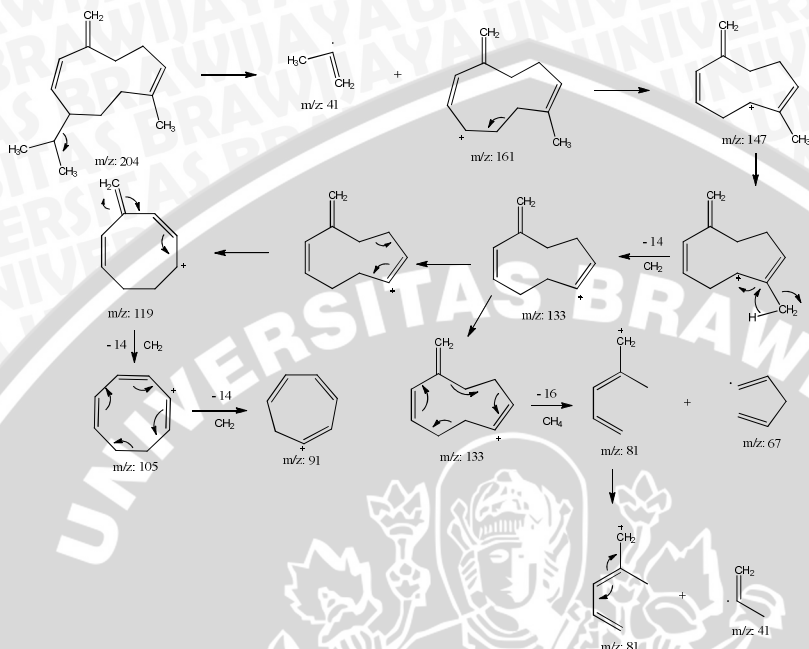
Gambar 4.3.36 Pola fragmentasi senyawa α -terpinenil asetat



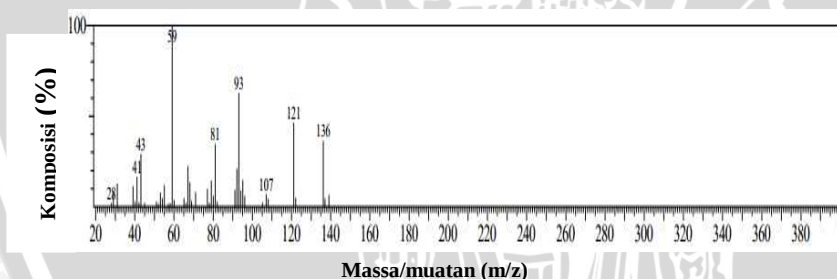
Gambar 4.3.37 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 14,783 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.37 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 29, 41, 55, 67, 81, 91, 105, 119, 133, 147, 161. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.37 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi germakren-d pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.15)

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak m/z = 204 akan mengalami pemutusan C_3H_5 yang menghasilkan puncak m/z = 41 dan m/z = 161. Puncak m/z = 161 akan mengalami CH_2 yang menghasilkan puncak m/z = 147 yang selanjutnya akan mengalami penataan ulang sehingga diperoleh puncak m/z = 133 dengan melepaskan CH_2 . Pada puncak m/z = 133 ini akan terbentuk 2 jalur pemutusan yaitu pada jalur pertama akan mengalami penataan ulang yang menghasilkan perpindahan radikal positif sehingga akan diperoleh puncak m/z = 105 yang diperoleh dari pemutusan CH_2 yang kemudian akan mengalami penataan ulang dan diperoleh puncak m/z = 91. Untuk jalur kedua akan mengalami penataan ulang yang kemudian memutuskan CH_4 dan diperoleh puncak m/z = 81 dan puncak m/z = 67 yang dilanjutkan dengan penataan ulang yang menghasilkan puncak m/z = 81 dan m/z = 41. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 14,783 menit adalah germakren-d dengan didukung oleh library WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa germakren-d yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.38.



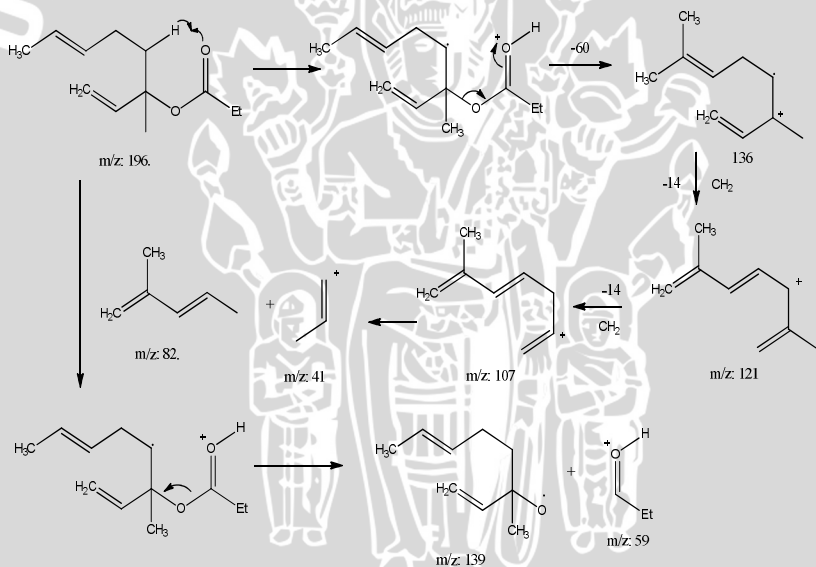
Gambar 4.3.38 Pola fragmentasi senyawa germakren-d



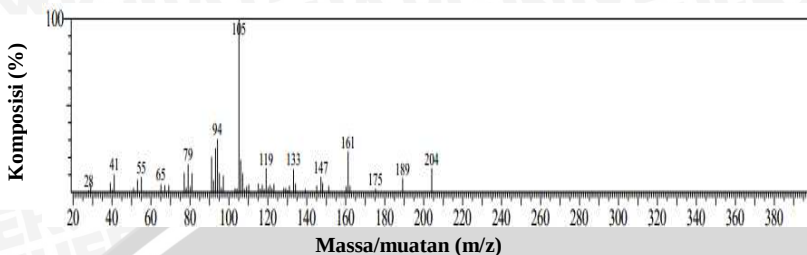
Gambar 4.3.39 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 14,853 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

Spektrum massa pada Gambar 4.3.39 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 43, 59, 81, 93, 107, 121, 136. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.39 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi linalil propionat pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.16).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 196$ akan terbentuk dua jalur pemutusan ikatan dengan penataan ulang. Untuk jalur pertama akan terputus pada ikatan O-H sehingga menghasilkan O radikal dan terbentuk puncak $m/z = 59$, sedangkan untuk jalur kedua akan mengalami penataan ulang kemudian akan terputus ikatan COOEt sehingga diperoleh puncak $m/z = 136$. Selanjutnya terjadi pemutusan CH_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 107$, kemudian dari puncak tersebut akan mengalami penataan ulang kembali sehingga diperoleh puncak $m/z = 41$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 14,853 menit adalah linalil propionat dengan didukung oleh *library WILLEY229.LIB*. Pola fragmentasi senyawa linalil propionat yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.40.



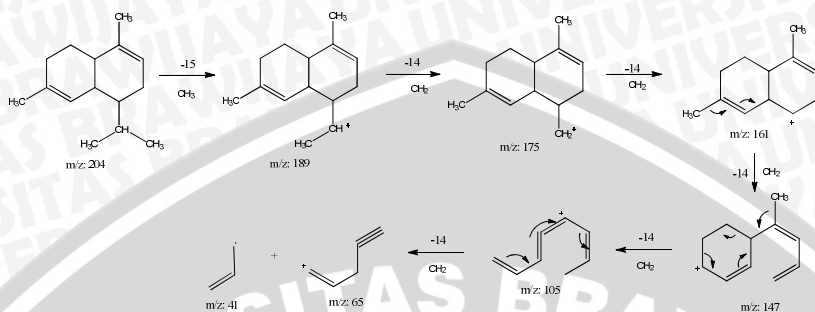
Gambar 4.3.40 Pola fragmentasi senyawa linalil propionat



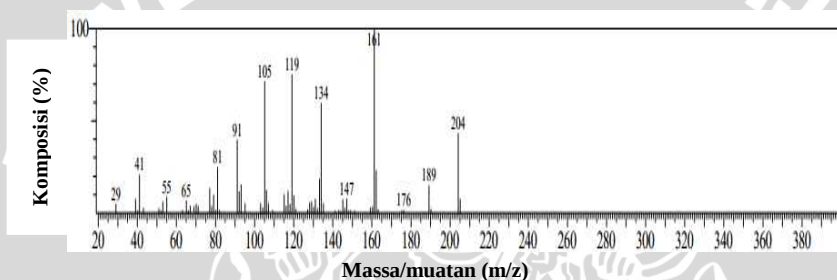
Gambar 4.3.41 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 14.875 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.41 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 55, 65, 79, 94, 105, 119, 133, 147, 161, 175, 189, 204 dengan berat molekul 204. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.41 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi α -muurolen pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.17)

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 204$ akan mengalami pemutusan CH_3 sehingga diperoleh puncak $m/z = 189$ yang kemudian akan melepaskan kembali CH_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 175$. Pada puncak tersebut akan mengalami pemutusan CH_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 161$ kemudian terjadi pemutusan CH_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 147$. Puncak tersebut selanjutnya akan mengalami pelepasan CH_3 yang menghasilkan puncak $m/z = 105$ yang kemudian mengalami penataan ulang sehingga diperoleh puncak $m/z = 65$ dan puncak $m/z = 41$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 14,875 menit adalah α -muurolen dengan didukung oleh library WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa α -muurolen yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.42.



Gambar 4.3.42 Pola fragmentasi senyawa α -muurolen

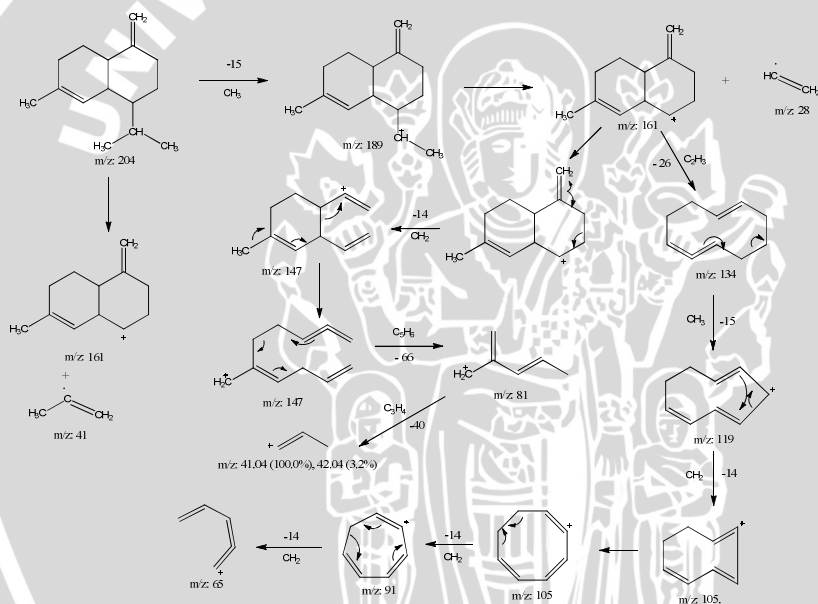


Gambar 4.3.43 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 15,240 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

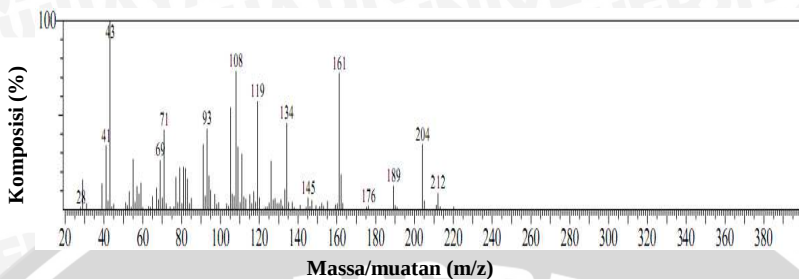
Spektrum massa pada Gambar 4.3.43 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 29, 41, 55, 65, 81, 91, 105, 119, 134, 161, 176, 189, 204. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.43 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi δ -kadinene pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.18)

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak m/z = 204 akan mengalami pemutusan metil yang menghasilkan puncak m/z = 189 yang dilanjutkan dengan pemutusan C_2H_3 radikal yang menghasilkan puncak m/z = 28 dan puncak m/z = 161. Pada puncak m/z = 161 ini akan terbentuk dua jalur pemutusan ikatan. Pada jalur pertama akan dihasilkan m/z = 147 yang diperoleh dari pemutusan CH_2 dilanjutkan dengan penataan ulang yang menyebabkan perpindahan radikal kemudian akan diperoleh puncak m/z = 81 dari pemutusan ikatan C_5H_6 , lalu dari puncak tersebut akan

terjadi pemutusan C_3H_4 dan diperoleh puncak $m/z = 41$. Pada jalur kedua akan diperoleh puncak $m/z = 134$ dari pemutusan ikatan C_2H_3 yang dilanjutkan dengan penataan ulang dan pemutusan ikatan CH_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 105$. Pada puncak tersebut akan mengalami penataan ulang sehingga akan terputus ikatan CH_2 dua kali berturut-turut sehingga diperoleh puncak $m/z = 91$ dan puncak $m/z = 65$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 15,240 menit adalah δ -kadinen dengan didukung oleh *library WILLEY229.LIB*. Pola fragmentasi senyawa δ -kadinen yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.44.



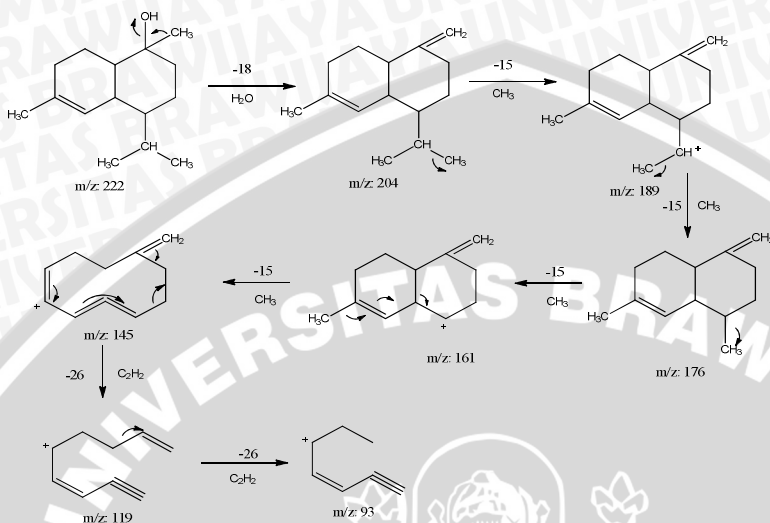
Gambar 4.3.44 Pola fragmentasi senyawa δ -kadinen



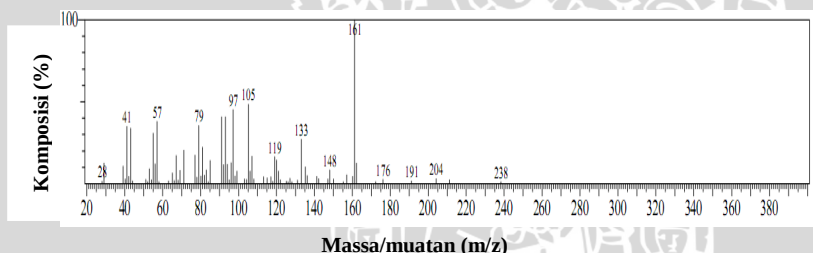
Gambar 4.3.45 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 15,265 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

Spektrum massa pada Gambar 4.3.45 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 43, 69, 71, 108, 119, 134, 145, 161, 176, 189, 204, 212. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.45 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi torreyol pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.19)

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 222$ kehilangan molekul H_2O dan menghasilkan puncak $m/z = 204$, kemudian mengalami pelepasan metil berturut-turut yang menghasilkan puncak $m/z = 189$ dan $m/z = 176$ dari puncak ini kemudian kembali kehilangan metil secara berturut-turut yang menghasilkan puncak $m/z = 161$ dan $m/z = 145$ yang dilanjutkan dengan pemutusan C_2H_2 secara berturut-turut dan menghasilkan puncak $m/z = 119$ dan $m/z = 93$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 15,265 menit adalah torreyol dengan didukung oleh *library* WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa torreyol yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.46



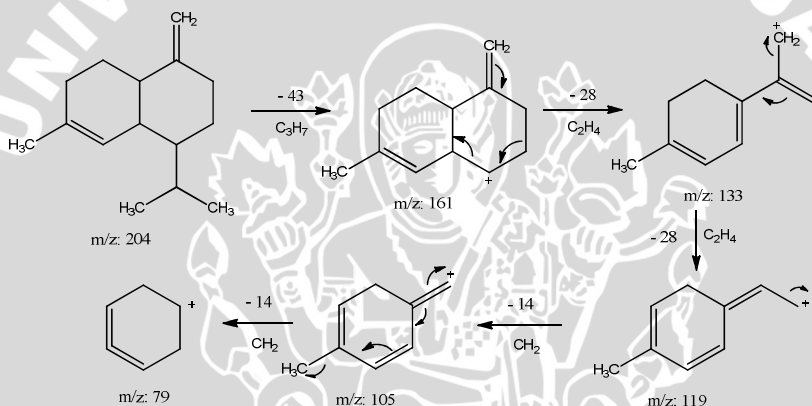
Gambar 4.3.46 Pola fragmentasi senyawa torreyol



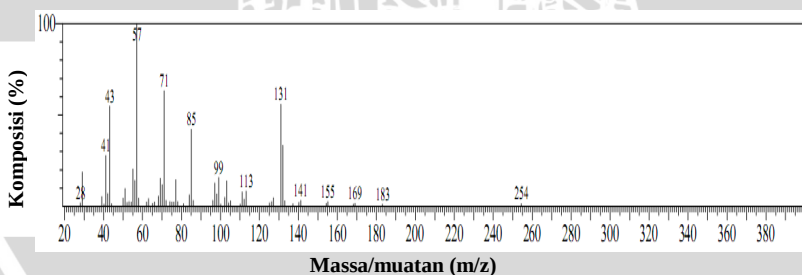
Gambar 4.3.47 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 15,308 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.47 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 57, 79, 97, 105, 119, 133, 148, 161, 176, 191, 204, 238 dengan berat molekul 204. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.47 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi γ -muurolen pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.20).

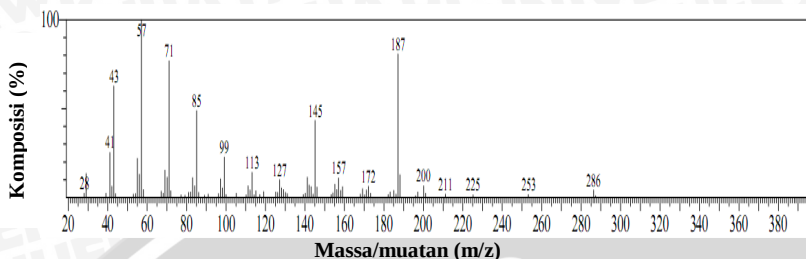
Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 204$ mengalami pemutusan C_3H_7 yang menyebabkan terbentuknya puncak $m/z = 161$ dilanjutkan dengan pemutusan C_2H_4 yang menyebabkan terbentuknya puncak $m/z = 133$, dari puncak tersebut akan mengalami pemutusan CH_2 secara berturut-turut sehingga terbentuk puncak $m/z = 105$ dan $m/z = 79$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 15,308 menit adalah γ -muurolen dengan didukung oleh *library* WILLEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa γ -muurolen yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.48.



Gambar 4.3.48 Pola fragmentasi senyawa γ -muurolen



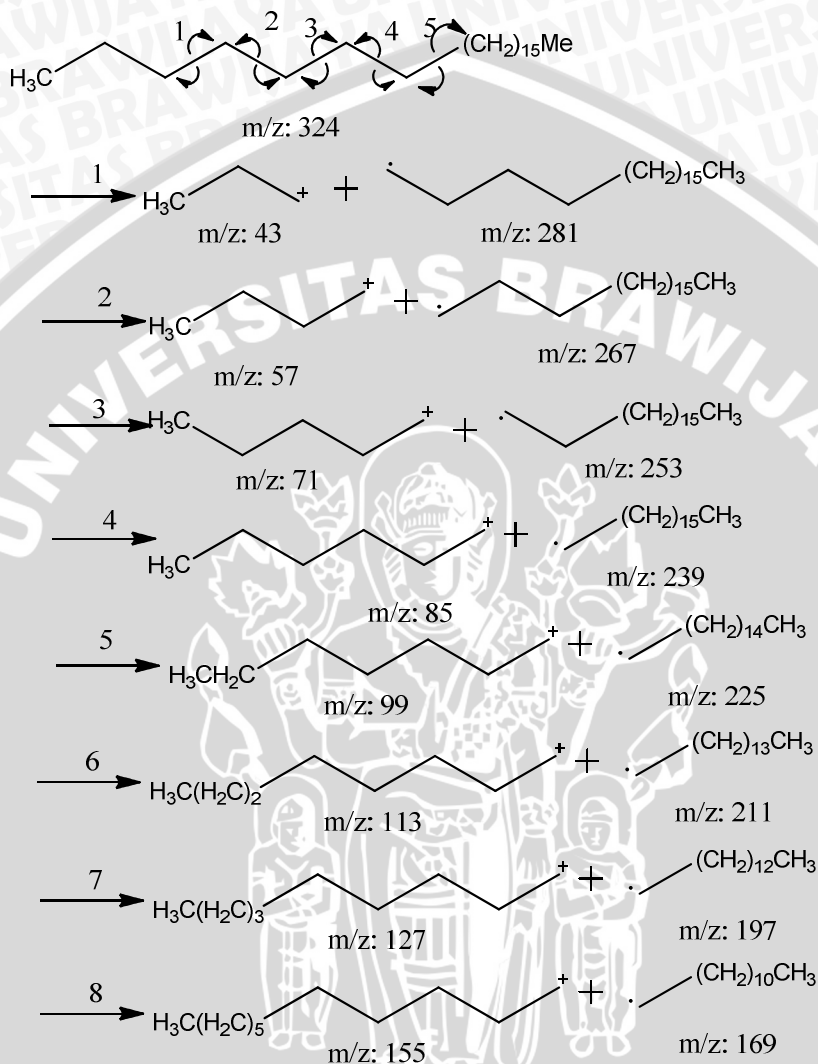
Gambar 4.3.49 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 15,780 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi



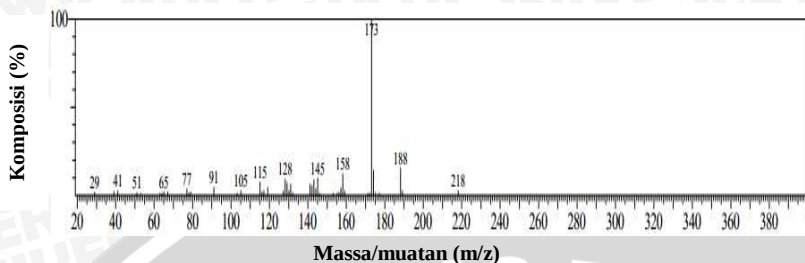
Gambar 4.3.50 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 24,635 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

Spektrum massa pada Gambar 4.3.49 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 57, 71, 85, 99, 113, 131, 141, 155, 169, 183, 254. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.49 memiliki kemiripan dengan pola yang diperoleh pada Gambar 4.3.50 dengan pola fragmentasi 28, 41, 43, 57, 71, 85, 99, 113, 127, 145, 157, 172, 187, 200, 211, 225, 253, 286 Kedua pola tersebut mirip dengan pola fragmentasi trikosan pada pustaka WILEY229.LIB (disajikan lampiran D.21)

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak m/z = 324 pemutusan C_3H_7 sehingga terbentuk puncak m/z = 281 kemudian terjadi pemutusan CH_2 secara berturut-turut yang menghasilkan puncak m/z = 267, 253, 239, 225, 221, 197, 169, 155, 127, 113, 99, 85, 71, 57, 43 Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 15,780 menit untuk minyak atsiri hasil pemisahan dengan gravitasi dan 24,635 menit untuk minyak atsiri hasil ekstraksi lapisan air adalah trikosan dengan didukung oleh library WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa trikosan yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.51



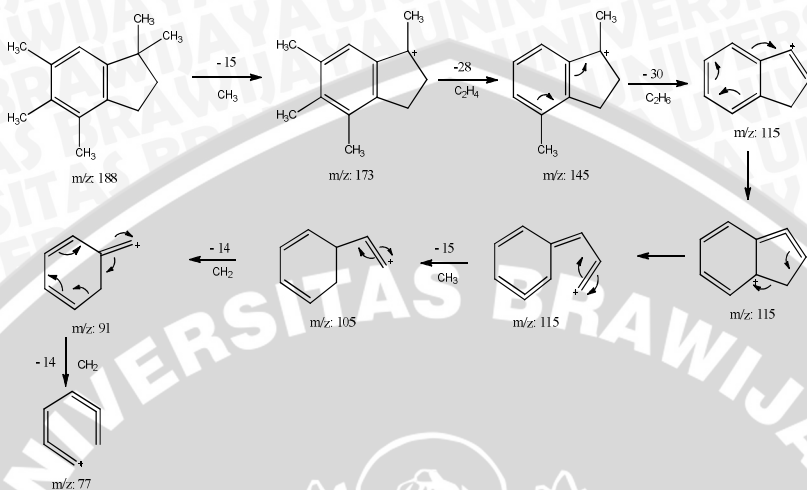
Gambar 4.3.51 Pola fragmentasi senyawa trikosan



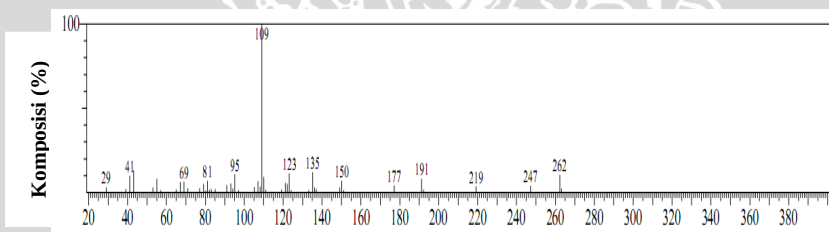
Gambar 4.3.52 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 17,335 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.52 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 29, 41, 51, 65, 77, 91, 105, 115, 128, 145, 158, 173, 188, 218 dengan berat molekul 188. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.52 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi 1,1,4,5,6-pentametil-2,3-dihidroinden pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.22).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 188$ akan mengalami pemutusan ikatan metil sehingga diperoleh puncak dengan $m/z = 173$. Kemudian dilanjutkan dengan terjadinya pemutusan CH_3 dan CH_4 secara berturut-turut sehingga diperoleh puncak $m/z = 115$. Pada puncak tersebut akan terjadi penataan ulang yang menyebabkan terjadinya pemutusan metil dan diperoleh puncak dengan $m/z = 105$ yang dilanjutkan dengan pemutusan ikatan CH_2 secara berturut-turut sehingga diperoleh puncak $m/z = 91$ dan 77. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 17,335 menit adalah 1,1,4,5,6-pentametil-2,3-dihidroinden dengan didukung oleh *library* WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa 1,1,4,5,6-pentametil-2,3-dihidroinden yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.53.



