

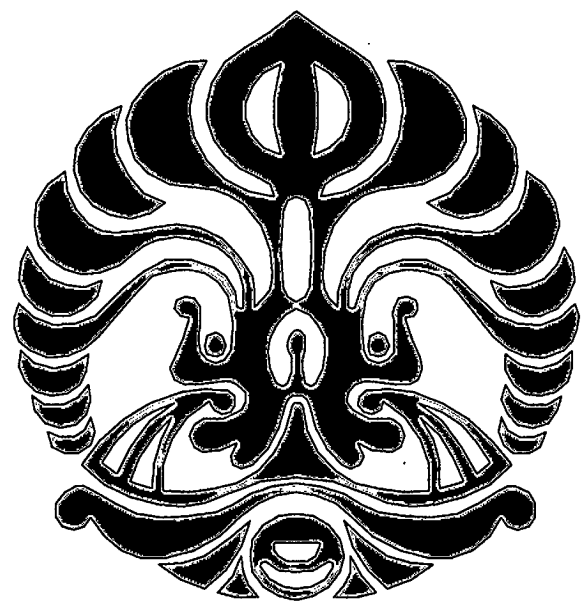
Softcopy

**REKAYASA MINYAK JARAK (*JATROPHA OIL*)  
MENJADI BAHAN BAKAR SETARA SOLAR  
MELALUI PROSES *THERMAL CRACKING***

**TESIS**

Oleh:

**ELFI NUR ROHMAH**  
**0606004092**



**DEPARTEMEN TEKNIK KIMIA  
FAKULTAS TEKNIK UNIVERSITAS INDONESIA  
JUNI 2008**

**PERPUSTAKAAN  
UNIVERSITAS INDONESIA**

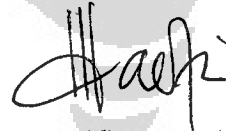
## PERNYATAAN KEASLIAN TESIS

Saya menyatakan dengan sesungguhnya bahwa tesis dengan judul:

**Rekayasa Minyak Jarak (*Jatropha Oil*) menjadi Bahan Bakar Setara Solar  
Melalui Proses *Thermal Cracking***

Yang dibuat untuk melengkapi persyaratan menjadi Master Teknik pada Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia, sejauh yang saya ketahui bukan merupakan tiruan atau duplikasi dari penelitian yang sudah dipublikasikan dan atau pernah dipakai untuk mendapatkan gelar kesarjanaan dilingkungan Universitas Indonesia maupun di Perguruan Tinggi dan Instansi manapun, kecuali bagian sumber informasinya dicantumkan sebagaimana mestinya

Depok, 24 Juni 2008



(Elfi Nur Rohmah)  
NPM.0606004092

# LEMBAR PENGESAHAN

Tesis dengan judul :

**Rekayasa Minyak Jarak (*Jatropha Oil*) menjadi Bahan Bakar Setara Solar  
Melalui Proses *Thermal Cracking***

Dibuat untuk melengkapi persyaratan mendapat gelar Master Teknik pada Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia dan disetujui untuk diajukan dalam sidang ujian tesis.