Gambar 4.3.53 Pola fragmentasi senyawa 1,1,4,5,6-pentametil-2,3 dihidroinden

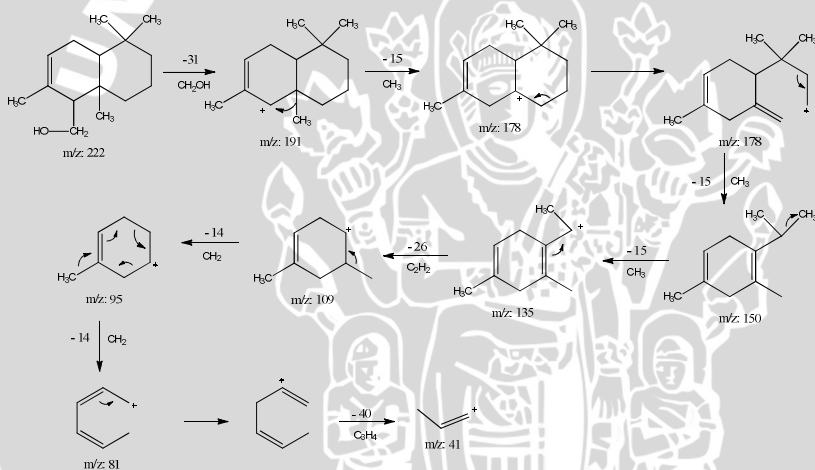


Gambar 4.3.54 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 18,155 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

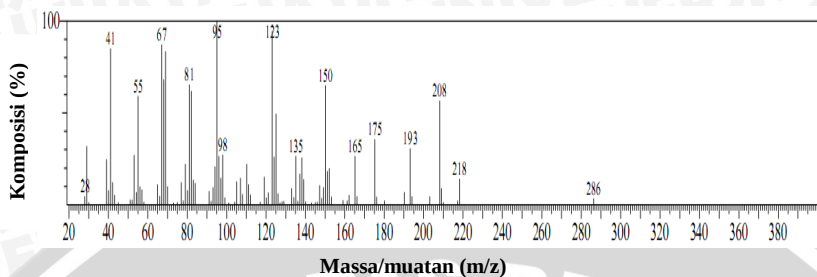
Spektrum massa pada Gambar 4.3.54 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 29, 41, 69, 81, 95, 109, 123, 135, 150, 177, 191, 219, 247, 262. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.54 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi driminol pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.23)

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 222$ terjadi pemutusan ikatan CH_2OH yang menyebabkan terbentuknya puncak $m/z = 191$ dilanjutkan dengan pemutusan ikaan metil sehingga terbentuk puncak $m/z = 178$. Pada

puncak tersebut mengalami penataan ulang diikuti dengan pemutusan ikatan metil secara berturut-turut yang menyebabkan terbentuknya puncak $m/z = 150$, dan $m/z = 135$, dari puncak tersebut mengalami pemutusan ikatan C_2H_2 yang menghasilkan puncak $m/z = 109$. Kemudian dilanjutkan dengan pemutusan ikatan CH_2 secara berturut-turut yang menyebabkan terjadinya puncak $m/z = 95$, $m/z = 81$ dan diikuti dengan penataan ulang sehingga terputusnya ikatan C_3H_4 sehingga terbentuk puncak $m/z = 4$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 18,155 menit adalah driminol dengan didukung oleh *library* WILLEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa driminol yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.55.



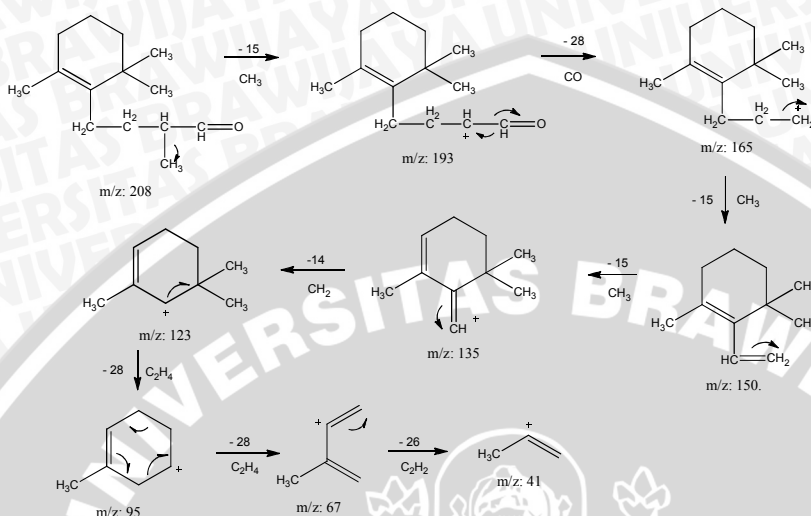
Gambar 4.3.55 Pola fragmentasi senyawa driminol



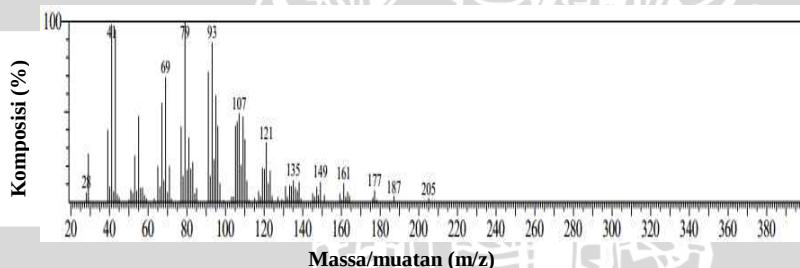
Gambar 4.3.56 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 18,250 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.56 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 55, 67, 81, 95, 98, 123, 135, 150, 165, 175, 193, 208, 218, 286. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.54 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi 1-sikloheksan-1-butanal, $\alpha,2,6,6$ -tetrametil pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.24)

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 286$ akan mengalami pemutusan senyawa yang menghasilkan $m/z = 208$ dan mengalami pemutusan metil dan menghasilkan puncak $m/z = 193$, pada puncak tersebut mengalami pemutusan CO dan menghasilkan puncak $m/z = 165$. Pada puncak tersebut akan mengalami pemutusan metil sehingga menghasilkan puncak $m/z = 135$, kemudian akan mengalami pemutusan CH_2 sehingga menghasilkan puncak dengan $m/z = 123$ pada puncak tersebut akan mengalami pemutusan C_2H_4 secara berturut-turut dan menghasilkan puncak $m/z = 95$ dan puncak $m/z = 67$, dari puncak tersebut kemudian mengalami pemutusan C_2H_2 dan diperoleh puncak $m/z = 41$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 18,250 menit adalah 1-sikloheksan-1-butanal, $\alpha,2,6,6$ -tetrametil dengan didukung oleh library WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa 1-sikloheksan-1-butanal, $\alpha,2,6,6$ -tetrametil yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.57.



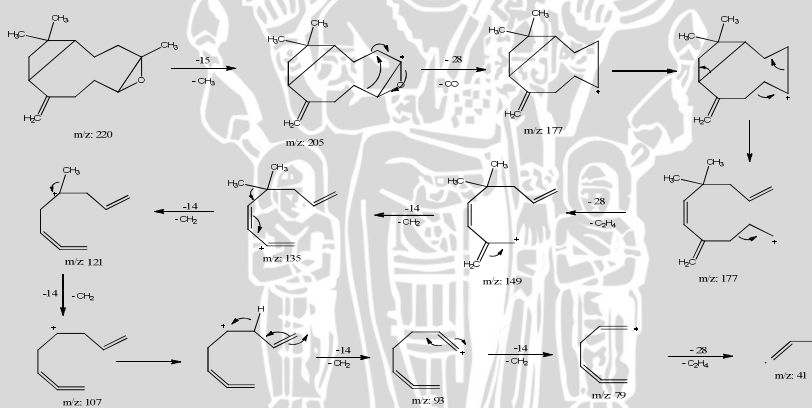
Gambar 4.3.57 Pola fragmentasi senyawa 1-sikloheksan-1 butanal,α,2,6,6-tetrametil



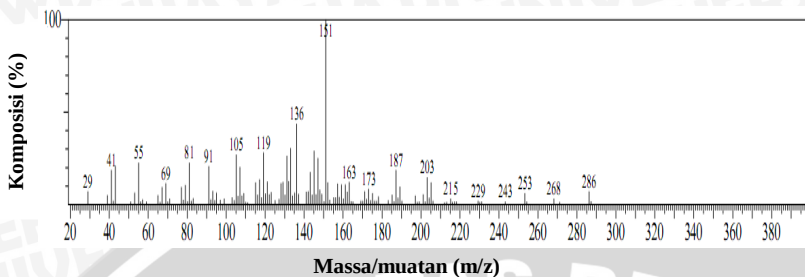
Gambar 4.3.58 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 18,349 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.58 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 69, 79, 93, 107, 121, 135, 149, 161, 177, 187, 205 dengan berat molekul 220. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.58 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi kariofilen oksida pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.25).

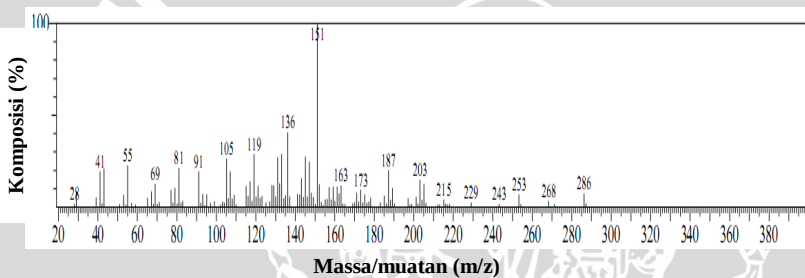
Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 220$ akan terjadi pemutusan ikatan metil sehingga diperoleh puncak $m/z = 205$ yang dilanjutkan dengan pemutusan ikatan CO dan diperoleh puncak dengan $m/z = 177$. Pada puncak tersebut akan mengalami penataan ulang dengan memutuskan satu ikatan tanpa mengurangi jumlah komponen pada puncak tersebut kemudian terjadi pemutusan C_2H_4 yang menghasilkan puncak dengan $m/z = 149$ yang dilanjutkan dengan pemutusan CH_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 135$. Kemudian dari puncak tersebut akan terjadi pemutusan ikatan CH_2 secara berturut-turut dan diperoleh puncak $m/z = 121$, $m/z = 107$, $m/z = 93$, dan $m/z = 79$. Lalu dilanjutkan dengan pemutusan ikatan C_2H_4 yang menghasilkan puncak dengan $m/z = 41$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 18,349 menit adalah kariofilen oksida dengan didukung oleh *library* WILLEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa kariofilen oksida yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.59.



Gambar 4.3.59 Pola fragmentasi senyawa kariofilen oksida



Gambar 4.3.60 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 18,682 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

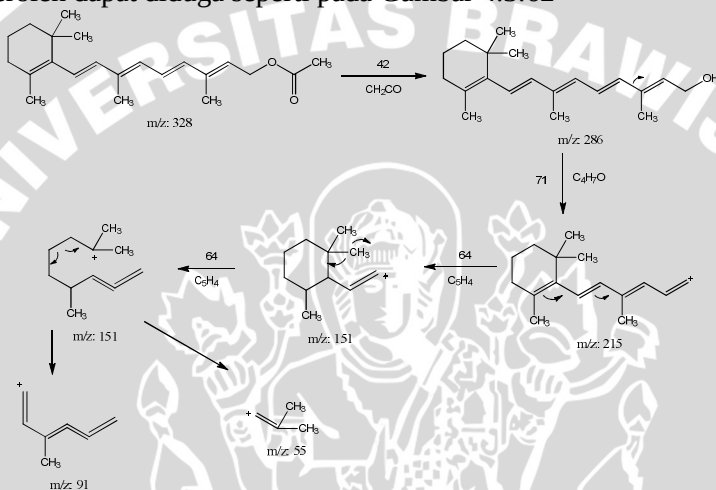


Gambar 4.3.61 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 18,737 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

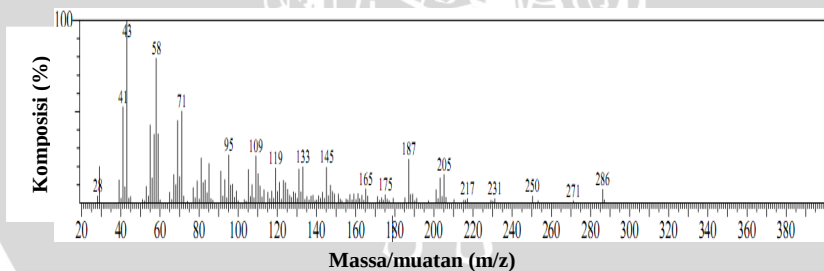
Spektrum massa pada Gambar 4.3.60 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 29, 41, 55, 69, 81, 91, 105, 119, 136, 151, 163, 173, 187, 203, 215, 229, 243, 253, 268, 286. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.60 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi pada Gambar 4.3.61 dengan pola m/z = 28, 41, 55, 69, 81, 91, 105, 119, 136, 151, 163, 173, 187, 203, 215, 229, 243, 253, 268, 286. Pola fragmentasi tersebut mirip dengan retinol asetat pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.26).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak m/z = 286 mengalami pelepasan gugus C_4H_7O sehingga diperoleh puncak m/z = 215 dilanjutkan dengan pelepasan gugus C_5H_4 dan diperoleh puncak m/z = 51 puncak tersebut kemudian

mengalami penataan ulang yang menyebabkan terbentuknya puncak $m/z = 91$ dan $m/z = 55$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 18,682 untuk minyak hasil pemisahan dengan gravitasi dan 18,737 menit untuk minyak hasil ekstraksi lapisan air adalah retinol asetat dengan didukung oleh *library WILLEY229.LIB*. Pola fragmentasi senyawa retinol asetat yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.62



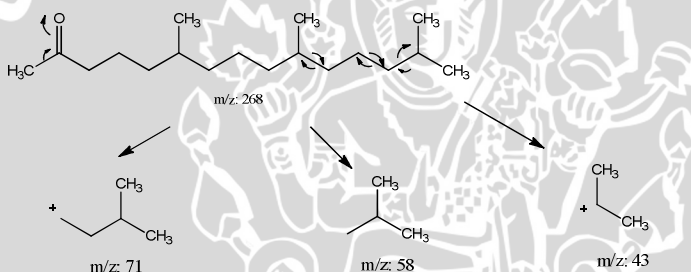
Gambar 4.3.62 Pola fragmentasi senyawa retinol asetat



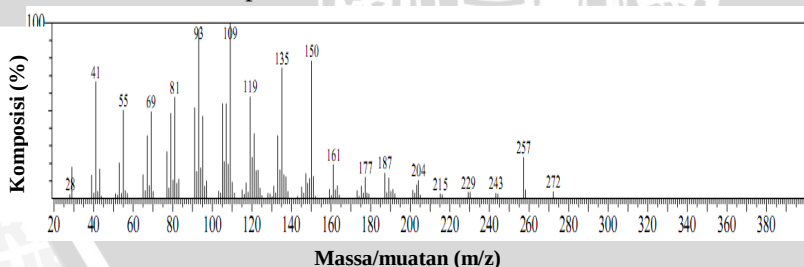
Gambar 4.3.63 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 19,467 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.63 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 43, 58, 71, 95, 109, 119, 133, 145, 165, 175, 187, 205, 217, 231, 250, 271, 286. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.63 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi 6,10,14-Trimethyl-2-pentadecanone pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.27).

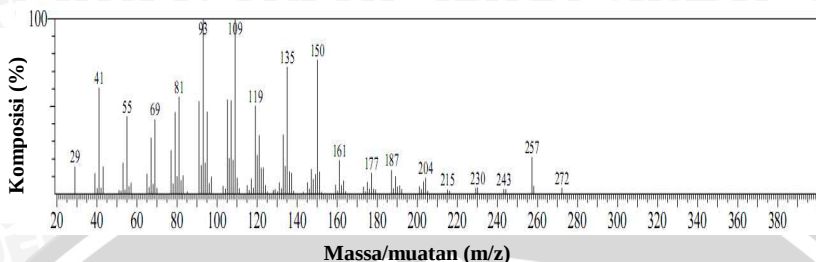
Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 268$ mengalami penataan ulang sehingga diperoleh puncak $m/z = 71$, $m/z = 58$, dan $m/z = 43$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 19,467 adalah 6,10,14-trimetil-2-pentadekanon dengan didukung oleh library WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa 6,10,14-trimetil-2-pentadekanon yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.64



Gambar 4.3.64 Pola fragmentasi senyawa 6,10,14-trimetil-2-pentadekanon



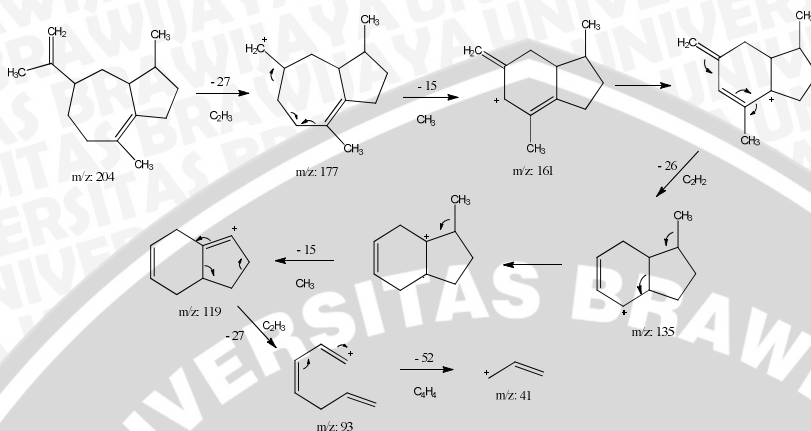
Gambar 4.3.65 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 19,813 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi



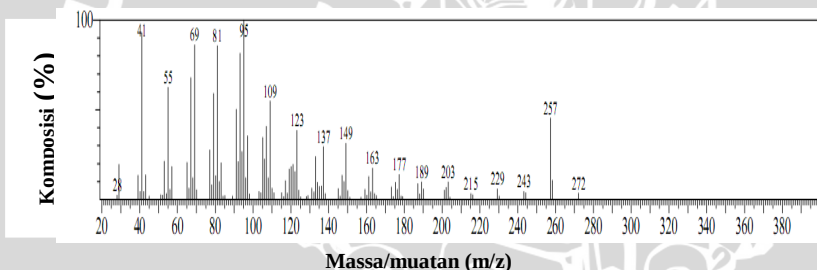
Gambar 4.3.66 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 19,823 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

Spektrum massa pada Gambar 4.3.65 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 55, 69, 81, 93, 109, 119, 135, 150, 161, 177, 187, 204, 215, 229, 243, 257, 272. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.65 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi pada Gambar 4.3.66 dengan pola m/z = 29, 41, 55, 69, 81, 93, 109, 119, 135, 150, 161, 177, 187, 204, 215, 230, 243, 257, 272. Pola fragmentasi tersebut mirip dengan δ -guaien pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.28).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak m/z = 204 mengalami pelepasan C_2H_3 yang menghasilkan puncak m/z = 177. Kemudian akan mengalami pemutusan metil yang menghasilkan puncak m/z = 161, puncak ini akan mengalami penataan ulang dan mengalami pemutusan C_2H_2 dan dihasilkan puncak m/z = 135. Puncak tersebut mengalami penataan ulang yang mengakibatkan terputusnya metil dan menghasilkan puncak m/z = 119, puncak ini akan mengalami penataan ulang sehingga menyebabkan terputusnya ikatan C_4H_4 sehingga diperoleh puncak m/z = 41. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 19,813 menit dan 19,823 menit adalah δ -guaien dengan didukung oleh *library* WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa δ -guaien yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.67.



Gambar 4.3.67 Pola fragmentasi senyawa δ -guaien

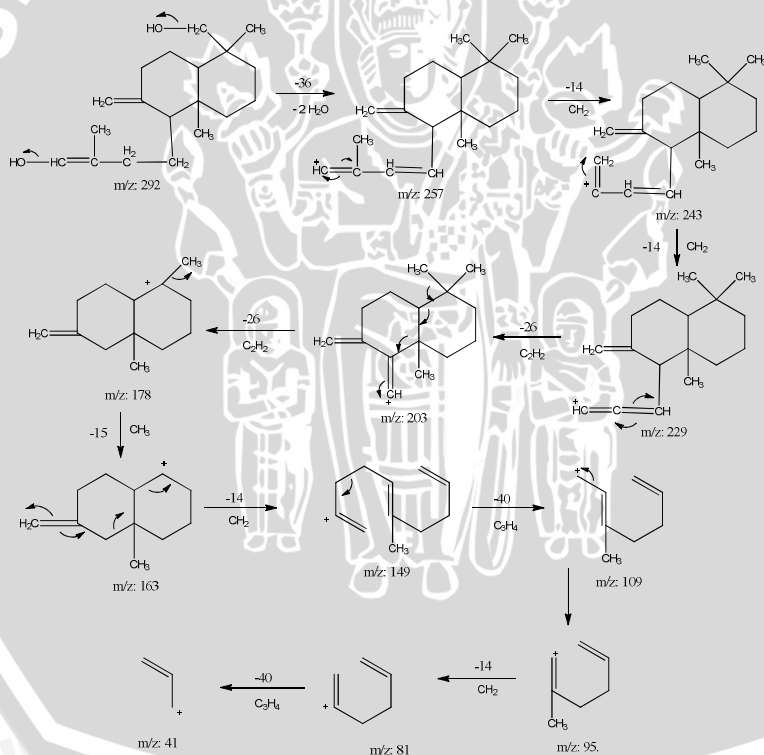


Gambar 4.3.68 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 19,900 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

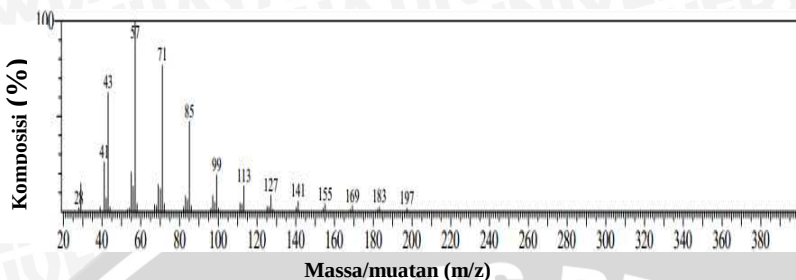
Spektrum massa pada Gambar 4.3.68 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 55, 69, 81, 95, 109, 123, 137, 149, 163, 177, 189, 203, 215, 229, 243, 257, 272. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.68 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi kontortadiol pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.29).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 292$ akan melepaskan 2 molekul H_2O sehingga menghasilkan puncak $m/z = 257$ kemudian melepaskan CH_2

berturut-turut sehingga diperoleh puncak dengan $m/z = 243$ dan $m/z = 229$, dari puncak ini kemudian melepaskan C_2H_2 secara berturut-turut sehingga diperoleh puncak dengan $m/z = 203$ dan $m/z = 178$, kemudian diikuti dengan pelepasan metil dan diperoleh puncak $m/z = 163$, dari puncak tersebut kemudian melepaskan CH_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 149$, setelah itu terjadi pelepasan C_3H_4 sehingga diperoleh puncak $m/z = 109$ yang diikuti dengan pelepasan CH_2 dan di peroleh puncak $m/z = 81$, dari puncak tersebut kemudian terjadi pelepasan C_3H_4 sehingga diperoleh puncak $m/z = 41$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 19,900 menit adalah kontortadiol dengan didukung oleh *library WILLEY229.LIB*. Pola fragmentasi senyawa kontortadiol yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.69.



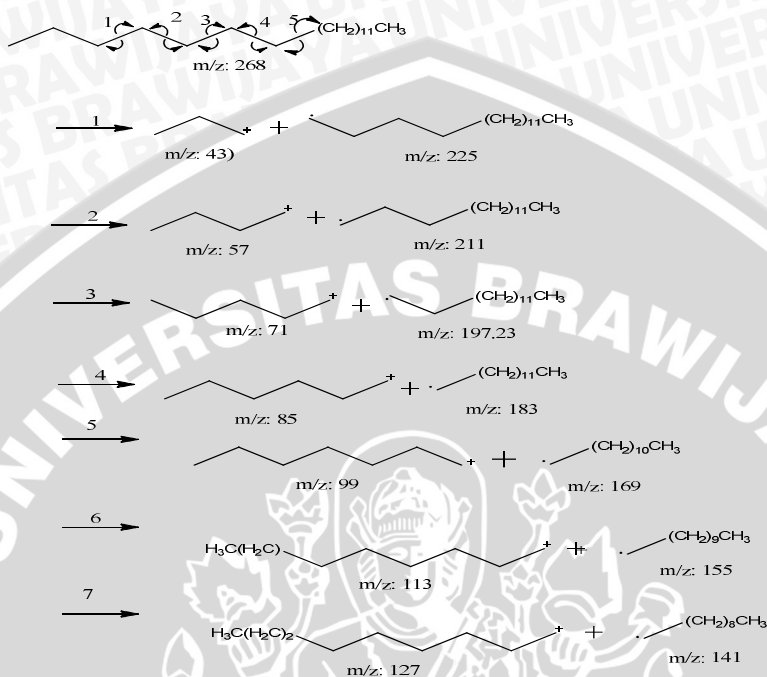
Gambar 4.3.69 Pola fragmentasi senyawa kontortadiol



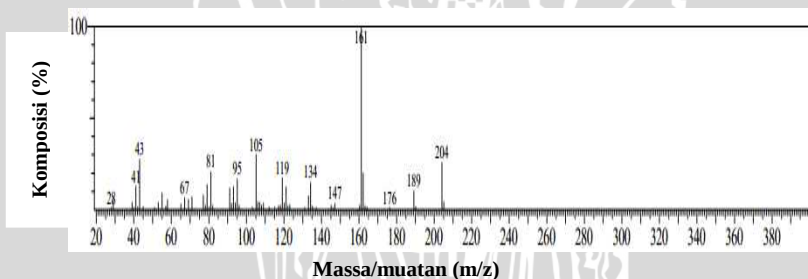
Gambar 4.3.70 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 19,926 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

Spektrum massa pada Gambar 4.3.70 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 43, 57, 71, 85, 99, 113, 127, 141, 155, 169, 183, 197. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.70 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi nonadekan pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.30).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 197$ akan mengalami pemutusan pada rantai CH_2 secara berturut-turut sehingga diperoleh fragmen dengan puncak $m/z = 211$, $m/z = 197$, $m/z = 183$, $m/z = 169$, $m/z = 155$, $m/z = 141$, $m/z = 127$, $m/z = 113$, $m/z = 99$, $m/z = 85$, $m/z = 71$, dan $m/z = 57$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 19,926 menit adalah nonadekan dengan didukung oleh library WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa nonadekan yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.71.



Gambar 4.3.71 Pola fragmentasi nonadekan

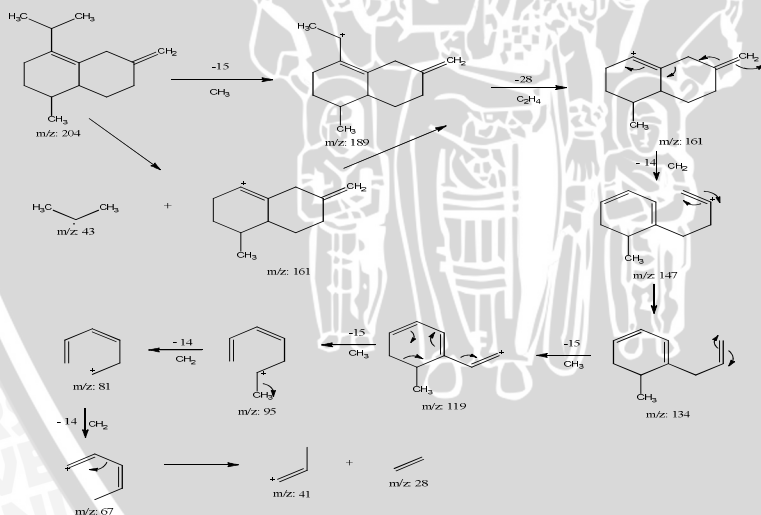


Gambar 4.3.72 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 20,058 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

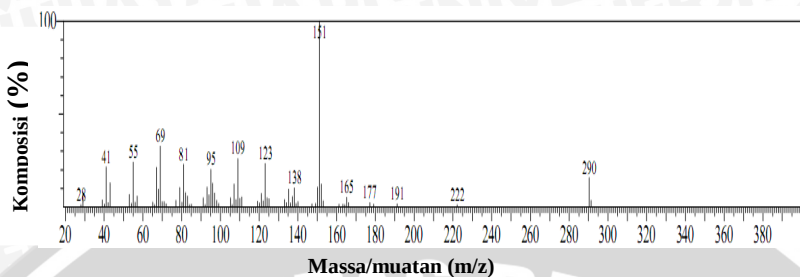
Spektrum massa pada Gambar 4.3.72 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 43, 67, 81, 95, 105, 119, 134, 147, 161, 176, 189, 204 dengan berat molekul 220. Puncak-puncak

yang muncul pada Gambar 4.3.72 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi bisiklo [4.4.0] dec -1-en, 2-isopropil-5-methyl-9-metilene pada pustaka WILEY229.LIB. (lampiran D.31).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 204$ akan terpecah menjadi dua jalur pemutusan. Pada jalur pertama akan terjadi pemutusan C_3H_6 radikal yang menghasilkan puncak $m/z = 43$ dan puncak $m/z = 161$, sedangkan untuk jalur kedua akan mengalami pemutusan C_2H_4 yang akan menghasilkan puncak dengan puncak $m/z = 161$. Kemudian dilanjutkan dengan pemutusan ikatan CH_3 secara terus menerus sehingga diperoleh puncak $m/z = 134$, $m/z = 119$, dan $m/z = 95$. Selanjutnya terjadi pemutusan ikatan CH_2 yang menghasilkan puncak dengan puncak $m/z = 81$ dan $m/z = 67$, kemudian terjadi penataan ulang dan diperoleh puncak dengan $m/z = 41$ dan puncak $m/z = 28$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 20,058 menit adalah bisiklo [4.4.0] dec -1-en, 2-isopropil-5-methyl-9-metilene dengan didukung oleh *library* WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa bisiklo [4.4.0] dec -1-en, 2-isopropil-5-methyl-9-metilene yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.73



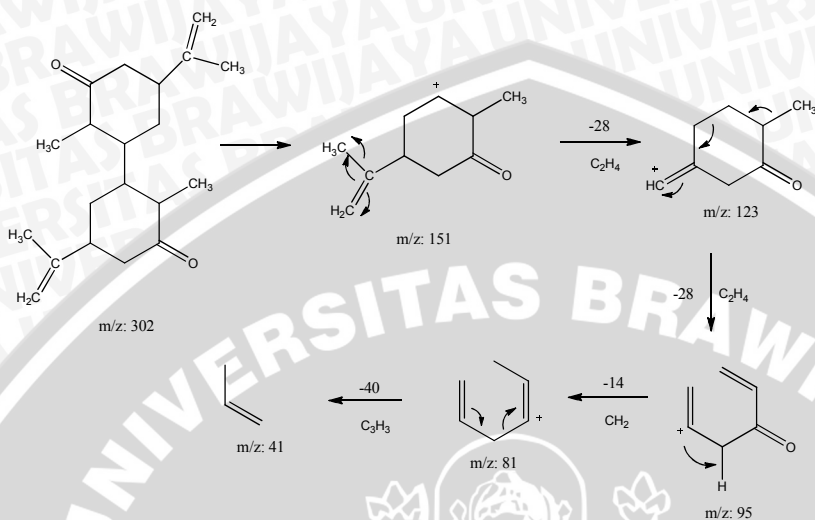
Gambar 4.3.73 Pola fragmentasi bisiklo [4.4.0] dec -1-en, 2-isopropil-5-methyl-9-metilene



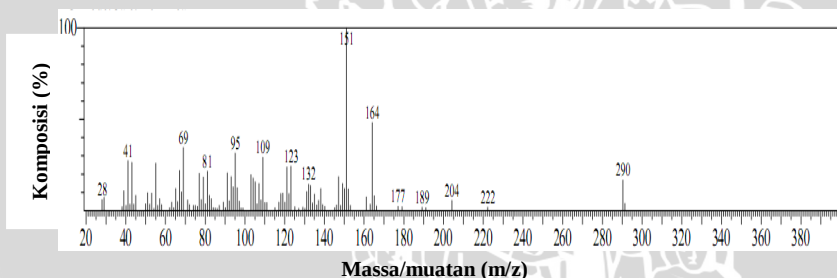
Gambar 4.3.74 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 20,282 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.74 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 55, 69, 81, 95, 109, 123, 138, 151, 165, 177, 191, 222. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.74 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi α -dekarvelon pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.32).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 302$ akan mengalami pemutusan ikatan yang menyebabkan terbentuknya puncak dengan $m/z = 151$ yang dilanjutkan dengan pemutusan C_2H_4 sehingga diperoleh puncak $m/z = 123$, kemudian dari puncak tersebut akan mengalami pelepasan C_2H_4 sehingga diperoleh puncak $m/z = 95$ kemudian terjadi pemutusan CH_2 dan diperoleh puncak $m/z = 81$ dan kemudian dilanjutkan dengan pemutusan ikatan C_3H_3 sehingga diperoleh puncak $m/z = 41$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 20,282 menit adalah bisiklo α -dekarvelon dengan didukung oleh *library* WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa α -dekarvelon yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.75



Gambar 4.3.75 Pola fragmentasi α -dekarvelon

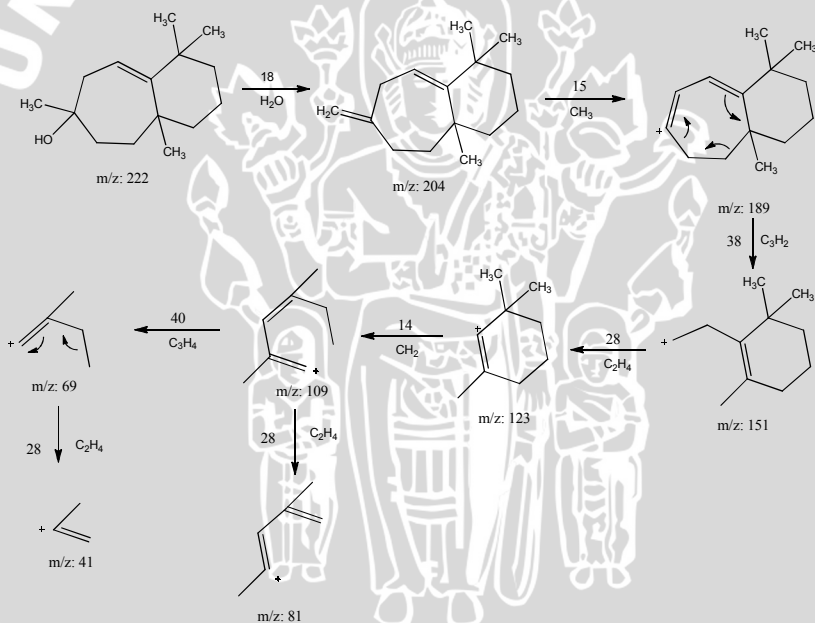


Gambar 4.3.76 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 20,345 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

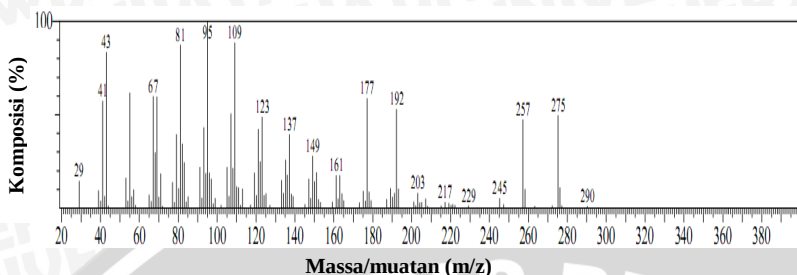
Spektrum massa pada Gambar 4.3.76 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 69, 81, 95, 109, 123, 132, 151, 164, 177, 189, 204, 222, 290. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.74 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi widdrol pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.33).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak m/z = 222 mengalami pelepasan H₂O yang menyebabkan terbentuknya puncak m/z = 204 diikuti dengan pelepasan metil sehingga diperoleh puncak m/z = 108, kemudian terputus ikatan

C_3H_2 yang menghasilkan puncak $m/z = 151$, kemudian mengalami pemutusan C_2H_4 sehingga diperoleh puncak $m/z = 123$, diikuti dengan pemutusan ikatan CH_2 yang menghasilkan puncak $m/z = 109$, dari puncak tersebut mengalami 2 jalur pemutusan, jalur pertama akan mengalami pemutusan ikatan C_3H_4 yang menghasilkan puncak $m/z = 69$ yang diikuti dengan pelepasan C_2H_4 yang menghasilkan puncak $m/z = 41$. Sedangkan jalur kedua mengalami pemutusan ikatan C_2H_4 sehingga diperoleh puncak $m/z = 81$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 20,345 menit adalah widdrol dengan didukung oleh *library* WILLEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa widdrol yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.77



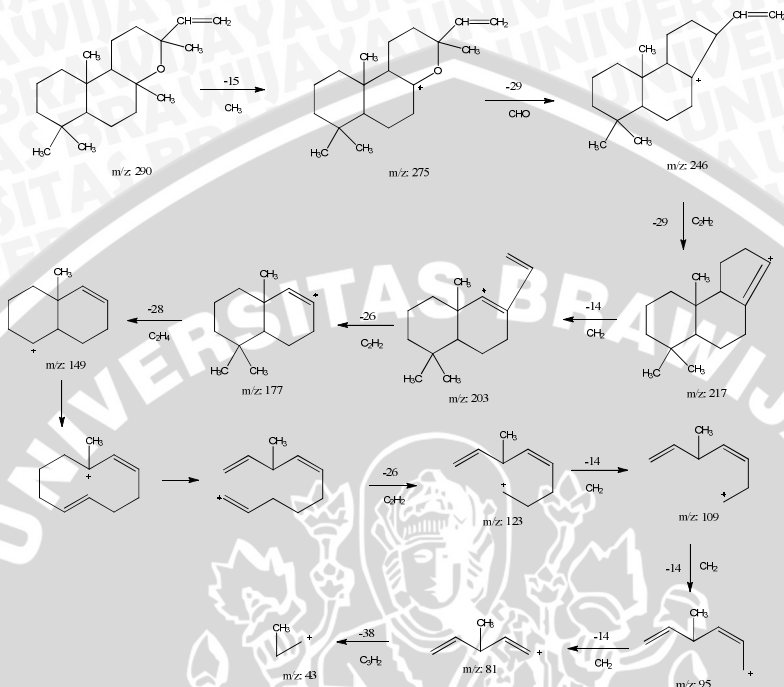
Gambar 4.3.77 Pola fragmentasi widdrol



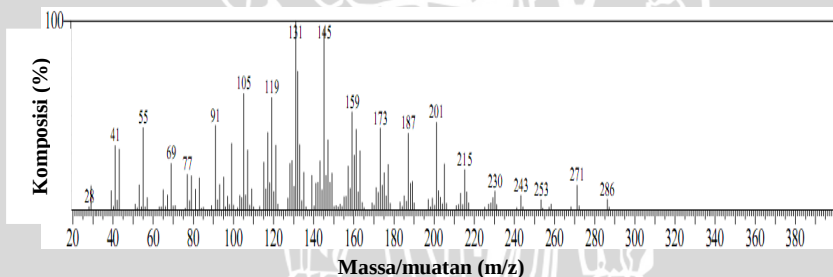
Gambar 4.3.78 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 21,065 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.78 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 29, 41, 43, 67, 81, 95, 109, 123, 137, 149, 161, 177, 192, 203, 217, 229, 245, 257, 275, 290. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.72 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi manoil oksida pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.34).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 290$ mengalami pelepasan metil sehingga diperoleh puncak $m/z = 275$ dilanjutkan dengan pelepasan ikatan pada CHO dan diperoleh puncak $m/z = 246$, pada puncak tersebut mengalami pemutusan ikatan C_2H_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 217$. Pada puncak tersebut mengalami pemutusan ikatan CH_2 dan diperoleh puncak $m/z = 203$, kemudian dilanjutkan dengan pemutusan ikatan C_2H_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 177$, puncak ini kemudian mengalami pemutusan C_2H_4 dan diperoleh puncak $m/z = 149$, pada puncak tersebut mengalami penataan ulang dan diikuti dengan pemutusan C_2H_2 dan diperoleh puncak $m/z = 123$, dari puncak ini akan mengalami pemutusan CH_2 secara berturut-turut dan menghasilkan puncak $m/z = 109$, $m/z = 95$ dan $m/z = 81$, kemudian dilanjutkan dengan pemutusan ikatan C_3H_2 dan diperoleh puncak $m/z = 41$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 21,065 menit adalah manoil oksida dengan didukung oleh library WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa manoil oksida yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.79



Gambar 4.3.79 Pola fragmentasi manoil oksida

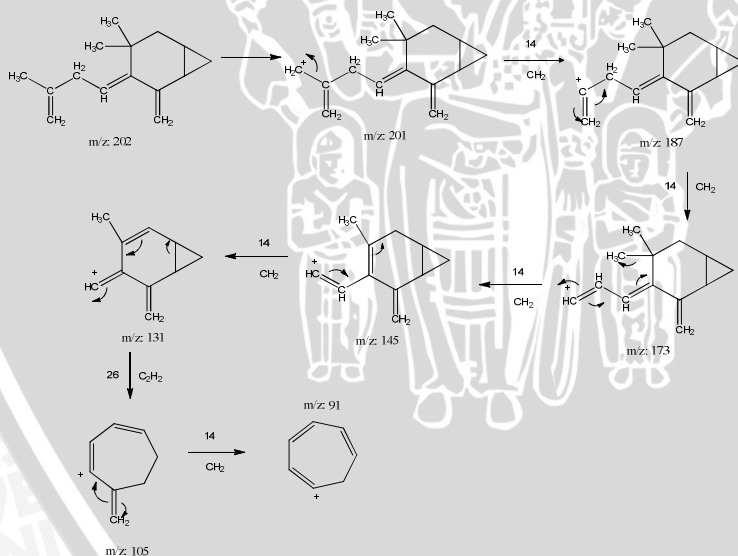


Gambar 4.3.80 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 21,154 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

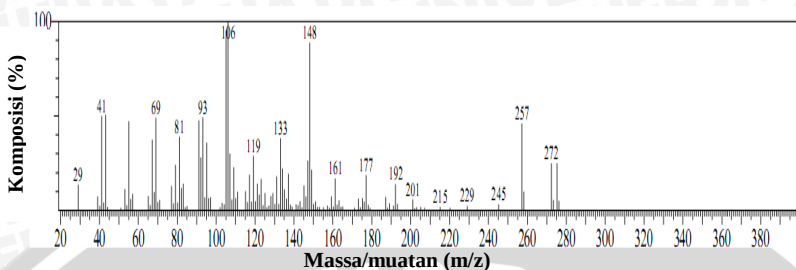
Spektrum massa pada Gambar 4.3.80 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 55, 69, 77, 91, 105, 119, 131,

145, 159, 173, 187, 201, 215, 230, 243, 253, 271, 286. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.80 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi 4,4-dimetil-3-(3-metil-3-buten-1-yliden)-2-metilidenbisiklo[4.1.0]heptan pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.35).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 201$ mengalami pelepasan CH_2 secara berturut-turut sehingga diperoleh puncak $m/z = 187$, $m/z = 173$, $m/z = 145$, dan $m/z = 131$, kemudian mengalami pemutusan C_2H_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 106$ dan dilanjutkan dengan pelepasan CH_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 91$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 21,154 menit adalah 4,4-dimetil-3-(3-metil-3-buten-1-yliden)-2-metilidenbisiklo [4.1.0] heptan dengan didukung oleh *library* WILLEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa 4,4-dimetil-3-(3-metil-3-buten-1-yliden)-2-metilidenbisiklo [4.1.0] heptan yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.81



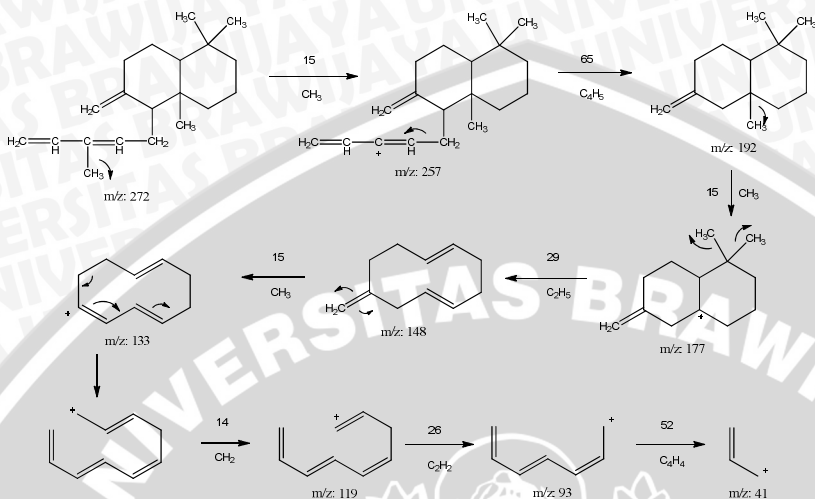
Gambar 4.3.81 Pola fragmentasi 4,4-dimetil-3-(3-metil-3-buten-1-yliden)-2-metilidenbisiklo [4.1.0] heptan