Depok, 24 Juni 2008  
Dosen Pembimbing,



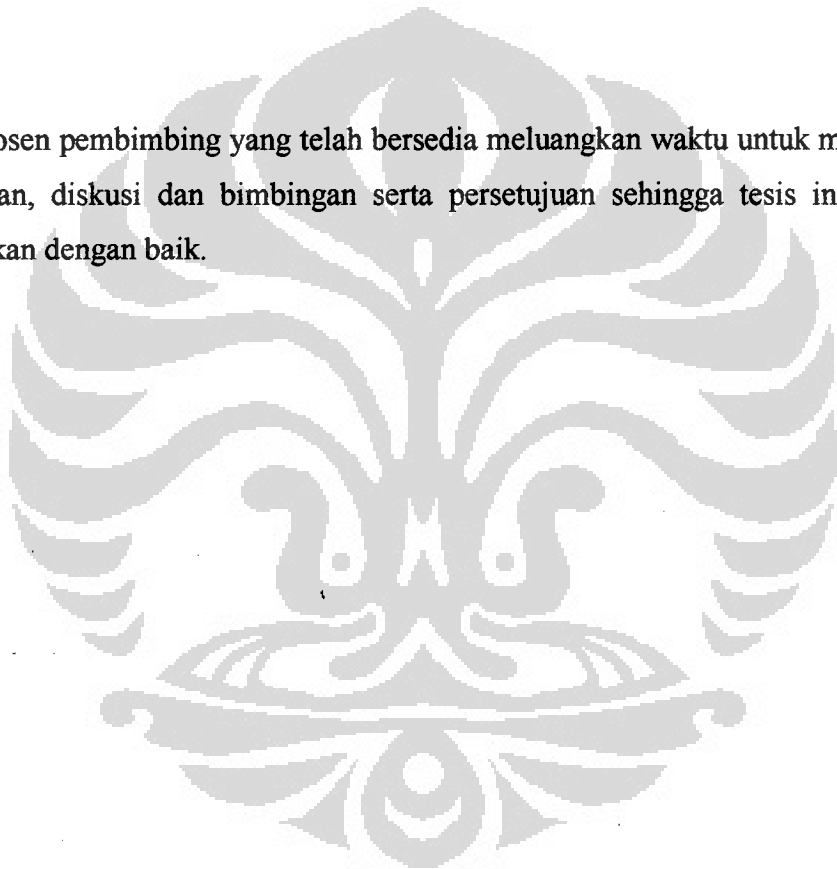
(Prof. Dr. Ir. M. Nasikin, M. Eng)  
NIP. 130 644 936

## **UCAPAN TERIMA KASIH**

Alhamdulillahirobbil'alamin tesis ini dapat penulis selesaikan.  
Dengan rasa hormat penulis menyampaikan rasa terimakasih kepada:

**Prof.Dr.Ir.M.Nasikin.,M.Eng**

Selaku dosen pembimbing yang telah bersedia meluangkan waktu untuk memberi pengarahan, diskusi dan bimbingan serta persetujuan sehingga tesis ini dapat diselesaikan dengan baik.



## ABSTRAK

Elfi Nur Rohmah

0606004092

Departemen Teknik Kimia

Dosen Pembimbing:

Prof.Dr.Ir.M.Nasikin.,M.Eng

### **REKAYASA MINYAK JARAK (*JATROPHA OIL*) MENJADI BAHAN BAKAR SETARA SOLAR MELALUI PROSES *THERMAL CRACKING***

Krisis bahan bakar fosil di Indonesia telah terlihat indikasinya dengan terjadinya kelangkaan dan kenaikan harga bahan bakar. Untuk mengatasi krisis tersebut maka diperlukan upaya untuk mencari sumber bahan bakar alternatif. Salah satu sumber bahan bakar alternatif adalah minyak jarak (*Jatropha oil*).

Penggunaan minyak jarak menjadi pengganti minyak solar menghadapi kendala karena viskositas minyak jarak jauh lebih tinggi dari minyak solar. Minyak jarak telah dicoba pemakaiannya pada mesin diesel dengan memanfaatkan konverter yang dapat menurunkan viskositas melalui pemanasan. Namun penggunaan konverter tersebut masih mengalami kendala pada kondisi suhu lingkungan tertentu. Oleh karena itu perlu dilakukan pengembangan lebih lanjut untuk merekayasa minyak jarak menjadi biosolar yang memiliki sifat setara solar komersial.

Dari penelitian mengenai perengkahan minyak sawit yang dilaporkan peneliti sebelumnya, rantai hidrokarbon panjang yang berupa trigliserida dapat terengkah tanpa katalis (*thermal cracking*). Penelitian ini bertujuan untuk merengkah minyak jarak menjadi bahan bakar setara solar (biosolar) yang mengandung senyawa hidrokarbon dengan rantai karbon lebih pendek, memiliki viskositas lebih rendah dan dapat langsung dipakai pada mesin diesel.