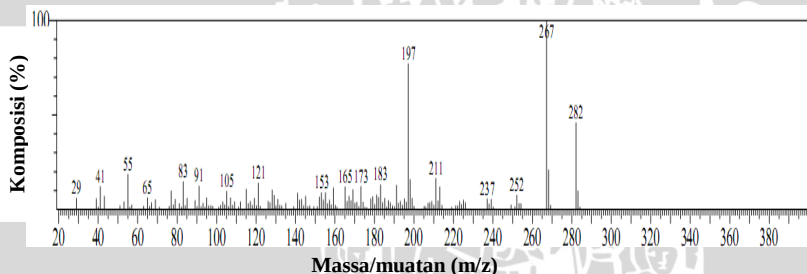
Gambar 4.3.82 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 21,914 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.82 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 29, 41, 69, 81, 93, 106, 119, 133, 148, 161, 177, 192, 201, 215, 229, 245, 257, 272. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.82 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi biformen pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.36).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 272$ mengalami pemutusan ikatan metil sehingga diperoleh puncak $m/z = 192$, kemudian puncak tersebut mengalami pemutusan ikatan C_4H_5 sehingga diperoleh puncak $m/z = 177$, puncak ini kemudian mengalami pelepasan metil sehingga diperoleh puncak $m/z = 148$ yang diikuti dengan pelepasan metil sehingga diperoleh puncak $m/z = 133$, pada puncak ini kemudian melakukan penataan ulang sehingga terjadi pelepasan CH_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 119$ kemudian puncak tersebut mengalami pemutusan C_2H_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 93$ yang diikuti dengan pelepasan C_4H_4 sehingga diperoleh puncak $m/z = 41$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 21,914 menit adalah biformen dengan didukung oleh library WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa biformen yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.83



Gambar 4.3.83 Pola fragmentasi biformen

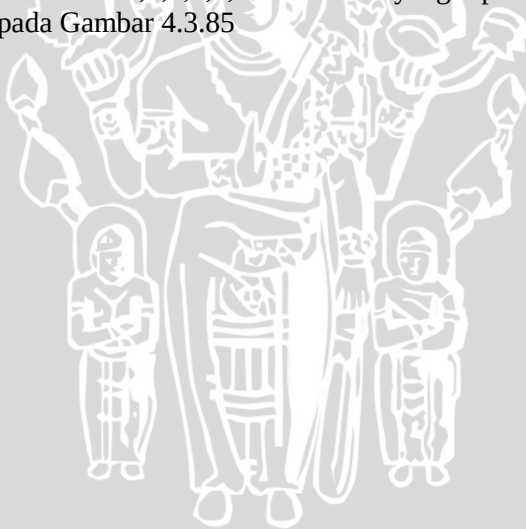


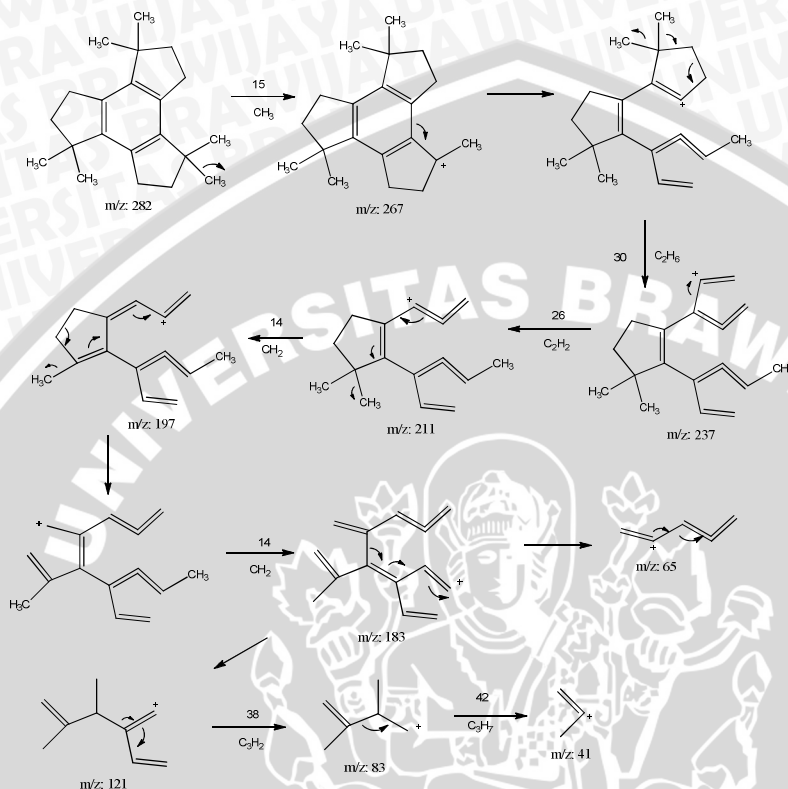
Gambar 4.3.84 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 22,734 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.84 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 29, 41, 55, 65, 83, 91, 105, 121, 153, 165, 173, 183, 197, 211, 237, 252, 267, 282. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.84 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi 2,3,4,5,6,7,8,9-oktahidro-1,1,4,4,7,7-heksametil pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.37).

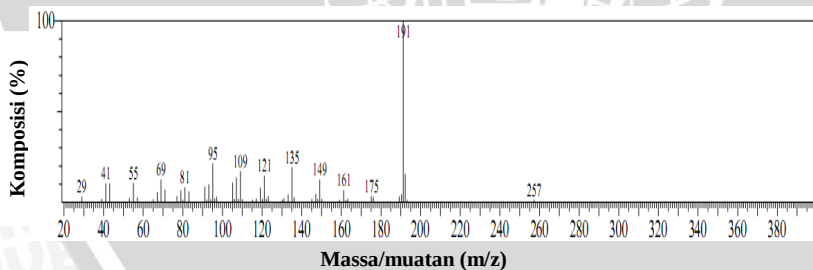
Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 282$ mengalami pemutusan ikatan metil sehingga

diperoleh puncak $m/z = 267$ kemudian dilanjutkan dengan penataan ulang yang mengakibatkan terputusnya ikatan C_2H_6 sehingga diperoleh puncak $m/z = 237$, puncak tersebut kemudian mengalami pemutusan ikatan C_2H_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 121$, dari puncak tersebut kemudian mengalami pemutusan ikatan CH_4 secara berturut-turut sehingga diperoleh puncak $m/z = 197$ dan $m/z = 186$, pada puncak tersebut kemudian terjadi penataan ulang sehingga diperoleh dua jalur pemutusan, jalur pertama akan menghasilkan puncak $m/z = 65$, sedangkan untuk jalur kedua terbentuk puncak $m/z = 121$, kemudian dari puncak tersebut mengalami pemutusan ikatan C_2H_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 83$ diikuti dengan pelapasan ikatan C_3H_7 sehingga diperoleh puncak $m/z = 41$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 22,734 menit adalah 2,3,4,5,6,7,8,9-oktahidro-1,1,4,4,7,7-heksametil dengan didukung oleh *library* WILLEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa 2,3,4,5,6,7,8,9-oktahidro-1,1,4,4,7,7-heksametil yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.85





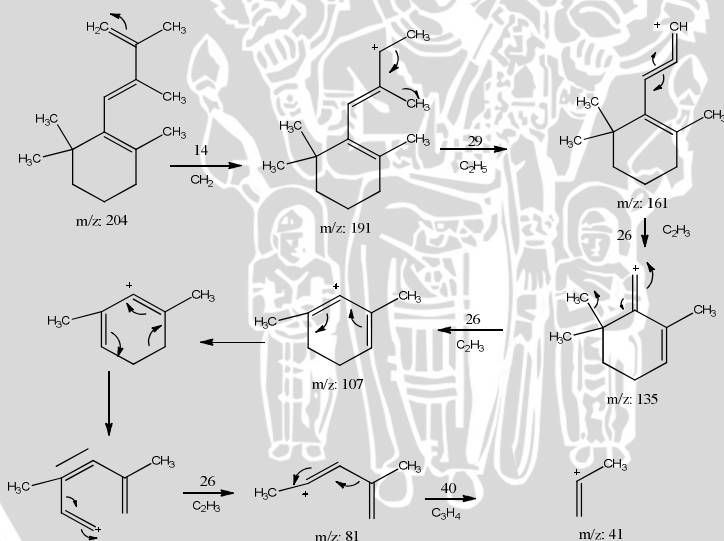
Gambar 4.3.85 Pola fragmentasi 2,3,4,5,6,7,8,9-oktahidro-1,1,4,4,7,7-heksametil



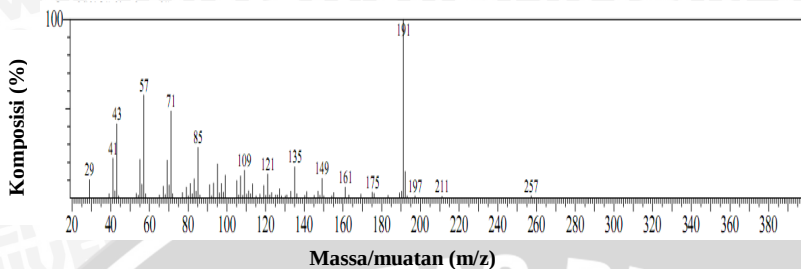
Gambar 4.3.86 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 23,076 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.86 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 29, 41, 55, 69, 81, 95, 109, 121, 135, 149, 161, 175, 191, 257. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.86 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi β -isometil ionon pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.32).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 191$ mengalami pelepasan gugus C_2H_5 sehingga diperoleh puncak $m/z = 161$ dilanjutkan dengan pelepasan gugus C_2H_3 secara berturut-turut sehingga diperoleh puncak $m/z = 135$, $m/z = 107$ dan $m/z = 81$ kemudian diikuti dengan pelepasan C_3H_4 sehingga diperoleh puncak $m/z = 41$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 23,076 menit adalah β -isometil ionon dengan didukung oleh *library* WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa β -isometil ionon yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.87.



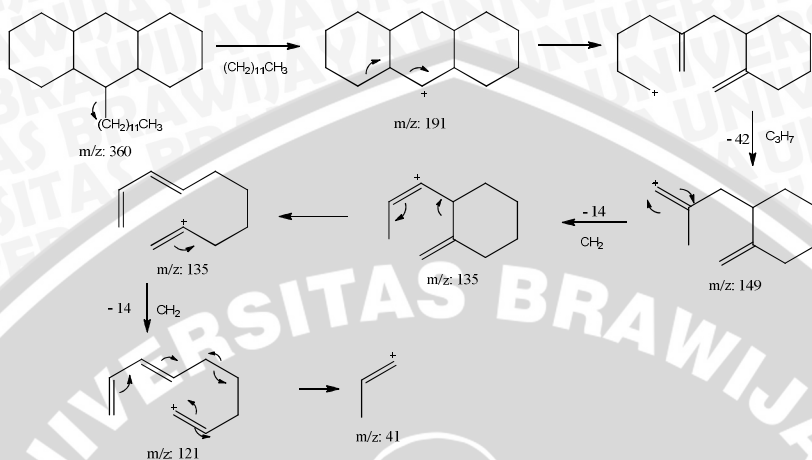
Gambar 4.3.87 Pola fragmentasi β -isometil ionon



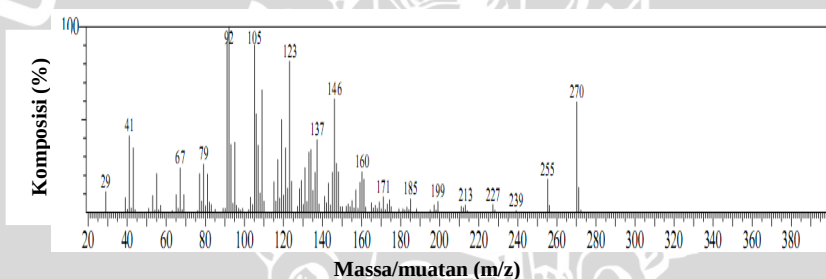
Gambar 4.3.88 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 23,165 menit minyak hasil ekstraksi lapisan air

Spektrum massa pada Gambar 4.3.86 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 39, 41, 67, 81, 95, 109, 121, 135, 149, 177, 191, 264, 303, 360. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.86 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi antraken, 9-dodeksiltetradekahidro pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.39).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 360$ mengalami pemutusan ikatan $(CH_2)_{11}CH_3$ sehingga diperoleh puncak $m/z = 191$ kemudian dilanjutkan dengan penataan ulang sehingga terjadi pemutusan ikatan C_3H_7 sehingga diperoleh puncak $m/z = 149$, puncak tersebut kemudian mengalami pemutusan ikatan CH_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 135$ dan diikuti dengan penataan ulang yang mengakibatkan putusnya CH_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 121$, puncak tersebut kemudian melakukan penataan ulang kembali sehingga diperoleh puncak $m/z = 41$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 23,165 menit adalah antraken, 9-dodeksiltetradekahidro dengan didukung oleh *library* WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa antraken, 9-dodeksiltetradekahidro yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.89.



Gambar 4.3.89 Pola fragmentasi antraken, 9-dodeksiltetradekahidro

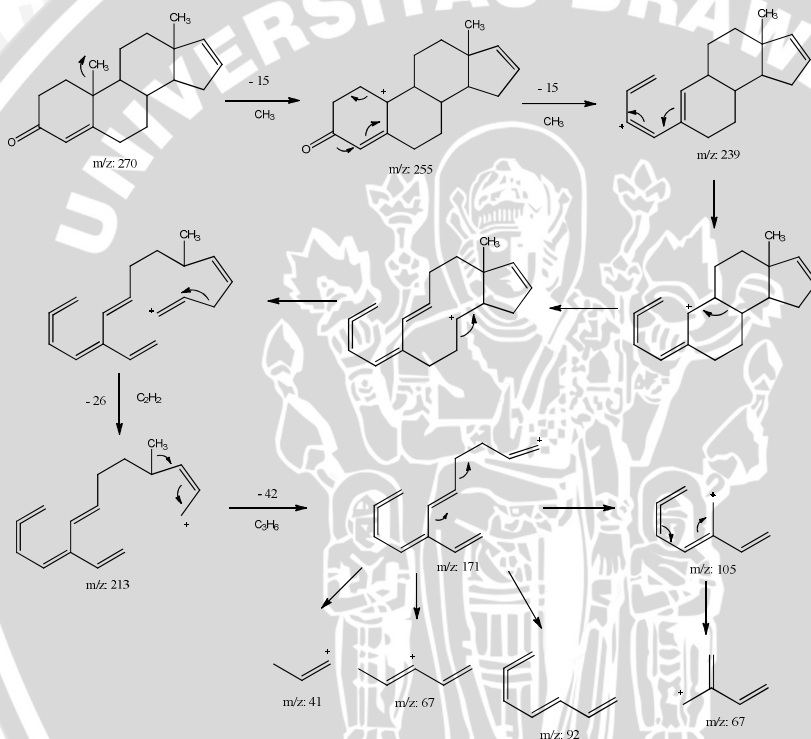


Gambar 4.3.90 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 23,500 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

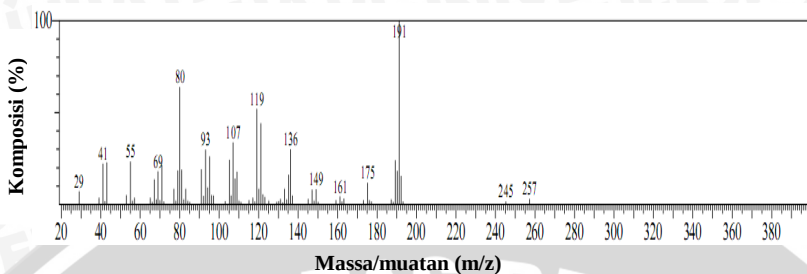
Spektrum massa pada Gambar 4.3.90 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 39, 41, 67, 81, 95, 109, 121, 135, 149, 177, 191, 264, 303, 360. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.90 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi androsta-4,16-dien-3-one pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.40).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak m/z = 270 mengalami pelepasan metil secara berturut-turut sehingga diperoleh puncak m/z = 255 dan m/z = 239, dilanjutkan dengan penataan ulang yang diikuti dengan pelepasan C_2H_2 sehingga diperoleh puncak m/z = 171, puncak ini kembali melakukan

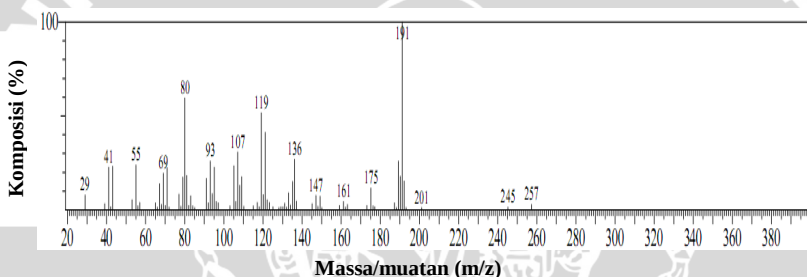
penataan ulang sehingga diperoleh puncak $m/z = 92$, $m/z = 67$, $m/z = 41$ dan $m/z 105$ yang diikuti dengan pelepasan C_3H_2 dan diperoleh puncak $m/z = 67$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 23,500 menit adalah androsta-4,16-dien-3-one dengan didukung oleh *library* WILLEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa androsta-4,16-dien-3-one yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.91



Gambar 4.3.91 Pola fragmentasi androsta-4,16-dien-3-one



Gambar 4.3.92 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 24,254 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

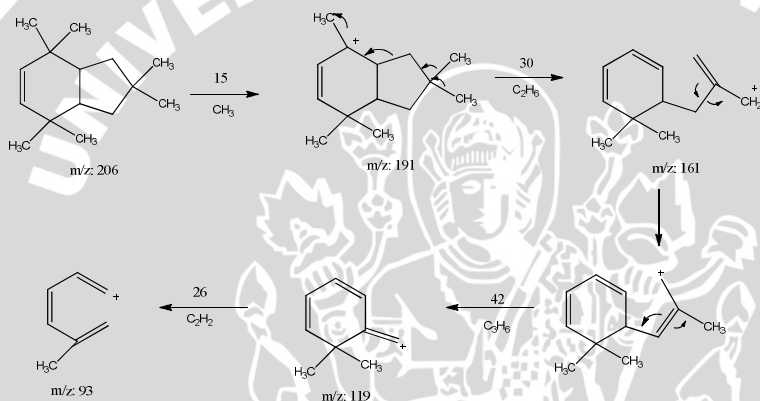


Gambar 4.3.93 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 24,331 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

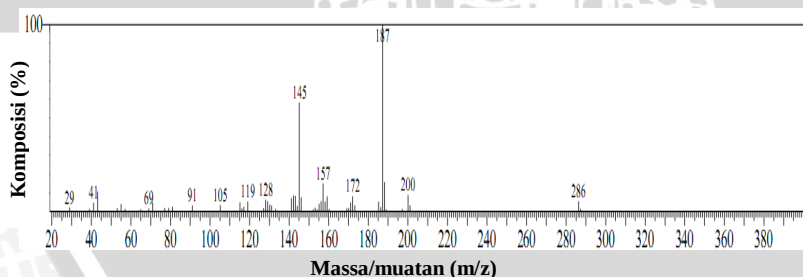
Spektrum massa pada Gambar 4.3.92 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 29, 41, 55, 69, 80, 93, 107, 119, 136, 149, 161, 175, 191, 245, 257. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.92 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi pada Gambar 4.3.93 dengan pola m/z = 29, 41, 55, 69, 80, 93, 107, 119, 136, 147, 161, 175, 191, 201, 245, 257. Pola fragmentasi tersebut mirip dengan 1H-inden, 2,3,3a,4,7,7a-heksahidro-2,2,4,4,7,7-heksametil-, trans pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.41).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak m/z = 191 mengalami pemutusan ikatan C_2H_6 sehingga diperoleh puncak m/z = 161 yang kemudian mengalami penataan ulang sehingga terjadi pemutusan ikatan C_3H_6 sehingga diperoleh

puncak $m/z = 119$, kemudian terjadi pemutusan ikatan C_2H_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 93$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 24,254 menit untuk minyak atsiri hasil pemisahan dengan gravitasi dan 24,331 menit untuk minyak hasil ekstraksi lapisan air adalah 1H-inden, 2,3,3a,4,7,7a-heksahidro-2,2,4,4,7,7-heksametil-, trans dengan didukung oleh library WILLEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa 1H-inden, 2,3,3a,4,7,7a-heksahidro-2,2,4,4,7,7-heksametil-, trans yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.94



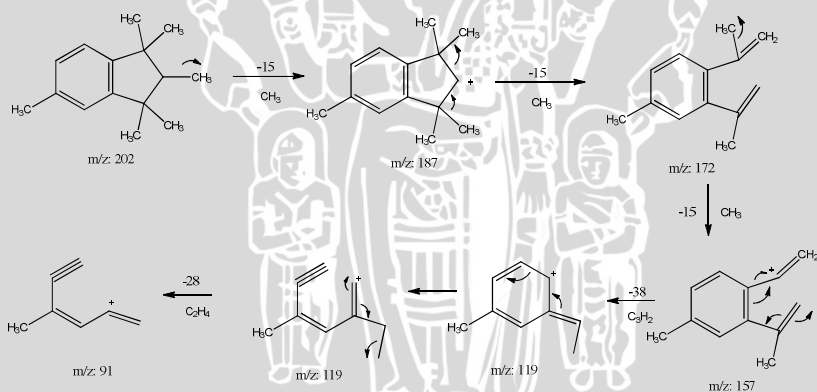
Gambar 4.3.94 Pola fragmentasi 1H-inden, 2,3,3a,4,7,7a-heksahidro-2,2,4,4,7,7-heksametil-, trans



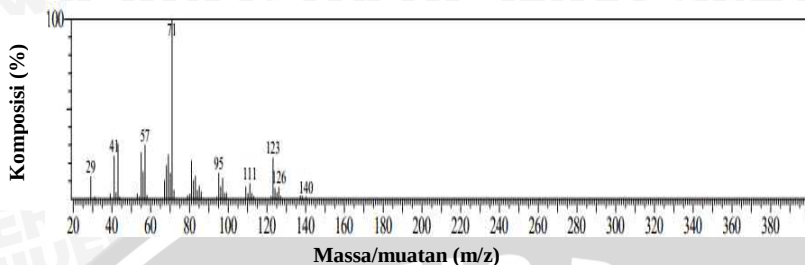
Gambar 4.3.95 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 24,505 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.92 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 29, 41, 69, 91, 105, 119, 128, 145, 157, 172, 187, 200, 286. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.76 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi 1,1,2,3,3,5-heksametil-2,3-dihidroinden pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.42)

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 202$ mengalami pelepasan metil secara berturut-turut sehingga diperoleh puncak $m/z = 187$, $m/z = 172$ dan $m/z = 157$, kemudian mengalami pelepasan C_3H_2 sehingga diperoleh puncak $m/z = 119$ dan diikuti oleh ppenataan ulang yang menyebabkan putusanya ikata C_2H_4 sehingga diperoleh puncak $m/z = 91$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 24,505 menit adalah 1,1,2,3,3,5-heksametil-2,3-dihidroinden dengan didukung oleh *library* WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa 1,1,2,3,3,5-heksametil-2,3-dihidroinden yang diperoleh dapat diduga seperti pada Gambar 4.3.96



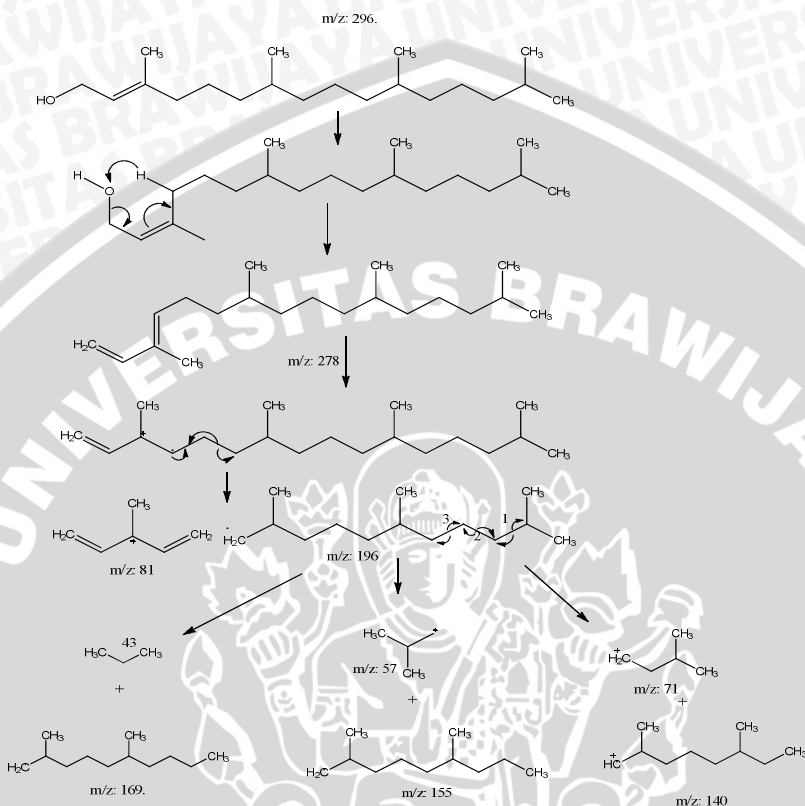
Gambar 4.3.96 Pola fragmentasi 1,1,2,3,3,5-heksametil-2,3-dihidroinden



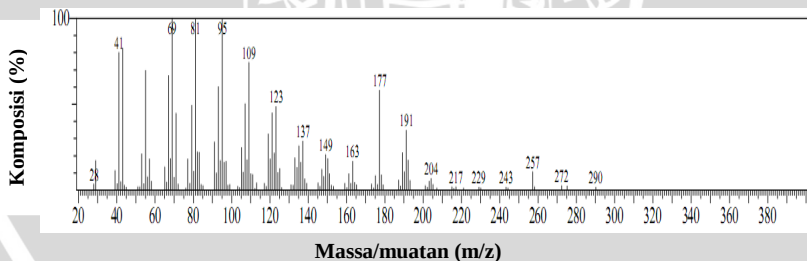
Gambar 4.3.97 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 25,399 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.78 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 29, 41, 57, 71, 95, 123, 126, 140. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.78 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi 2-heksadecen-1-ol pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.43).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa pada puncak $m/z = 206$ akan melakukan penataan ulang dan diperoleh puncak $m/z = 278$ dengan melepaskan C_2H_4 kemudian mengalami penataan ulang dan diperoleh puncak $m/z = 71$ dan $m/z = 140$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 25,399 menit adalah 2-heksadecen-1-ol dengan didukung oleh library WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa 2-heksadecen-1-ol yang diperoleh dapat diduga seperti pada gambar 4.3.98.



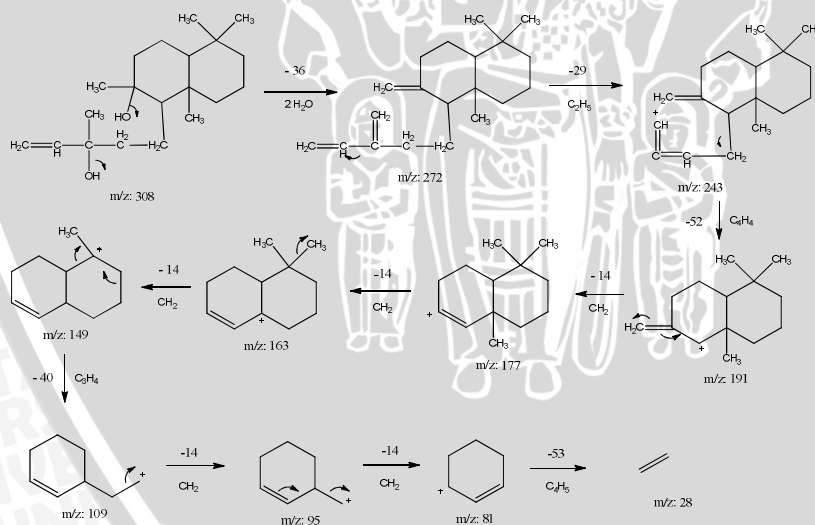
Gambar 4.3.98 Pola fragmentasi 2-heksadekan-1-ol



Gambar 4.3.99 Spektrum massa komponen penyusun minyak atsiri daun legundi (*Vitex trifolia*) dengan waktu retensi 27,360 menit minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

Spektrum massa pada Gambar 4.3.99 menunjukkan adanya puncak m/z sebagai berikut: 28, 41, 69, 81, 95, 109, 123, 137, 149, 163, 177, 191, 204, 217, 229, 243, 257, 272, 290. Puncak-puncak yang muncul pada Gambar 4.3.80 memiliki kemiripan dengan pola fragmentasi sklareol pada pustaka WILEY229.LIB (lampiran D.44).

Berdasarkan spektrum massa dapat diketahui bahwa dari puncak $m/z = 272$ mengalami pemutusan ikatan C_2H_3 yang menghasilkan puncak $m/z = 243$, dilanjutkan dengan pemutusan ikatan C_4H_4 dan diperoleh puncak $m/z = 191$. Puncak tersebut kemudian mengalami pelepasan CH_2 secara berturut-turut sehingga diperoleh puncak $m/z = 177$, $m/z = 163$, dan $m/z = 149$. Selanjutnya pada puncak tersebut terjadi pelepasan C_3H_4 sehingga diperoleh puncak $m/z = 109$ lalu puncak tersebut kehilangan CH_2 secara berturut-turut sehingga diperoleh puncak $m/z = 81$ dan dilanjutkan dengan kehilangan C_4H_5 sehingga diperoleh puncak $m/z = 28$. Berdasarkan pola fragmentasi tersebut, diduga senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri dari daun legundi pada waktu retensi 27,360 menit adalah sklareol dengan didukung oleh *library* WILEY229.LIB. Pola fragmentasi senyawa sklareol yang diperoleh dapat diduga seperti pada gambar 4.3.100.



Gambar 4.3.100 Pola fragmentasi sklareol

Berdasarkan hasil analisis kromatografi gas menggunakan kolom RASTEK RXi-5MS mengindikasikan adanya perbedaan prosentase komposisi komponen. Perbedaan prosentase komponen tersebut dapat terjadi karena adanya perbedaan titik didih dan tekanan uap dari masing-masing senyawa. Senyawa dengan titik didih rendah dan memiliki tekanan uap yang lebih tinggi akan terelusi lebih cepat dibandingkan dengan senyawa yang memiliki titik didih yang lebih tinggi dan tekanan uap yang lebih rendah. selain itu jenis kolom yang digunakan juga dapat mempengaruhi pemisahan komponen, komponen yang memiliki tingkat kepolaran hampir sama dengan kolom, maka akan tertahan lebih lama, dengan demikian maka senyawa penyusun minyak atsiri akan terpisah.

Berdasarkan hasil analisa dengan KG-SM diperoleh komponen senyawa penyusun minyak atsiri dari daun legundi hasil pemisahan dengan gravitasi diperoleh 36 komponen teridentifikasi, sedangkan untuk minyak atsiri hasil ekstraksi lapisan air diperoleh 18 komponen teridentifikasi, persamaan dari komponen dari kedua minyak tersebut sebanyak 11 komponen (lampiran E). Perbedaan tersebut dapat terjadi karena komponen yang terkandung dalam minyak atsiri hasil ekstraksi distilat merupakan senyawa yang memiliki tingkat kepolaran yang lebih tinggi atau memiliki fraksi yang lebih berat daripada fraksi minyak yang terpisah saat pemisahan dengan gravitasi sehingga akan lebih lama tertahan di fasa air. Perbedaan tersebut dapat terjadi karena komponen yang terkandung dalam minyak atsiri hasil ekstraksi distilat merupakan senyawa yang memiliki tingkat kepolaran yang lebih tinggi atau memiliki fraksi yang lebih berat daripada fraksi minyak yang terpisah saat pemisahan dengan gravitasi sehingga akan lebih lama tertahan di fasa air.

Pola fragmentasi yang ditunjukkan oleh spektrum massa tersebut dapat diketahui bahwa sebagian besar senyawa yang terdapat dalam minyak atsiri dari daun legundi merupakan senyawa monoterpen. Hal ini dapat terlihat dari fragmen puncak $m/z = 93$ merupakan fragmen ion yang karakteristik untuk senyawa monoterpen. Untuk penurunan $m/z = 14$ puncak-puncak secara teratur menunjukkan bahwa senyawa tersebut adalah golongan hidrokarbon tak jenuh [27].

Profil komponen yang diperoleh sebagian besar terdiri dari terpenoid, hal ini dapat ditinjau dari jumlah atom C yang berada dalam komponen yang teridentifikasi, dapat ditunjukkan pada tabel 4.3.3.

Tabel 4.3.3 Usulan senyawa dan jenis komponen

No	Usulan senyawa	Jenis komponen
1	α -pinen	Monoterpen
2	metil toluen	C_7H_8
3	β -pinen	Monoterpen
4	Sabinen	Monoterpen
5	β -mirsen	Monoterpen
6	limonen	Monoterpen
7	β -pellandren	Monoterpen
8	1,8-sineol	Monoterpen
9	β -kariofilen	Sisquiterpen
10	4-terpineol	Monoterpen
11	osimenil asetat	$C_{12}H_{18}O_2$
12	α -humulen	Sisquiterpen
13	α -terpineol	Sisquiterpen
14	terpinenil asetat	$C_{12}H_{20}O_2$
15	germakren-d	Sisquiterpen
16	linalil propionat	Monoterpen
17	α -muurolen	Sisquiterpen
18	δ -kadinen	Sisquiterpen
19	torreyol	Sisquiterpen
20	γ -muurolen	Sisquiterpen
21	trikosan	$C_{23}H_{48}$
22	1,1,4,5,6-pentametil-2,3-dihidroinden	$C_{14}H_{20}$
23	driminol	Sisquiterpen
24	1-sikloheksan-1-butanal, α ,2,6,6-tetrametil	$C_{14}H_{24}O$
25	kariofilen oksida	Sisquiterpen
26	retinol asetat	$C_{22}H_{32}O_2$
27	6,10,14-trimetil-2-pentadekanon	$C_{18}H_{36}O$
28	δ -guaien	Sisquiterpen
29	kontortadiol	Diterpen

30	nonadekan	$C_{19}H_{40}$
31	bisiklo [4.4.0]dec-1-En,2-isopropil-5 metil-9-metilen	Sisquiterpen
32	α -dekarvelon	Diterpen
33	widdrol	Sisquiterpen
34	manoil oksida	Diterpen
35	4,4-dimetil-3-(3-metil-3-buten-1-yliden)-2-metilidenbisiklo [4.1.0] heptan	Sisquiterpen
36	biformen	Diterpen
37	2,3,4,5,6,7,8,9-oktahidro-1,1,4,4,7,7-heksametil	$C_{21}H_{30}$
38	β -isometil ionon	$C_{14}H_{22}O$
39	antraken, 9 - dodeksiltetradekahidro	$C_{26}H_{48}$
40	androsta-4,16-dien-3-one	$C_{19}H_{26}O$
41	-inden, 2,3,3a,4,7,7a-heksahidro-2,2,4,4,7,7-heksametil-, trans	Sisquiterpen
42	1,1,2,3,3,5-heksametil-2,3-dihydroindene1H	Sisquiterpen
43	2-heksadeken-1-ol	Diterpen
44	sklareol	Diterpen

Pada kedua jenis sampel minyak yang diujikan, persen komposisi terbesar ditunjukkan oleh β -kariofilen dengan persen komposisi sebesar 17,21 untuk minyak hasil pemisahan dengan gravitasi dan 1,8-sineol dengan persen komposisi sebesar 43,43 untuk minyak hasil ekstraksi lapisan air.

Hasil komponen yang diperoleh dalam penelitian ini berbeda dengan hasil dilakukan oleh abaz azimi dan kawan-kawan, dalam penelitian ini diperoleh komponen yang teridentifikasi sebanyak 34 senyawa sedangkan dalam penelitian yang dilakukan oleh abaz azimi dan kawan-kawan terdeteksi sebanyak 17 senyawa yang ditunjukkan oleh tabel pada (lampiran F). Perbedaan profil komponen penyusun minyak atsiri dari daun legundi dapat terjadi karena beberapa faktor diantaranya jenis dan metode isolasi yang berbeda menyebabkan komponen tidak sepenuhnya terdistilasi, sehingga masih terdapat komponen yang tertinggal dalam sampel, selain itu jenis

kromatografi gas, jenis kolom, dan juga pengaturan alat yang digunakan juga dapat mempengaruhi hasil pemisahan komponen yang diperoleh sehingga terjadi perbedaan tersebut.

UNIVERSITAS BRAWIJAYA



BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Kesimpulan yang dapat diambil dari penelitian ini adalah :

1. Karakter minyak atsiri hasil pemisahan dengan gravitasi berwarna oranye kemerahan dengan massa jenis 0,86, indeks bias 1,493 dan bilangan asam sebesar 2,19, sedangkan untuk minyak hasil ekstraksi lapisan air diperoleh warna orange kecoklatan dengan massa jenis 0,82, indeks bias 1,457 dan bilangan asam sebesar 1,56.
2. Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan diperoleh komponen penyusun minyak atsiri dari daun legundi sebagian besar terdiri dari kelompok senyawa terpenoid (monoterpen, sisquiterpen, diterpen).

5.2 Saran

Perlu dilakukan penelitian lebih lanjut mengenai sampel ini, mengingat sangat sedikitnya jurnal yang ditemui saat pengerjaan dari Tugas Akhir ini, sehingga dapat digunakan sebagai referensi untuk mendapatkan informasi seluas mungkin.

DAFTAR PUSTAKA

- [1] Setiawan, D., 2008, **Atlas Tumbuhan Obat Indonesia**, Pustaka Bunda, Jakarta
- [2] Chowwanapoonpohn, S. dan B. Apiwat, 2000, **Antimalarial Activity in Vitro of Some Natural Extracts from *Vitex trifolia***, J. Sci. Fac. Chiang Mai Univ. 27 (1) : 9-13
- [3] Taatsin, A., dkk, 2006, **Repellency of Essential Oils Extracted from Plants in Thailand Against for Mosquito Vectors (Diptera: *Culicidae*) and Oviposition Deterrent Effects Against *Aedes Aegypti* (Diptera: *Culicidae*)**, Apiwat Tawatsin, National Institute of Health, Department of Medical Sciences, Ministry of Public Health, Nonthaburi 11000, Thailand
- [4] Tapsell LC, dkk., 2006, **Health Benefits of Herbs and Spices**, The Medical Journal of Australia
- [5] Gunawan, D., dan S. Mulyani, 2004, **Ilmu Obat Alam (Farmakognosi)**, Penebar Swadaya, Jakarta
- [6] Elistina, M. D., 2005, **Isolasi dan Uji Aktivitas Antibakteri Minyak Atsiri dari Daun Sirih (*Piper betle* L)**, FMIPA, Universitas Udayana, Denpasar
- [7] Tarwiyah, K., 2011, **Minyak Atsiri Jahe**, Deputy Manegristek Bidang Pendayagunaan dan Pemasyarakatan Ilmu Pengetahuan dan Teknologi, Jakarta
- [8] Abbas A. R., Jamzad. Z, Sefidkon. F, and Bakhshi-Khaniki. Gh, 2006, **The Potential Value of Phytochemical and Micromorphological Characters in Taxonomic Treatment of Genus *Vitex* L. (*Lamiaceae*)**, Iran. Journ. Bot. 12 (1): 15-35. Tehran

- [9] Guenther, E., 1987, **Minyak Atsiri Jilid 1**, Penerjemah S. Ketaren, Penerbit Univesitas Indonesia, UI-Press, Jakarta, hal 244 – 245
- [10] Nair, A.G.R., P. Ramesh, dan S. Subramanian, 1975, **Two Unusual Flavones (artemetin and 7-desmethyl artemetin) from The Leaves of *V. trifolia***, Curr. Sci., 44 (7) : 214–216
- [11] Nugroho, A. E. dan G. Alam, tanpa tahun, **Review Tanaman Obat Legundi (*Vitex Trifolia*)**, Bagian Farmakologi dan Farmasi Klinik, Fakultas Farmasi Universitas Gadjah Mada, 2 Jurusan Farmasi, Fakultas MIPA, Universitas Hasanudin, Makassar
- [12] Steenis, CGGJ Van, 2008, **Flora**, Pradnya Paramita, Jakarta
- [13] NRCS, 2005, **Plants Database**, Natural Resources Conservation Service United States Depart of Agriculture, <http://plants.usda.gov> tanggal akses 19 april 2012
- [14] Douglas, M., J. Heyes, B. Smallfield, F. Mazaud dan C. Jenane, 2005, **Herb, Spices and Essential Oil**, United Nations Industrial Development Organization by the Food and Agriculture Organization, United Nations
- [15] Sudaryanti, T. dan E. Sugiharti, 1990, **Budaya dan Penyulingan Nilam**, Penebar Swadaya, Jakarta
- [16] Sumarni, N.B.A. dan Solekan, 2008, **Pengaruh Volume Air dan Berat Bahan Pada Penyulingan Minyak Atsiri**, Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknologi Industri, Yogyakarta
- [17] Khopkar, S.M., 2008, **Konsep Dasar Kimia Analitik**, Penerbit Univesitas Indonesia, UI-Press, Jakarta

- [18] Sumitra, O., 2003, **Memproduksi Minyak Atsiri Biji Pala**, Direktorat Jendral Pendidikan Dasar dan Menengah DEPDIKNAS, Jakarta
- [19] Santoso, H. B., 1990, **Bertanam Nilam**, Kanisius, Yogyakarta, Hal: 13, 19-23, 62, 71
- [20] Geankoplis, C.J., 1985, **Transport Processes and Unit Operation**, Prentice Hall, Inc., Singapore
- [21] Mulja, M., 1994, **Perkembangan Instrumen Kromatografi Gas**, Airlangga University Press, Surabaya
- [22] Bresnick, S., 1996, **High-Yield Organic Chemistry**, Williams and Wilkins, United States, Hal: 89-92
- [23] Harnani, E.D., 2010, **Perbandingan Kadar Eugenol Minyak Atsiri Bunga Cengkeh (*Syzygium aromaticum* (L.) Meer. & Perry) dari Maluku, Sumatera, Sulawesi, dan Jawa dengan Metode GC-MS**, Fakultas Farmasi, Universitas Muhammadiyah Surakarta, Surakarta
- [24] Hendayana, S., 2006, **Kimia Pemisahan**, PT. Remaja Rosdakarya, Bandung, Hal: 31-63
- [25] Fessenden, R.J. dan J.S. Fessenden, 1992, **Kimia Organik, Jilid 2**, Alih bahasa A.H. Pudjaatmaka, Erlangga, Jakarta, Hal. 454-455
- [26] Sastrohamidjojo, H., 1991, **Spektroskopi**, Liberty, Yogyakarta
- [27] Silverstein, R.M., F.X. Webster dan D.J. Kiemle, 2005, **Spectrometric Identification of Organic Compounds**, John Wiley and Sons New York, p. 1-3
- [28] Ma'mun dan N. Nurdjanah, 1993, **Pengaruh Perajangan dan Lama Pelayuan terhadap Rendemen dan Mutu Minyak**

Serai Dapur (*Cymbopogon citratus* Stapf), Balai Penelitian
Tanaman Rempah dan Obat

- [29] Shite, D.T., 2009, **Karakteristik Minyak Atsiri Jeragu (*Acours calamus*)**, USU Repository
- [30] Budavari, S., M.J. O'Neil, A. Smith, dan P.E. Heckelman, 1989, **The Merck Index : An Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals**, 11th Edition, Merck & Co., Inc, USA, p. 8186
- [31] Vogel, A.L., 1988, **Elementary Practical Organic Chemistry**, Longmans, Green and Co., New York
- [32] Taofik, M., E. Yulianti, A. Barizi, dan E.K. Hayati, 2010, **Isolasi dan Identifikasi Senyawa Aktif Ekstrak Air Daun Paitan (*Thitonia difersiola*) Sebagai Bahan Insektisida Botani Untuk Pengendalian Hama Tungau *Eriophyidae***, Chemistry Departement of Science and Technology Faculty Islamic of University (UIN) Maulana Malik Ibrahim (MMI), Malang
- [33] Stahl, E., 1985, **Analisis Obat Secara Kromatografi dan Mikroskopis**, Penerjemah K. Padmawinata, Penerbit ITB, Bandung

LAMPIRAN

A. Dokumentasi Penelitian

A.1 Gambar Daun Legundi yang Digunakan



Gambar A.1.1 Daun legundi (*Vitex trifolia*) dari UPT Balai Materia Medica Kota Batu



Gambar A.1.2 Daun legundi (*Vitex trifolia*) kering

A.2 Determinasi oleh UPT Balai Materia Medica Kota Batu



DINAS KESEHATAN PROPINSI JAWA TIMUR
UPT MATERIA MEDICA
Jalan Lahor No.87 Telp. (0341) 593396 Batu (65313)
KOTA BATU

Nomor : 074 / 068 / 101.8 / 2012
Sifat : Biasa
Perihal : **Determinasi Tanaman LEGUNDI**

Memenuhi permohonan saudara :
Nama : FEBRIANTO TRI CAHYONO
N I M : 0810923046
Fakultas : MIPA, JURUSAN KIMIA
UNIVERSITAS BRAWIJAYA MALANG

1. Perihal determinasi tanaman legundi
Kingdom : Plantae (Tumbuhan)
Subkingdom : Tracheobionta (Tumbuhan berpembuluh)
Super Divisi : Spermatophyta (Menghasilkan biji)
Divisi : Magnoliophyta (Tumbuhan berbunga)
Sub Divisi : Angiospermae
Kelas : Dicotyledonae
Bangsa : Solanales
Suku : Verbenaceae
Marga : Vitex
Jenis : *Vitex trifolia L.*
Sinonim : *Vitex negundo*, *Vitex rotundifolia L.f.*
Sumatra : Langundi (Minangkabau) Gandasari (Palemhang)
Lagundi (Melayu), Jawa (Lagondi (Sunda) Legundi (Jawa Tengan)
Langghundi (Madura), Nusa Tenggara Galumi (Sumba) Sangari
(Birma), Sulawesi Laura (Makasar) Lawarani (Bugis)
- Kunci determinasi : 1b- 2b - 3b - 4b - 6 b - 7b - 9b-10b-11b-12b-13b-14b-16b-286b-288a-1a-1
2. Nama Simplisia : Viticis Folium; Daun Legundi.
3. Kandungan kimia : Daun mengandung minyak atsiri yang tersusun dari seskuiterpen, terpenoid, senyawa ester, alkaloid (vitrisin), glikosida flavon (artemetin dan 7-desmetil artemetin) dan komponen non flavonoid friedelin, β -sitosterol, glukosida dan senyawa hidrokarbon. Hasil penelitian terhadap minyak atsiri daun legundi atas dasar reaksi warna menggunakan metode kromatografi lapisan tipis ditemukan senyawa golongan aldehida dan atau keton, senyawa tidak jenuh, senyawa dengan ikatan rangkap terkonjugasi, senyawa terpenoid; sedangkan analisis dengan kromatografi gas ditemukan keberadaan sineol. Biji minyak biji mengandung senyawa-senyawa hidrokarbon, asam lemak. Pada jenis tumbuhan lain yaitu Vitex negundo L. ditemukan asam protokatekuat, asam 5-hidroksi isofoalal, glukononitol.
4. Penggunaan : Penelitian
5. Daftar Pustaka :
 - Steenis, CGGJ Van Dr, *FLORA*, 2008, Pradnya Paramita , Jakarta.
 - Syamsuhidayat, Sri sugati, Hutapea, Johny Ria.1991, *Inventaris Tanaman Obat Indonesia*, Departemen Kesehatan Republik Indonesia : Badan Penelitian Dan Pengembangan Kesehatan.
 - Anonim, <http://www.warintek.ristek.go.id / legundi>. Diakses tanggal 3 November 2011
 - _____, <http://www.tanaman.obat.com / legundi>. Diakses tanggal 21 Desember 2010

Demikian determinasi ini kami buat untuk dipergunakan sebagaimana mestinya.

Batu, 5 MARET 2012
Kepala UPT Materia Medica Batu

Drs. Busin RM. Apt. MKes.
NIP. 196111021991031003

A.3 Distilasi Uap



Gambar A.3.1 Rangkaian alat untuk distilasi uap distilasi uap

A.4 Minyak atsiri dari Daun Legundi (*Vitex trifolia*) dalam Corong Pisah



Gambar A.4 Gambar minyak atsiri saat berada dalam corong pisah

A.5 Distilasi fraksinasi



Gambar A.5 Rangkaian alat untuk redistilasi

A.6 Rangkaian Alat Untuk Pembebasan Minyak Atsiri dari Pelarut dengan Menggunakan Gas N_2



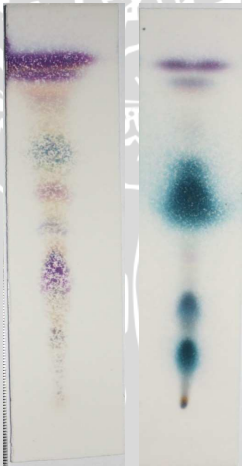
Gambar A.6 Sampel saat dilakukan paparan dengan gas N_2

A.7 Minyak Atsiri dari Daun Legundi (*Vitex trifolia*)



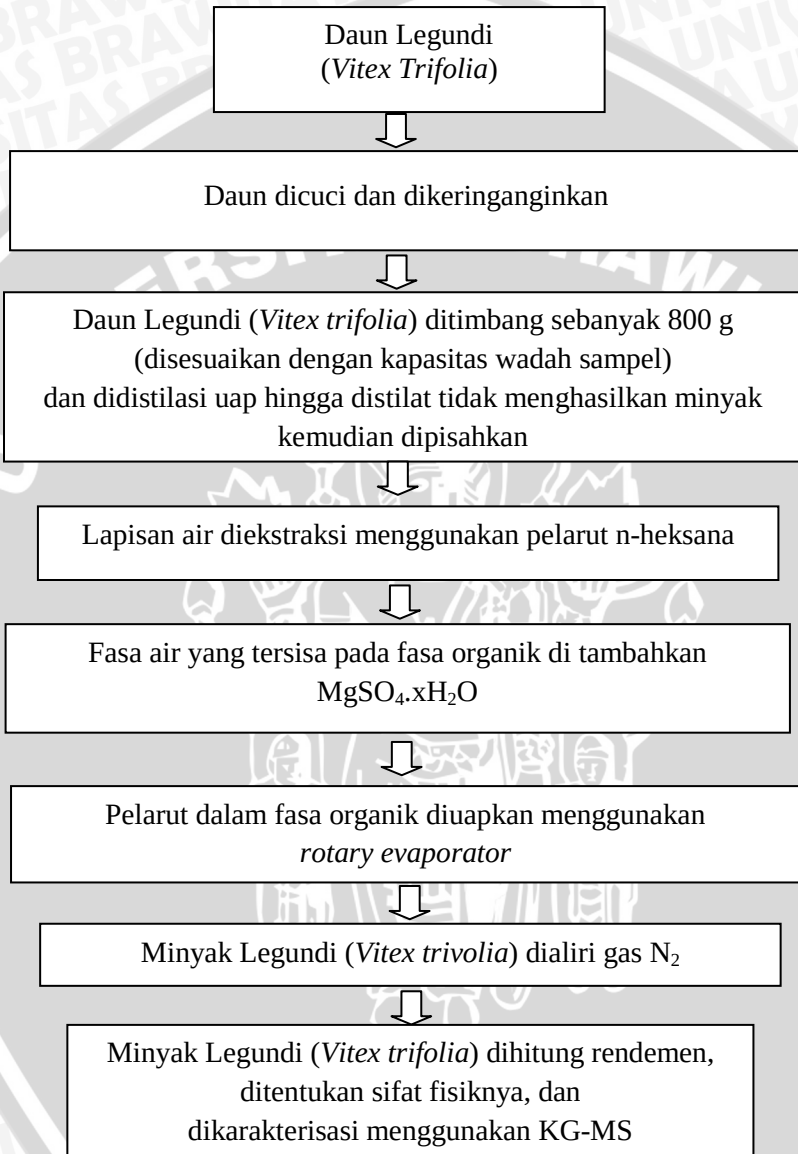
Gambar A.7.1 Gambar minyak atsiri hasil pemisahan dengan gravitasi (kiri) dan hasil ekstraksi lapisan air (kanan)

A.8 Hasil KLT

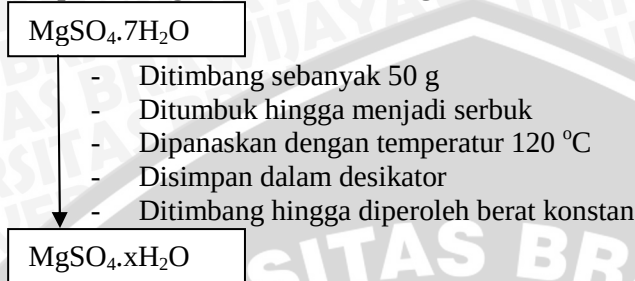


Gambar A.8.1 Gambar hasil KLT minyak atsiri hasil pemisahan dengan gravitasi (kiri) dan hasil ekstraksi lapisan air (kanan)

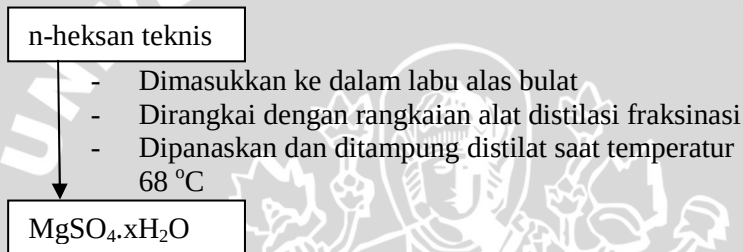
B. Diagram Alir Penelitian



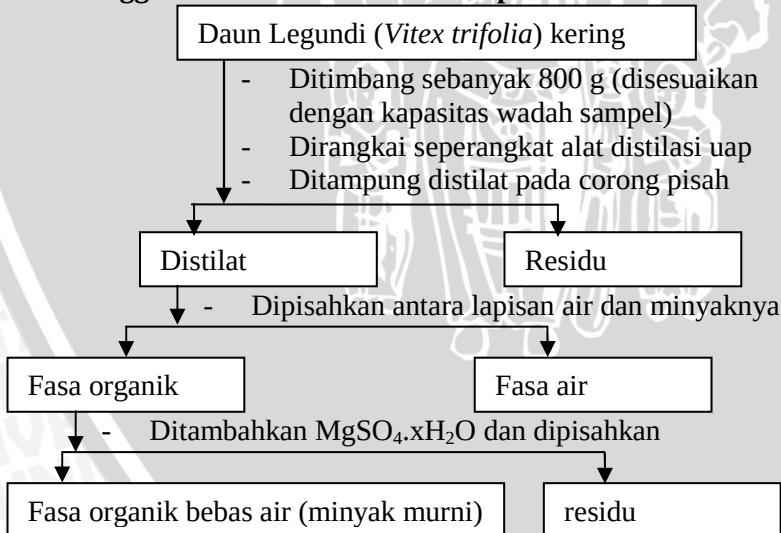
B.1. Preparasi $\text{MgSO}_4 \cdot x \text{H}_2\text{O}$ dari $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$



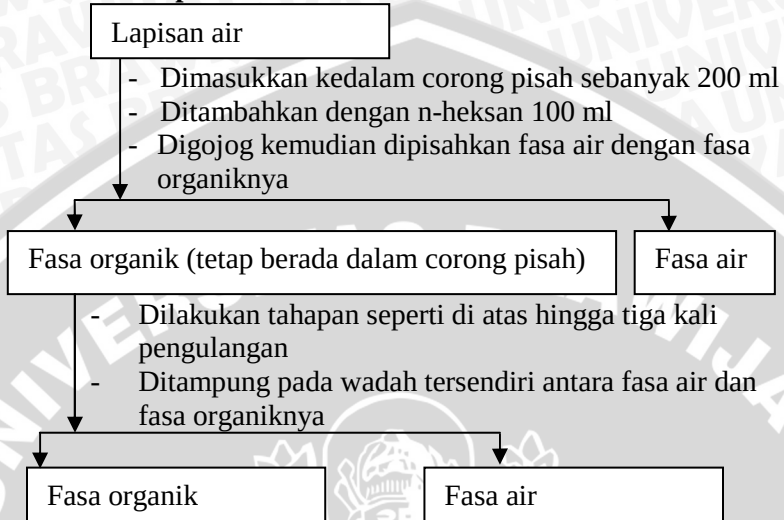
B.2. Distilasi n-heksan Teknis



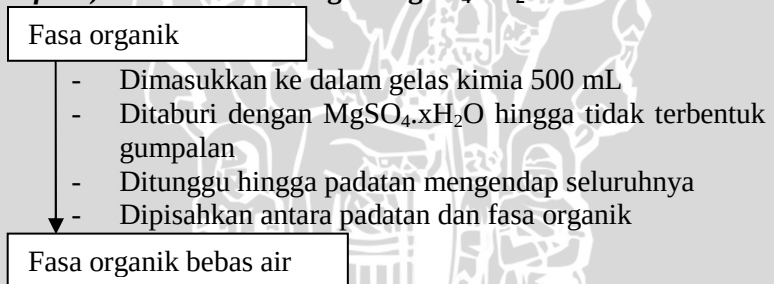
B.3. Isolasi Minyak Atsiri dari Daun Legundi (*Vitex trifolia*) Menggunakan Metode Distilasi Uap



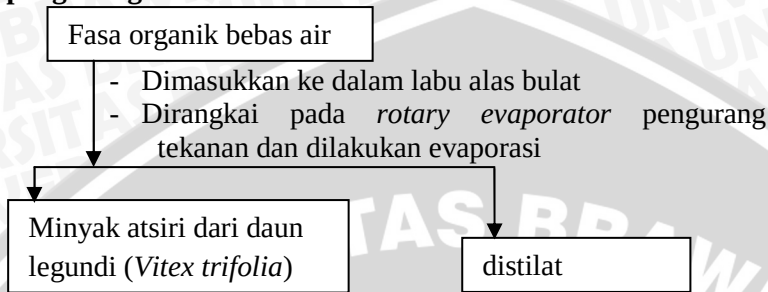
B.4. Ekstraksi lapisan air



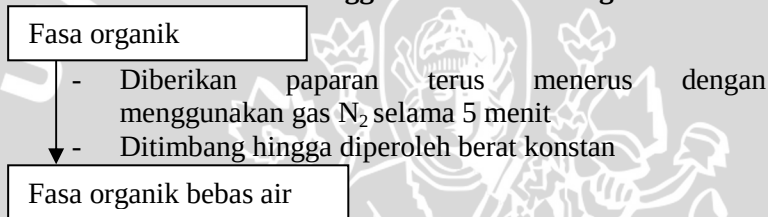
B.5. Pembebasan Ekstrak Minyak Atsiri Daun Legundi (*Vitex trifolia*) dari Fasa Air dengan $\text{MgSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$



B.6. Evaporasi Pelarut dengan Menggunakan *Rotary Evaporator* pengurang Tekanan

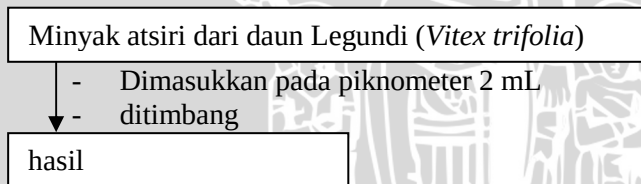


B.7. Pembebasan Minyak Atsiri Daun Legundi (*Vitex trifolia*) dari Pelarut n-heksan Menggunakan Gas Nitrogen

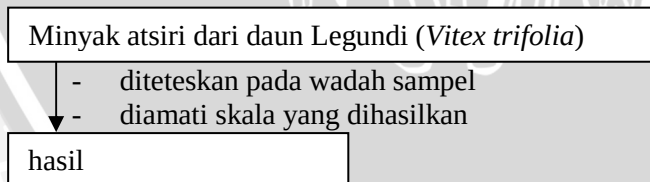


B.8. Uji Sifat Fisika

B.8.1. Penentuan Massa Jenis



B.8.2. Penentuan Indeks Bias



B.9. Uji Sifat Kimia

B.9.1. Penentuan Bilangan Asam

Minyak atsiri dari daun Legundi (*Vitex trifolia*)

- ditimbang sebanyak 1 g
- ditambahkan dengan etanol 95% sebanyak 10 mL
- direfluks hingga mendidih
- didinginkan
- ditambahkan beberapa tetes indikator PP
- dititrasi dengan menggunakan KOH 0,01 M hingga warna berubah dari kuning ke merah

hasil

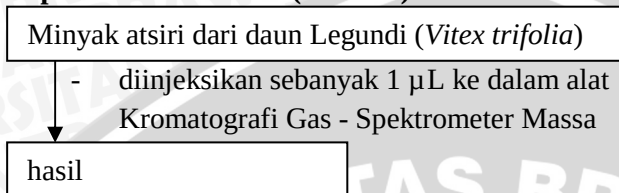
B.9.2. Uji dengan Kromatografi Lapis Tipis

Plat silika

- dipotong dengan ukuran 2x8 cm
- diberi tanda batas bawah 1 cm dan batas atas 0,5 cm
- dilakukan aktivasi dengan sedikit panas
- ditotolkan minyak atsiri dari daun legundi (*Vitex trifolia*) di bagian batas bawah tengah plat silika hingga noda terlihat
- dielusi dengan eluen n-heksan dan etil asetat (9:1) yang telah dijenuhkan
- disemprot dengan H₂SO₄ : etanol 95% (1,25 mL : 25 mL) dan dikeringkan sedikit
- disemprot dengan vanillin : etanol 95% (1,25 mL : 25 mL) dan dikeringkan
- diamati hasil yang diperoleh

hasil

B.9.3. Analisis Komponen Minyak Atsiri dari Daun Legundi (*Vitex trifolia*) Menggunakan Kromatografi Gas - Spektrometer Massa (KG-SM)



C. Perhitungan

C.1. Preparasi $\text{MgSO}_4 \cdot \text{xH}_2\text{O}$

Tabel L.3.1 Data hasil penimbangan setelah pemanasan

No	Pemanasan selama	Berat yang diperoleh
1	24 jam pertama	212,54
2	24 jam kedua	212,54
3	24 jam ketiga	212,54

Keterangan :



Massa cawan = 183,74 g

Massa cawan + $\text{MgSO}_4 \cdot (7-x)\text{H}_2\text{O}$ = 212,54 g

massa $\text{MgSO}_4 \cdot (7-x)\text{H}_2\text{O}$ = 212,54 – 183,74
= 22,2 g

dimana x = jumlah molekul hidrat (H_2O) yang terbebaskan

Massa $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$: 50 g

massa $\text{MgSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ = m $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ - m $\text{MgSO}_4 \cdot (7-x)\text{H}_2\text{O}$
= 50 g – 28,8 g
= 22,2 g

Mr $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ = (24+32+64+126) = 246 g/mol

Mr x H_2O = x.18 g/mol

$$\text{Mol } \text{MgSO}_4 \cdot (7-x)\text{H}_2\text{O} = \frac{\text{Massa } \text{MgSO}_4 \cdot (7-x)\text{H}_2\text{O}}{\text{Mr } \text{MgSO}_4 \cdot (7-x)\text{H}_2\text{O}}$$

$$= \frac{28,8 \text{ g}}{120 + (7-X)18 \text{ g/mol}}$$

$$\begin{aligned} \text{Mol x H}_2\text{O} &= \frac{\text{Mol x H}_2\text{O}}{\text{Mr H}_2\text{O}} \\ &= \frac{21,2 \text{ g}}{X \cdot 18 \text{ g/mol}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Molekul H}_2\text{O} \quad (x) &= \frac{\text{Mol x H}_2\text{O}}{\text{Mol MgSO}_4 \cdot (7-X)\text{H}_2\text{O}} \\ &= \frac{21,2 \text{ g}}{X \cdot 18 \text{ g/mol}} \times \frac{120 + (7-X)18 \text{ g/mol}}{28,8 \text{ g}} \\ &= \frac{21,2 \cdot 120 + (7-X)18}{518,4 X} \\ &= \frac{21,2 \cdot 246 - 18X}{518,4 X} \end{aligned}$$

$$518,4 x = 21,2 \cdot 246 - 18 x$$

$$518,4 x = 5215,2 - 381,6 x$$

$$518,4 x + 381,6 x = 5215,2$$

$$900 x = 5215,2$$

$$x = 5,79 \Rightarrow 6$$

Berdasarkan data tersebut kurang lebih $\text{MgSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ yang diperoleh kehilangan 6 molekul hidrat (H_2O) sehingga molekul yang didapatkan adalah $\text{MgSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$.

C.2. Perhitungan Rendemen Minyak Atsiri dari Daun Legundi (*Vitex trifolia*)

a. Minyak atsiri dari daun legundi (*Vitex trifolia*) hasil pemisahan dengan gravitasi

$$\text{Rendemen} = \frac{\text{massa minyak}}{\text{massa sampel}} \times 100\%$$

$$= \frac{3,38 \text{ g}}{800 \text{ g}} \times 100\%$$

$$= 0,423 \%$$

- b. Minyak atsiri dari daun legundi (*Vitex trifolia*) hasil ekstraksi lapisan air

Tabel L.3.2 Data hasil penimbangan setelah dilakukan paparan dengan gas N₂

No	Pemaparan selama	Berat yang diperoleh
1	5 menit ke-14	20,13
2	5 menit ke-15	20,13
3	5 menit ke-16	20,13

Keterangan :

massa botol = 15,28 g

massa minyak + botol = 20,12 g

massa minyak = (massa minyak+botol) – massa botol

= 20,12 g – 15,28 g

= 4,84 g

Rendemen = $\frac{\text{massa minyak}}{\text{massa sampel}}$ x 100%

= $\frac{4,84 \text{ g}}{800 \text{ g}}$ x 100 %

= 0,605 %

Rendemen total = rendemen minyak murni + rendemen minyak hasil ekstraksi
 = 0,423 % + 0,605
 = 1,028%

C.3. Perhitungan Uji Sifat Fisika

C.3.1. Penentuan Massa Jenis

Massa piknometer = 7,9 g

Massa aquades + piknometer = 2,43 g

Massa minyak hasil pemisahan dengan gravitasi+piknometer= 9,97g

Massa minyak hasil ekstraksi lapisan air + piknometer = 9,88 g

Massa akuades = 10,33 g – 7,9 g
 = 2,43 g

Massa minyak hasil pemisahan dengan gravitasi = 9,97 g – 7,9 g
 = 2,07 g

$$\begin{aligned}\text{Massa minyak hasil ekstraksi lapisan air} &= 9,88 \text{ g} - 7,9 \text{ g} \\ &= 1,98 \text{ g}\end{aligned}$$

- a. Minyak atsiri dari daun legundi (*Vitex trifolia*) hasil pemisahan dengan gravitasi

$$\begin{aligned}N &= n' + 0,00073 (29-25) \\ &= \frac{2,07 \text{ g}}{2,43 \text{ g}} + 0,00073 (29-25) \\ &= 0,85477\end{aligned}$$

- b. Minyak atsiri dari daun legundi (*Vitex trifolia*) hasil ekstraksi lapisan air

$$\begin{aligned}N &= n' + 0,00073 (29-25) \\ &= \frac{1,98 \text{ g}}{2,43 \text{ g}} + 0,00073 (29-25) \\ &= 0,81774\end{aligned}$$

C.3.2. Penentuan Indeks Bias

- a. Minyak atsiri dari daun legundi (*Vitex trifolia*) hasil pemisahan dengan gravitasi

skala pada refraktometer yang terbaca = 1,491

$$\begin{aligned}N &= n' + 0,00042.(T' - T) \\ &= 1,491 + 0,00042.(29-25) \\ &= 1,49268\end{aligned}$$

- b. Minyak atsiri dari daun legundi (*Vitex trifolia*) hasil ekstraksi lapisan air

skala pada refraktometer yang terbaca = 1,455

$$\begin{aligned}N &= n' + 0,00042.(T' - T) \\ &= 1,455 + 0,00042.(29-25) \\ &= 1,45668\end{aligned}$$

C.4. Perhitungan Sifat Kimia

C.4.1. Penentuan Bilangan Asam

- Pembuatan larutan KOH 1 M dalam 100 mL

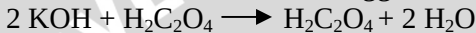
$$\begin{aligned}\text{mol} &= M \cdot V \\ &= 1 \text{ M} \cdot 0,1 \text{ L} \\ &= 0,1 \text{ mol}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Massa} &= M_r \cdot \text{mol} \\ &= 56,1 \text{ g/mol} \cdot 0,1 \text{ mol} \\ &= 5,61 \text{ g}\end{aligned}$$

- Pembuatan larutan KOH 0,01 M dari KOH 1 M

$$\begin{aligned}M_1 \cdot V_1 &= M_2 \cdot V_2 \\ 0,01 \text{ M} \cdot 100 \text{ mL} &= 1 \text{ M} \cdot V_2 \\ 1 \text{ m mol} &= 1 \text{ M} \cdot V_2 \\ V_2 &= 1 \text{ mL}\end{aligned}$$

- Pembakuan KOH 0,01 M menggunakan $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$



$$\begin{aligned}\text{Mol } \text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4 &= \frac{\text{massa } \text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4}{M_r \text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4} \\ &= \frac{1,26 \text{ g}}{126 \text{ g}} \\ &= 0,01\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Mol } \text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4 \text{ yang digunakan (1 mL)} &= \frac{1 \text{ mL}}{100 \text{ mL}} \times 0,01 \text{ mol} \\ &= 0,0001 \text{ mol}\end{aligned}$$

$$\text{Volume KOH saat pembakuan} = 15,9 \text{ mL} \longrightarrow 0,159 \text{ L}$$

$$\begin{aligned}M \text{ KOH} &= \frac{\text{mol KOH}}{V \text{ KOH}} \\ &= \frac{\text{mol KOH}}{V \text{ KOH}} \\ &= 0,0126 \text{ M}\end{aligned}$$

- **Perhitungan bilangan asam**

Massa minyak yang digunakan sebanyak 1 g

a. Minyak hasil pemisahan dengan gravitasi

$$V \text{ KOH} = 3,1 \text{ mL}$$

$$\begin{aligned}\text{Bilangan Asam} &= \frac{V \text{ KOH} \cdot M \text{ KOH} \cdot M_r \text{ KOH}}{\text{Massa sampel}} \\ &= \frac{3,1 \text{ mL} \cdot 0,0126 \text{ M} \cdot 56,1 \text{ g/mol}}{1 \text{ g}} \\ &= 2,19\end{aligned}$$

b. Minyak hasil ekstraksi lapisan air

V KOH = 2,2 mL

$$\begin{aligned} \text{Bilangan Asam} &= \frac{V_{\text{KOH}} \cdot M_{\text{KOH}} \cdot N_{\text{KOH}}}{\text{Massa sampel}} \\ &= \frac{2,2 \text{ mL} \cdot 0,0126 \text{ M} \cdot 56,1 \text{ g/mol}}{1 \text{ g}} \\ &= 1,56 \end{aligned}$$

C.4.2. Perhitungan Nilai Rf pada Kromatografi Lapis Tipis

Tabel C.4.1 Tabel perhitungan nilai Rf

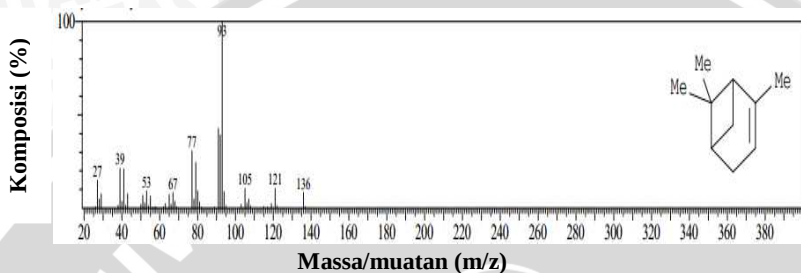
No	Jarak node	Jarak eluen	Rf = $\frac{\text{jarak node}}{\text{jarak yang ditempuh eluen}}$
1	1,1	6	0,183
2	2,2	6	0,367
3	2,9	6	0,483
4	3,6	6	0,6
5	4,3	6	0,717
6	5,3	6	0,883
7	5,7	6	0,95
8	6	6	1

Tabel C.4.2 Tabel perhitungan nilai Rf minyak hasil ekstraksi

No	Jarak node	Jarak eluen	Rf = $\frac{\text{jarak node}}{\text{jarak yang ditempuh eluen}}$
1	0,9	6	0,15
2	1,7	6	0,283
3	3,7	6	0,617
4	5,7	6	0,95
5	6	6	1

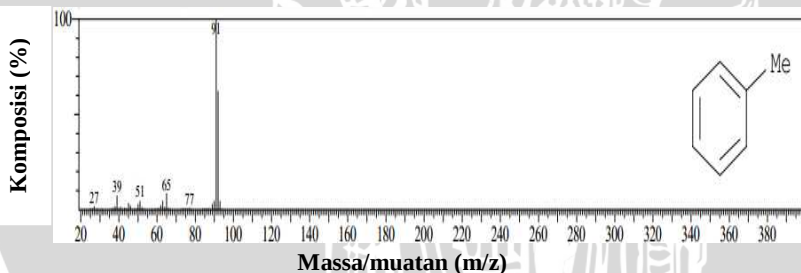
Lampiran D. *Library* Senyawa dengan Analisis Menggunakan Kromatografi Gas-Spektrometer Massa (KG-SM)

D.1 Senyawa α -pinen



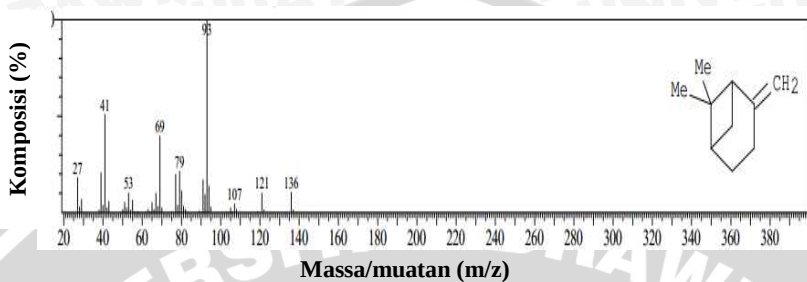
Nama komponen : α -pinen
Berat molekul : 136
Rumus molekul : $C_{10}H_{16}$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.2 Senyawa metil toluen



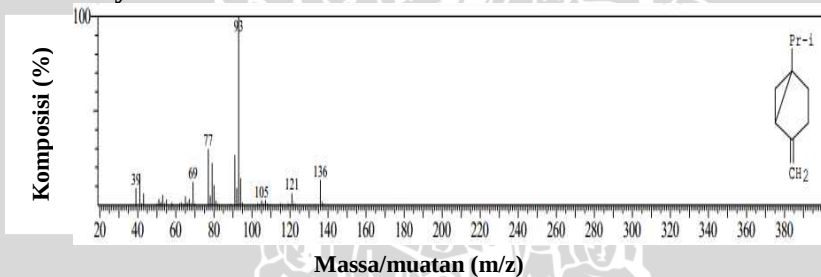
Nama komponen : metil toluen
Berat molekul : 92
Rumus molekul : C_7H_8
Pustaka : WILEY229.LIB

D.3 Senyawa β -pinen



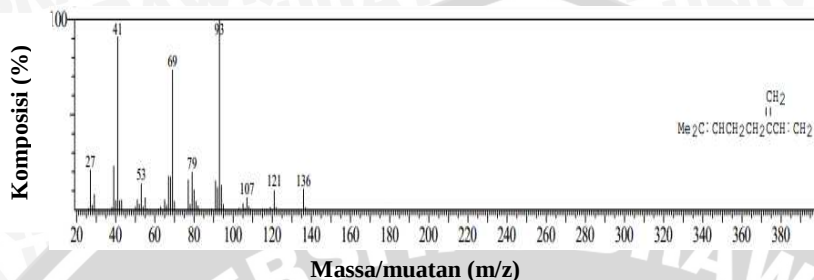
Nama komponen : β -pinen
Berat molekul : 136
Rumus molekul : C₁₀H₁₆
Pustaka : WILEY229.LIB

D.4 Senyawa Sabinen



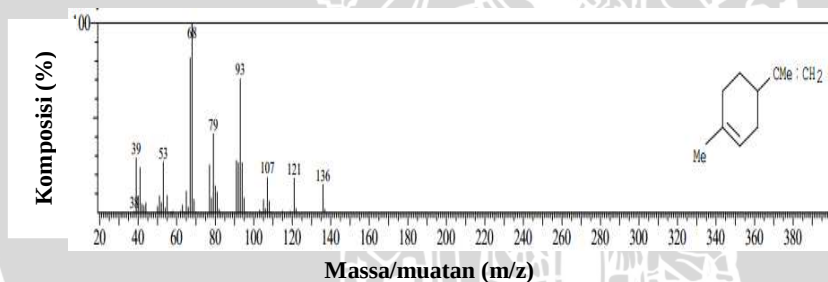
Nama komponen : sabinen
Berat molekul : 136
Rumus molekul : C₁₀H₁₆
Pustaka : WILEY229.LIB

D.5 Senyawa β -mirsen



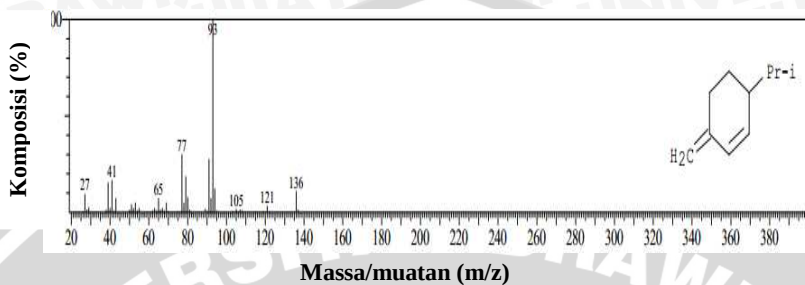
Nama komponen : β -mirsen
Berat molekul : 136
Rumus molekul : $C_{10}H_{16}$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.6 Senyawa limonen



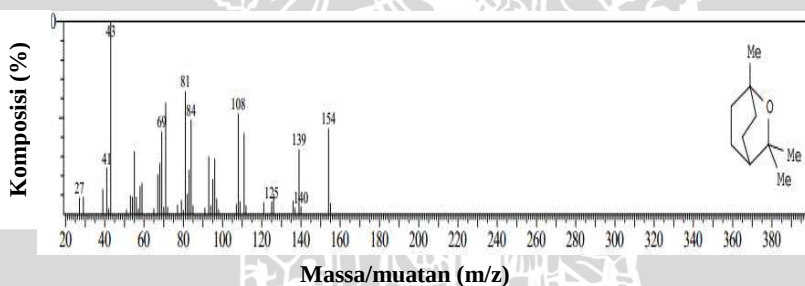
Nama komponen : limonen
Berat molekul : 136
Rumus molekul : $C_{10}H_{16}$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.7 Senyawa β -pellandren



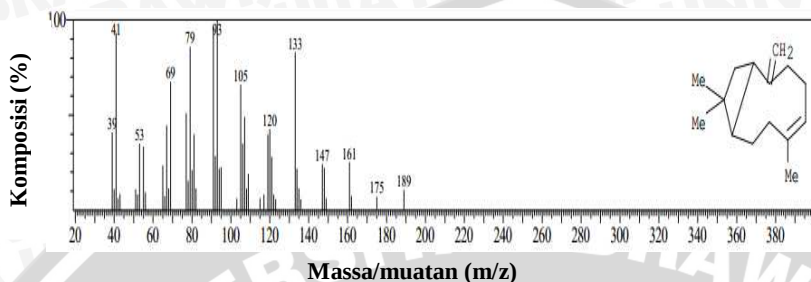
Nama komponen : β -pellandren
Berat molekul : 136
Rumus molekul : $C_{10}H_{16}$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.8 Senyawa 1,8-sineol



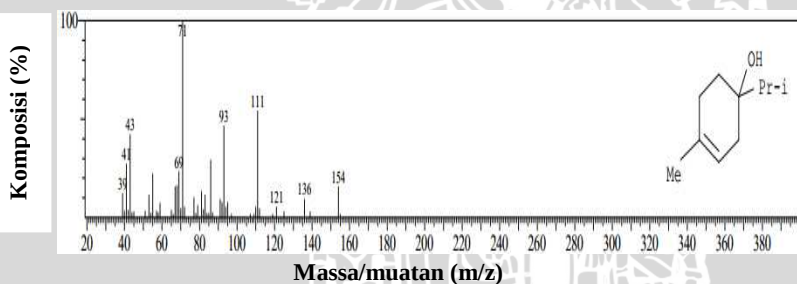
Nama komponen : 1,8-sineol
Berat molekul : 154
Rumus molekul : $C_{10}H_{18}O$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.9 Senyawa β -kariofilen



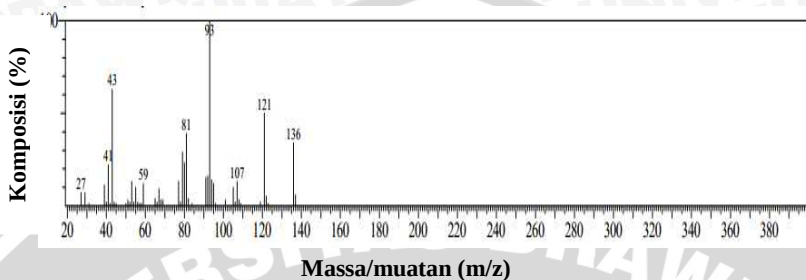
Nama komponen : β -kariofilen
Berat molekul : 204
Rumus molekul : $C_{15}H_{24}$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.10 Senyawa 4-terpineol



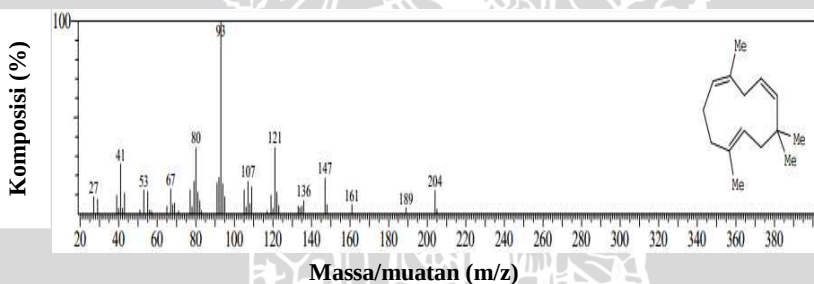
Nama komponen : 4-terpineol
Berat molekul : 154
Rumus molekul : $C_{10}H_{18}O$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.11 Senyawa osimenil asetat



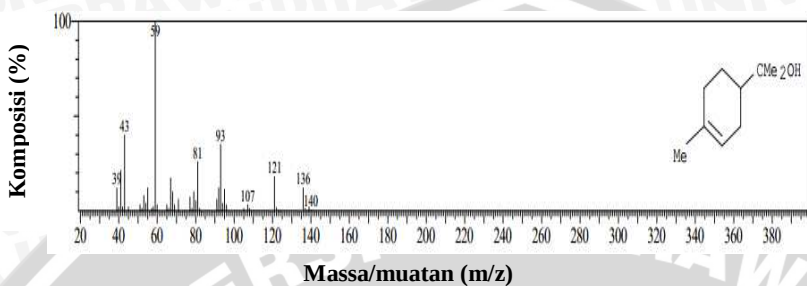
Nama komponen : osimenil asetat
Berat molekul : 194
Rumus molekul : $C_{12}H_{18}O_2$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.12 Senyawa α -humulen



Nama komponen : α -humulen
Berat molekul : 204
Rumus molekul : $C_{15}H_{24}$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.13 Senyawa α -terpineol



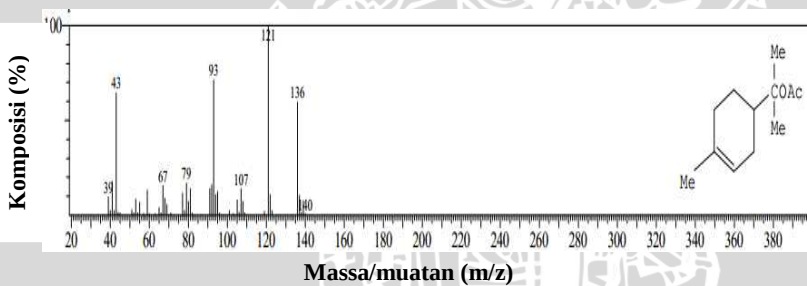
Nama komponen : α -terpineol

Berat molekul : 204

Rumus molekul : C₁₅H₂₄

Pustaka : WILEY229.LIB

D.14 Senyawa α -terpinenil asetat



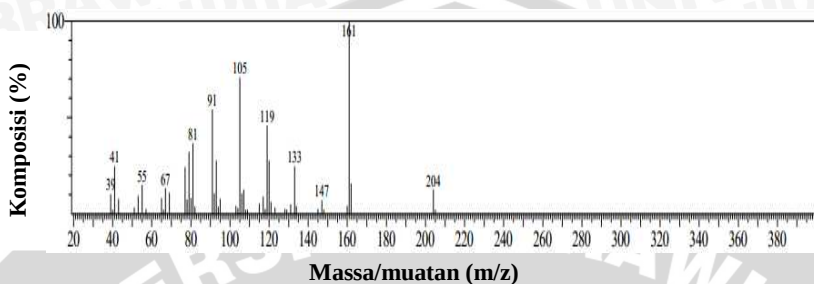
Nama komponen : α -terpinenil asetat

Berat molekul : 196

Rumus molekul : C₁₂H₂₀O₂

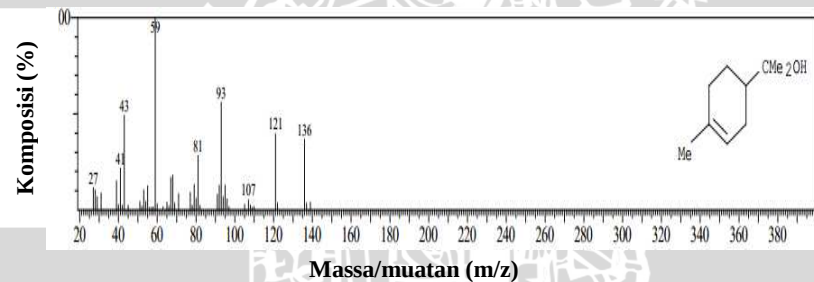
Pustaka : WILEY229.LIB

D.15 Senyawa germakren-d



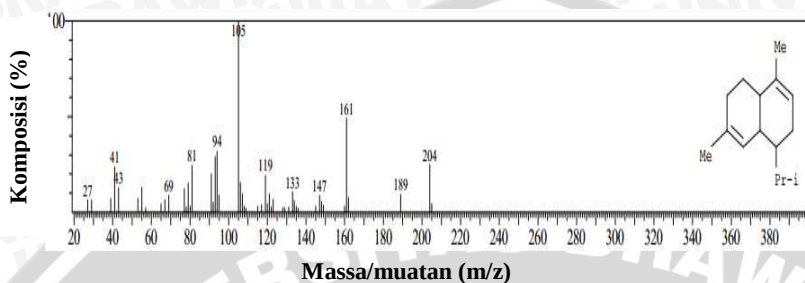
Nama komponen : germakren-d
Berat molekul : 204
Rumus molekul : $C_{15}H_{24}$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.16 Senyawa linalil propionat



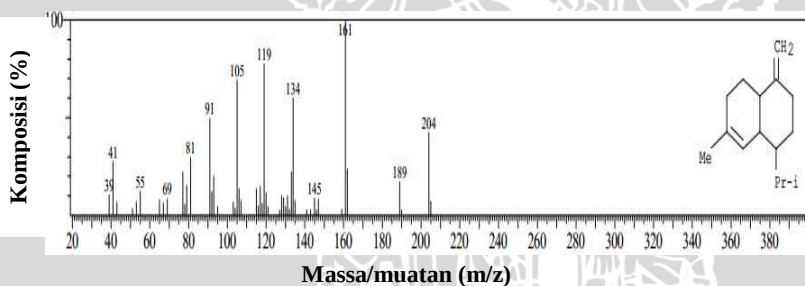
Nama komponen : linalil propionat
Berat molekul : 136
Rumus molekul : $C_{10}H_{16}$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.17 Senyawa α -muurolen



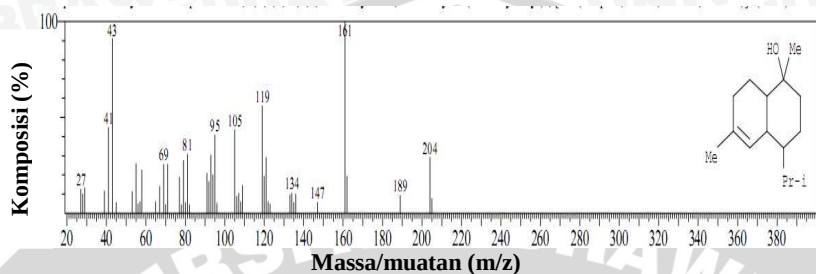
Nama komponen : α -muurolene
Berat molekul : 204
Rumus molekul : $C_{15}H_{24}$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.18 Senyawa δ -kadinen



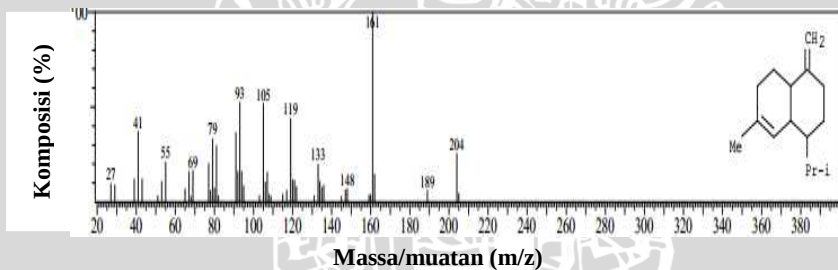
Nama komponen : δ -kadinen
Berat molekul : 204
Rumus molekul : $C_{15}H_{24}$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.19 Senyawa torreyol



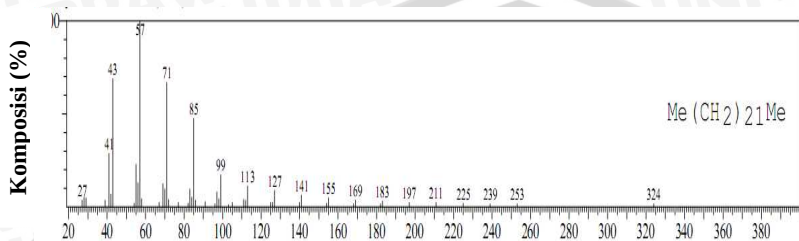
Nama komponen : torreyol
 Berat molekul : 222
 Rumus molekul : $C_{15}H_{26}O$
 Pustaka : WILEY229.LIB

D.20 Senyawa γ -muurolen



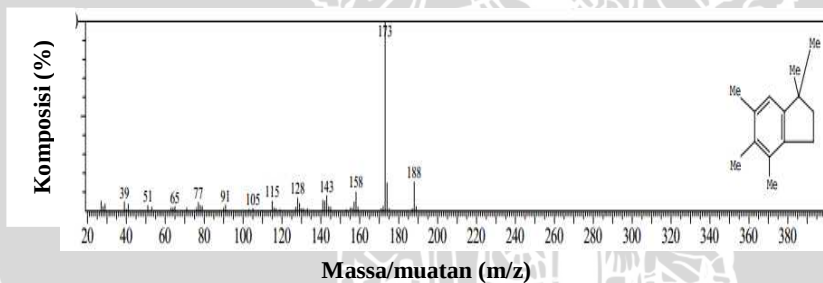
Nama komponen : γ -muurolen
 Berat molekul : 204
 Rumus molekul : $C_{15}H_{24}$
 Pustaka : WILEY229.LIB

D.21 Senyawa trikosan



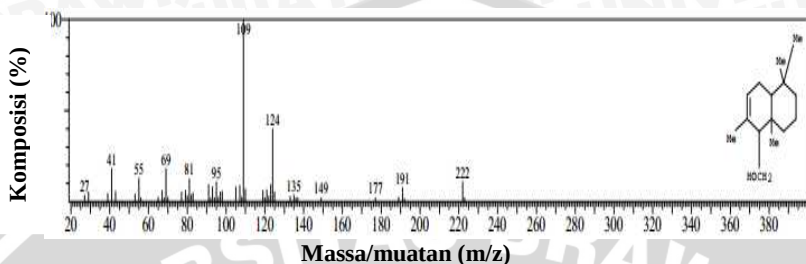
Nama komponen : tricosan
 Berat molekul : 324
 Rumus molekul : C₂₃H₄₈
 Pustaka : WILEY229.LIB

22. Senyawa 1,1,4,5,6-pentametil-2,3-dihidroinden



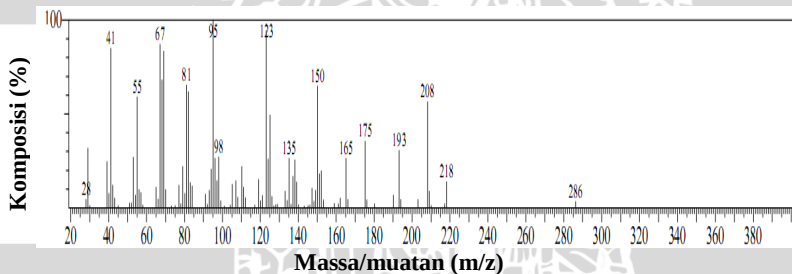
Nama komponen : 1,1,4,5,6-pentametil-2,3-dihidroinden
 Berat molekul : 188
 Rumus molekul : C₁₄H₂₀
 Pustaka : WILEY229.LIB

D.23 Senyawa driminol



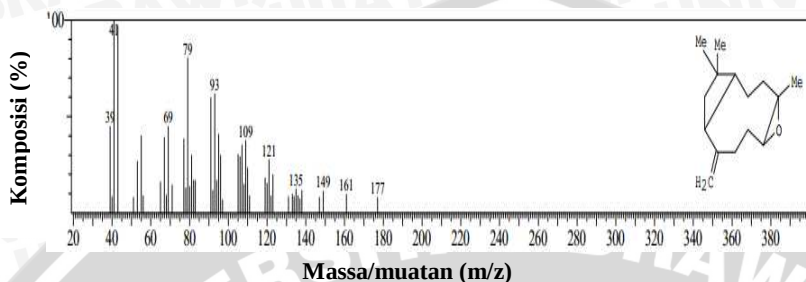
Nama komponen : driminol
Berat molekul : 222
Rumus molekul : $C_{15}H_{26}O$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.24 Senyawa 1-sikloheksan-1-butanal, $\alpha,2,6,6$ -tetrametil



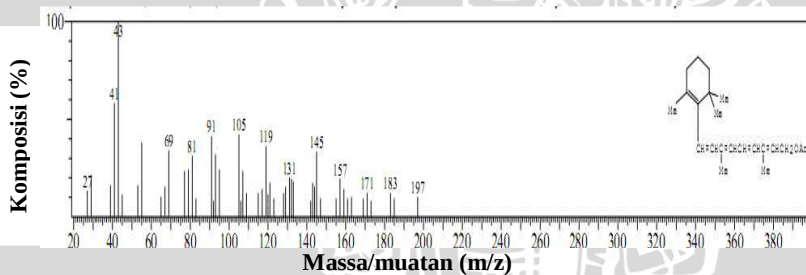
Nama komponen : 1-sikloheksan-1-butanal, $\alpha,2,6,6$ -tetrametil
Berat molekul : 208
Rumus molekul : $C_{14}H_{24}O$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.25 Senyawa kariofilen oksida



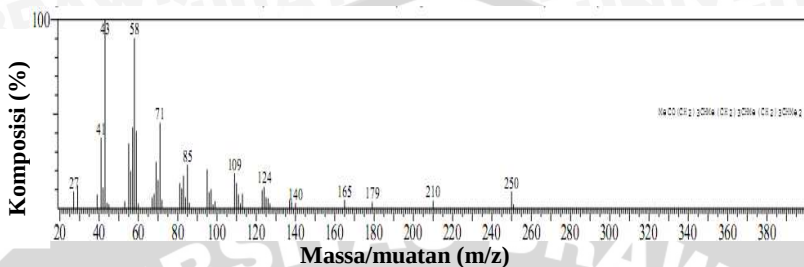
Nama komponen : kariofilen oksida
 Berat molekul : 220
 Rumus molekul : $C_{15}H_{24}O$
 Pustaka : WILEY229.LIB

D.26 Senyawa retinol asetat



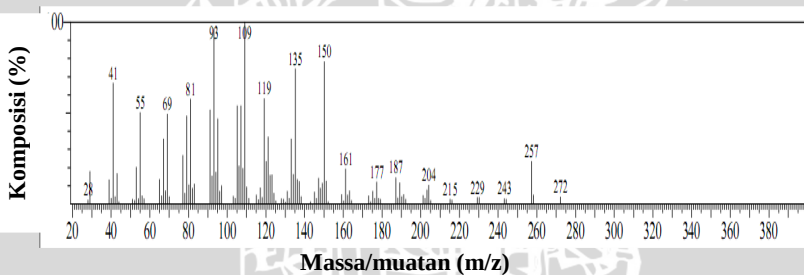
Nama komponen : retinol asetat
 Berat molekul : 328
 Rumus molekul : $C_{22}H_{32}O_2$
 Pustaka : WILEY229.LIB

D.27 Senyawa 6,10,14-trimetil-2-pentadekanon



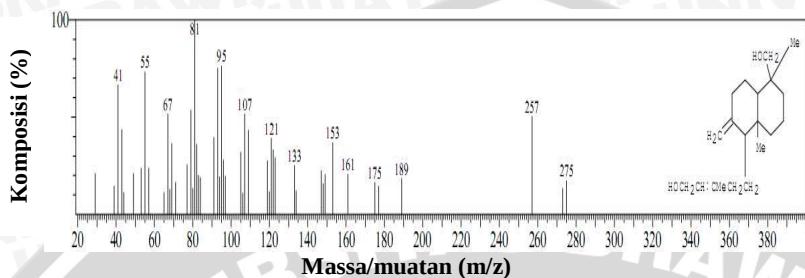
Nama komponen : 6,10,14-trimetil-2-pentadekanon
Berat molekul : 268
Rumus molekul : $C_{18}H_{36}O$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.28 Senyawa δ -guaien



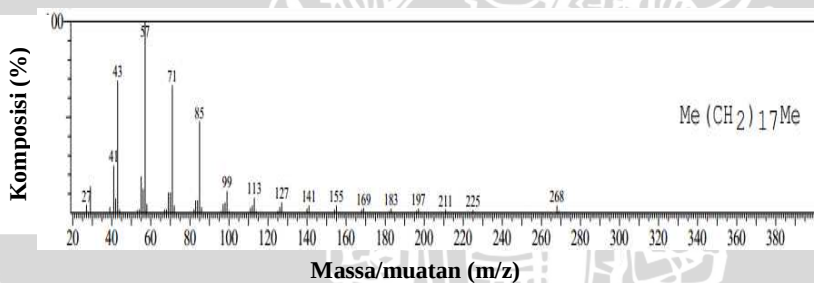
Nama komponen : δ -guaien
Berat molekul : 204
Rumus molekul : $C_{15}H_{24}$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.29 Senyawa kontortadiol



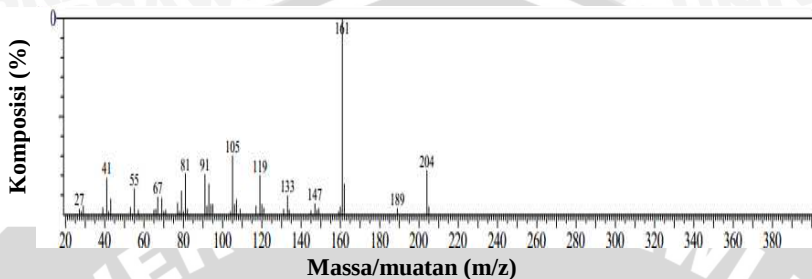
Nama komponen : kontortadiol
 Berat molekul : 306
 Rumus molekul : $\text{C}_{20}\text{H}_{24}\text{O}_2$
 Pustaka : WILEY229.LIB

D.30 Senyawa nonadekan



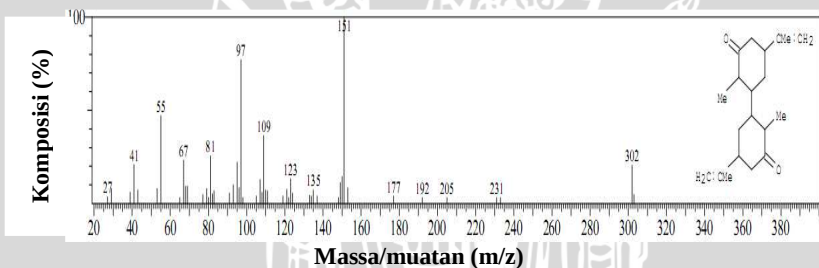
Nama komponen : nonadekan
 Berat molekul : 268
 Rumus molekul : $\text{C}_{19}\text{H}_{40}$
 Pustaka : WILEY229.LIB

D.31 Senyawa bisiklo [4.4.0]dec-1-en,2-isopropil-5-metil-9-metilen



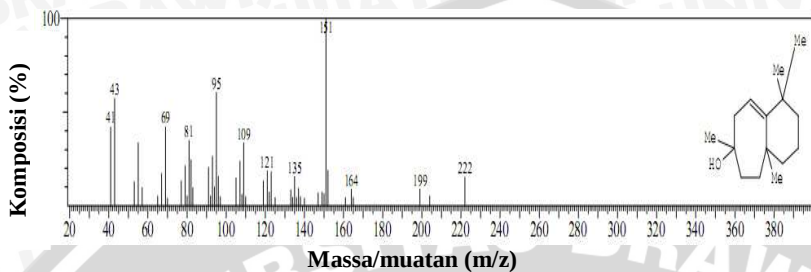
Nama komponen : bisiklo [4.4.0]dec-1-En,2-isopropil-5 metil
9-metilen
Berat molekul : 204
Rumus molekul : $C_{15}H_{24}$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.32 Senyawa α -dekarvelon



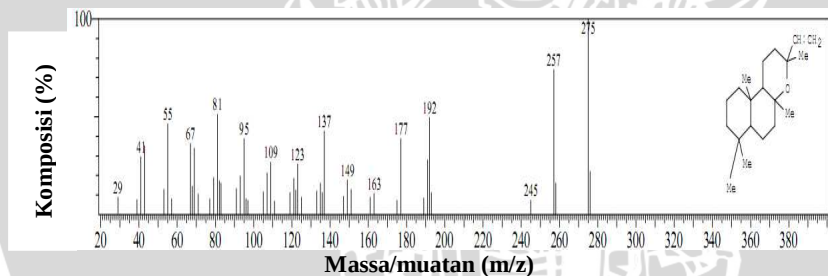
Nama komponen : α -dekarvelon
Berat molekul : 302
Rumus molekul : $C_{20}H_{30}O_2$
Pustaka : WILEY229.LIB

D. 33 Senyawa widdrol



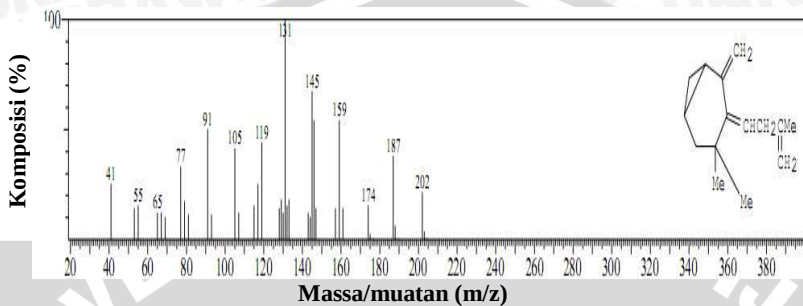
Nama komponen : widdrol
 Berat molekul : 222
 Rumus molekul : $C_{15}H_{25}O$
 Pustaka : WILEY229.LIB

D. 34 Senyawa manoil oksida



Nama komponen : manoil oksida
 Berat molekul : 290
 Rumus molekul : $C_{20}H_{34}O$
 Pustaka : WILEY229.LIB

D. 35 Senyawa 4,4-dimetil-3-(3-metil-3-buten-1-yliden)-2-metilidenbisiklo [4.1.0] heptan



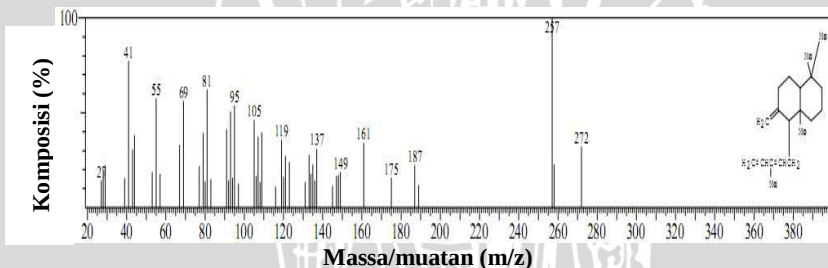
Nama komponen : 4,4-dimetil-3-(3-metil-3-buten-1-yliden)-2-metilidenbisiklo [4.1.0] heptan

Berat molekul : 202

Rumus molekul : $C_{15}H_{22}$

Pustaka : WILEY229.LIB

D.36 Senyawa biformen



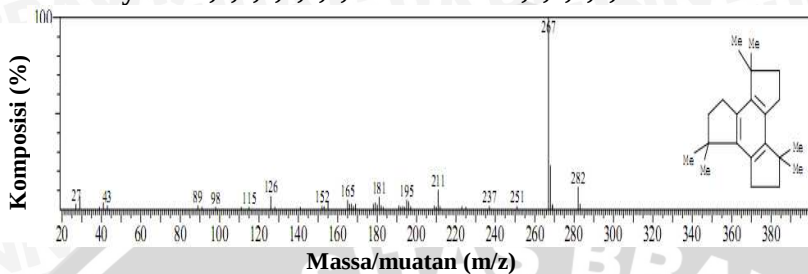
Nama komponen : biformen

Berat molekul : 272

Rumus molekul : $C_{20}H_{32}$

Pustaka : WILEY229.LIB

D.37 Senyawa 2,3,4,5,6,7,8,9-oktahidro-1,1,4,4,7,7-heksametil



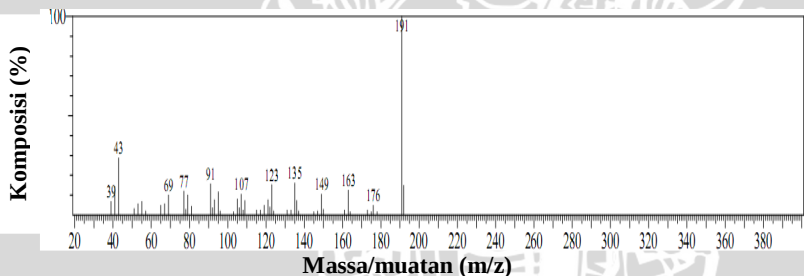
Nama komponen : 2,3,4,5,6,7,8,9-oktahidro-1,1,4,4,7,7-heksametil

Berat molekul : 282

Rumus molekul : $C_{21}H_{30}$

Pustaka : WILEY229.LIB

D.38 Senyawa β -isometil ionon



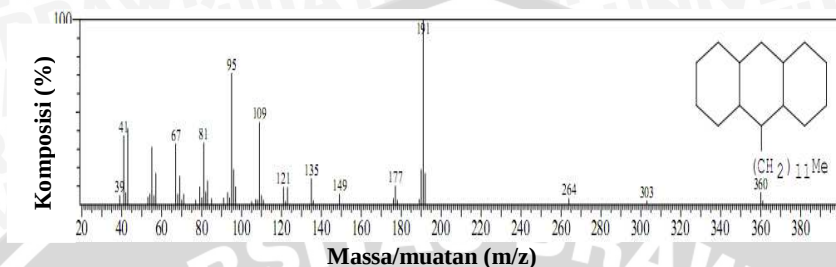
Nama komponen : β -isometil ionon

Berat molekul : 206

Rumus molekul : $C_{14}H_{22}O$

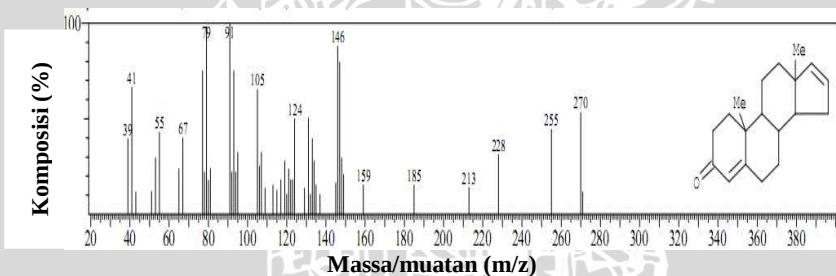
Pustaka : WILEY229.LIB

D.39 Senyawa antraken, 9-dodeksiltetradekahidro



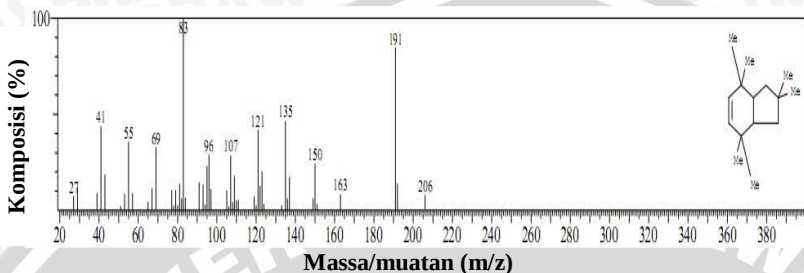
Nama komponen : antraken, 9-dodeksiltetradekahidro
 Berat molekul : 360
 Rumus molekul : C₂₆H₄₈
 Pustaka : WILEY229.LIB

D.40 Senyawa androsta-4,16-dien-3-one



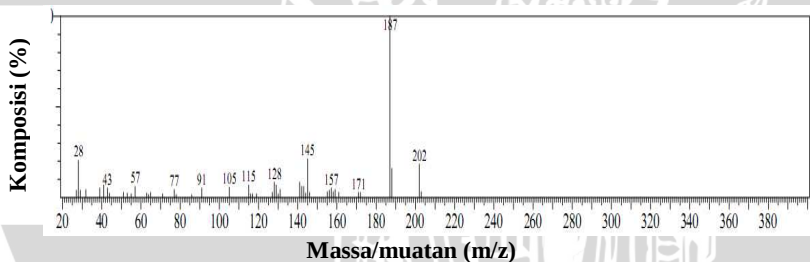
Nama komponen : androsta-4,16-dien-3-one
 Berat molekul : 270
 Rumus molekul : C₁₉H₂₆O
 Pustaka : WILEY229.LIB

D.41 Senyawa 1H-inden, 2,3,3a,4,7,7a-heksahidro-2,2,4,4,7,7-heksametil-, trans



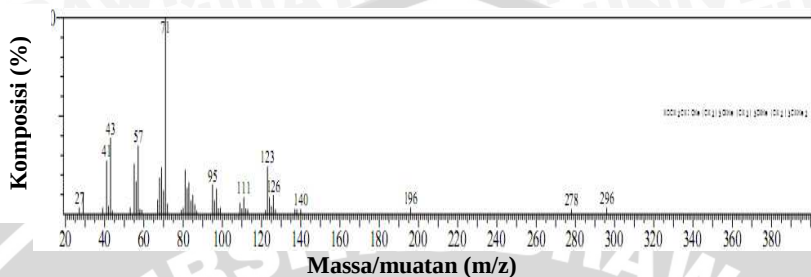
Nama komponen : 1H-inden, 2,3,3a,4,7,7a-heksahidro-
2,2,4,4,7,7-heksametil-, trans
Berat molekul : 206
Rumus molekul : $C_{15}H_{26}$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.42 Senyawa 1,1,2,3,3,5-heksametil-2,3-dihidroinden



Nama komponen : 1,1,2,3,3,5-heksametil-2,3-dihidroinden
Berat molekul : 202
Rumus molekul : $C_{15}H_{22}$
Pustaka : WILEY229.LIB

D.43 Senyawa 2-heksadeken-1-ol



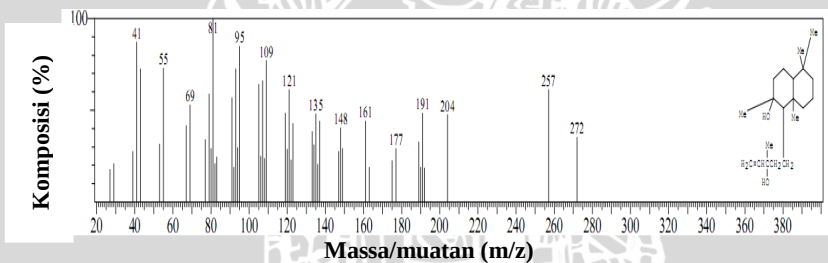
Nama komponen : 2-heksadeken-1-ol

Berat molekul : 298

Rumus molekul : $C_{20}H_{40}O$

Pustaka : WILEY229.LIB

D.44 Senyawa sklareol



Nama komponen : sklareol

Berat molekul : 308

Rumus molekul : $C_{20}H_{36}O_2$

Pustaka : WILEY229.LIB

Lampiran E. Perbedaan dan Persamaan Antara Minyak Legundi (*Vitex trifolia*) hasil pemisahan dengan gravitasi dan ekstraksi Lapisan Air

No.	Usulan Senyawa	Hasil pemisahan dengan grafitasi		Hasil ekstraksi lapisan air	
		Waktu Retensi	% komposisi	Waktu Retensi	% komposisi
1	α -pinen	3,131	4,50	-	-
2	metil toluen	-	-	3,475	0,66
3	β -pinen	4,132	1,70	4,152	0,44
4	sabinen	4,463	9,51	-	-
5	β -mirsen	5,202	0,68	-	-
6	limonen	5,947	0,43	-	-
7	β -pellandren	6,153	0,30	4,412	3,32
8	1,8-sineol	6,313	1,40	6,455	43,43
9	β -kariofilen	13,313	17,21	13,164	9,93
10	4-terpineol	-	-	13,531	2,88
11	osimenil asetat	14,025	0,22	-	-
12	α -humulen	14,193	1,39	14,208	0,42

13	α -terpineol	-	-	14,500	1,23
14	α -terpinenil asetat	14,720	7,90	14,734	5,88
15	germakren-d	14,783	1,45	-	-
16	linalil propionat	-	-	14,854	9,68
17	α -muurolen	14,875	0,20	-	-
18	δ -kadinen	15,240	0,69	-	-
19	torreyol	-	-	15,265	0,37
20	γ -muurolen	15,308	0,37	-	-
21	trikosan	15,780	0,56	24,635	2,21
22	1,1,4,5,6-pentametil-2,3-dihidroinden	17,335	0,55	-	-
23	driminol	18,155	0,44	-	-
24	1-sikloheksan-1-butanal, α ,2,6,6-tetrametil	18,250	0,36	-	-
25	kariofilen oksida	18,349	0,51	-	-
26	retinol asetat	18,682	2,40	18,737	0,81
27	6,10,14-trimetil-2-pentadekanon	19,467	0,21	-	-
28	δ -guaien	19,813	6,43	19,823	2,71
29	kontortadiol	19,900	0,58	-	-

30	nonadekan	-	-	19,926	0,82
31	bisiklo[4.4.0]dec-1-en, 2-isopropil-5-metil-9-metilen	20,058	0,22	-	-
32	α -dekarvelon	20,282	1,34	-	-
33	widdrol	-	-	20,345	0,42
34	manoil oksida	21,065	8,88	-	-
35	4,4-dimetil-3-(3-metil-3-buten-1-yliden)-2-metilidenbisiklo [4.1.0] heptan	21,154	0,94	-	-
36	biformen	21,914	0,87	-	-
37	2,3,4,5,6,7,8,9-oktahidro-1,1,4,4,7,7-heksametil	22,734	0,47	-	-
38	β -isometil ionon	23,076	5,40	-	-
39	antraken, 9-dodeksiltetradekahidro	-	-	23,165	3,49
40	androsta-4,16-dien-3-one	23,500	1,24	-	-
41	1H-inden, 2,3,3a,4,7,7a-heksahidro-2,2,4,4,7,7-heksametil-, trans	24,254	7,52	24,331	2,96
42	1,1,2,3,3,5-heksametil-2,3-dihidroinden	24,505	2,35	-	-

43	2-heksadeken-1-ol	25,399	2,53	-	-
44	sklareol	27,360	0,54	-	-

Lampiran F. Perbandingan % komposisi Antara Minyak atsiri dari daun Legundi (*Vitex trifolia*) hasil pemisahan dengan gravitasi, ekstraksi lapisan air, dan hasil distilasi air (literatur)

no	Nama senyawa	% komposisi Hasil penelitian		
		1	2	3
1	α -thujen	-	-	0,6
2	β -pinen	1,70	0,44	
3	α -pinen	4,50	-	23,9
4	sabinen	9,51	-	24,6
5	mirsen	-	-	0,8
6	β -mirsen	0,68	-	-
7	α -terpinen	-	-	0,8
8	p-simen	-	-	1,1
9	limonen	0,43	-	7,7
10	γ -terpinen	-	-	1,8
11	terpinen-4-ol	-	-	3,4
12	lavandulil asetat	-	-	1,3

13	timol	-	-	1,7
14	β -kariofilen	17,21	9,93	10,5
15	(z)- β -farnesen	-	-	5,7
16	β -salinen	-	-	1,5
17	α -salinen	-	-	2,2
18	elemol	-	-	3,5
19	kariofilen oksida	0,51	-	2,2
20	terreyol	-	0,37	1,1
21	β -eudesmol	-	-	1,8
22	α -eudesmol	-	-	0,7
23	β -pellandren	0,30	3,32	
24	1,8-sineol	1,40	43,43	-
25	osimenil asetat	0,22	-	-
26	α -humulen	1,39	0,42	-
27	α -terpinenil asetat	7,90	5,88	-
28	germakren-d	1,45	-	-
29	α -muurolen	0,20	-	-
30	δ -kadinen	0,69	-	-
31	γ -muurolen	0,37	-	-

32	1,1,4,5,6-pentametil-2,3-dihidroinden	0,55	-	-
33	driminol	0,44		
34	δ -guaien	6,97	3,47	
35	bisiklo[4.4.0]dec-1-en, 2-isopropil-5-metil-9-metilen	0,22	-	-
36	sklareol	4,87	-	-
37	2-heksadesen-1-ol	2,53	-	-
38	metil toluen	-	0,66	-
39	4-terpineol	-	2,88	-
40	α -terpineol	-	1,23	-
41	linalil propionat	-	9,68	-
42	nonakosan	-	1,10	-
43	trikosan	0,56	2,21	-
44	1-sikloheksan-1-butanal, α ,2,6,6-tetrametil	0,36	-	-
45	retinol asetat	2,40	0,81	-
46	6,10,14-trimetil-2-pentadekanon	0,21	-	-
47	kontortadiol	0,58	-	-
48	nonadekan	-	0,82	-
49	α -dekarvelon	1,34	-	-
50	widdrol	-	0,42	-

51	manoil oksida	8,88	-	-
52	4,4-dimetil-3-(3-metil-3-buten-1-yliden)-2-metilidenbisiklo [4.1.0] heptan	0,94	-	-
53	biformen	0,87	-	-
54	2,3,4,5,6,7,8,9-oktahidro-1,1,4,4,7,7-heksametil	0,47	-	-
55	β -isometil ionon	5,40	-	-
56	antraken, 9-dodeksiltetradekahidro	-	3,49	-
57	androsta-4,16-dien-3-one	1,24	-	-
58	1H-inden, 2,3,3a,4,7,7a-heksahidro-2,2,4,4,7,7-heksametil-, trans	7,52	2,96	-
59	1,1,2,3,3,5-heksametil-2,3-dihidroinden	2,35	-	-

Keterangan : 1. % komposisi komponen penyusun minyak atsiri dari pemisahan dengan grafitasi yang terdeteksi
 2. % komposisi komponen penyusun minyak atsiri dari ekstraksi distilat
 3. % komposisi komponen penyusun minyak atsiri dari literature dengan menggunakan distilasi air