Penelitian *thermal cracking* ini menggunakan minyak jarak semi mulus (*straight jatropa oil* atau *SJO*) sebagai reaktan dan reaktor *semi batch* yang dibuat dari bahan *stainlesssteel*. Sebelum reaksi,  $O_2$  dalam reaktor dipurge menggunakan  $N_2$ . Perengkahan dilakukan pada suhu operasi (T)  $325\text{ }^{\circ}\text{C}$  hingga  $375\text{ }^{\circ}\text{C}$ , dan waktu (t) 5 hingga 30 menit. Analisis terhadap produk *thermal cracking*, diberi nama biosolar, dilakukan untuk mengetahui perubahan karakteristik biosolar terhadap komponen penyusun, densitas, viskositas, angka setana dan bilangan iodin dengan analisis menggunakan FTIR, GC-MS, ASTM D 445-7, ASTM D 1298, dan ASTM D 613-95

Hasil analisa menunjukkan komponen utama biosolar adalah senyawa hidrokarbon dengan jumlah C antara 5 s/d 29, dengan komposisi dominan berupa senyawa hidrokarbon tak jenuh. Dengan reaksi *thermal cracking* terjadi perubahan karakteristik pada Biosolar. Pengaruh suhu dan waktu reaksi pada karakteristik biosolar sangat kompleks. Pada setiap suhu mempunyai karakter tersendiri.

Suhu  $325\text{ }^{\circ}\text{C}$  mempunyai kecenderungan, belum terjadi perengkahan rantai panjang tak jenuh  $C_{24:6}$  secara keseluruhan, menyebabkan viskositas, densitas belum turun secara signifikan. Terbukti dari analisa FTIR dan GC-MS, masih ditemukan senyawa  $C_{24:6}$  pada biosolar yang dihasilkan pada suhu ini. Suhu

350°C mempunyai karakter, terjadi perengkahan pada SJO hingga menghasilkan senyawa hidrokarbon jenuh C5 s/d C24. Hal ini menyebabkan viskositas mengalami penurunan hingga 20 poin dibandingkan dengan SJO, dari 66.0270 cSt menjadi 45.8817cSt<sub>(40°C)</sub>, sedangkan untuk densitas penurunan juga belum signifikan. Suhu 375°C mempunyai kecenderungan terjadi reaksi perengkahan hingga berlanjut reaksi pembentukan senyawa olefin, terbentuk senyawa C11:1 s/d C29:1 yang diindikasikan dengan kenaikan viskositas hingga 60 poin dibandingkan SJO, dari 66.0270 menjadi 119.0428 cSt<sub>(40°C)</sub>.

Angka setana dari biosolar secara keseluruhan mengalami penurunan, kecuali pada suhu 350°C, waktu reaksi 5-10 menit dari 38.4626 menjadi 39.3899 dan 40.0082. Demikian juga untuk bilangan iodine. Hal ini disebabkan senyawa penyusun biosolar C18:2 berubah menjadi C18:1.

Studi kinetika dilakukan untuk reaksi *thermal cracking SJO* menjadi biosolar pada suhu 325-375°C memiliki konstanta laju reaksi sebesar  $3.9 \times 10^{-03} - 2.0 \times 10^{-01} \text{ (min}^{-1}\text{)}$ , dengan orde reaksi 1 sampai 2.1. Sedangkan untuk energi aktivasi yang diperlukan untuk berlangsungnya reaksi tersebut sebesar  $4.8355 \times 10^4 \text{ J/grmol}$ .

Karakteristik biosolar menunjukkan terjadinya reaksi *thermal cracking* pada SJO, apabila biosolar diplikasikan pada mesin *automotive diesel* sudah dapat digunakan dan karakteristiknya identik atau setara dengan solar komersial, dimana densitas biosolar menjadi  $0.8548 \text{ gr/cm}^3$  dan viskositas menjadi 3.77 cSt

**Kata kunci:** minyak jarak, *thermal cracking*, biosolar

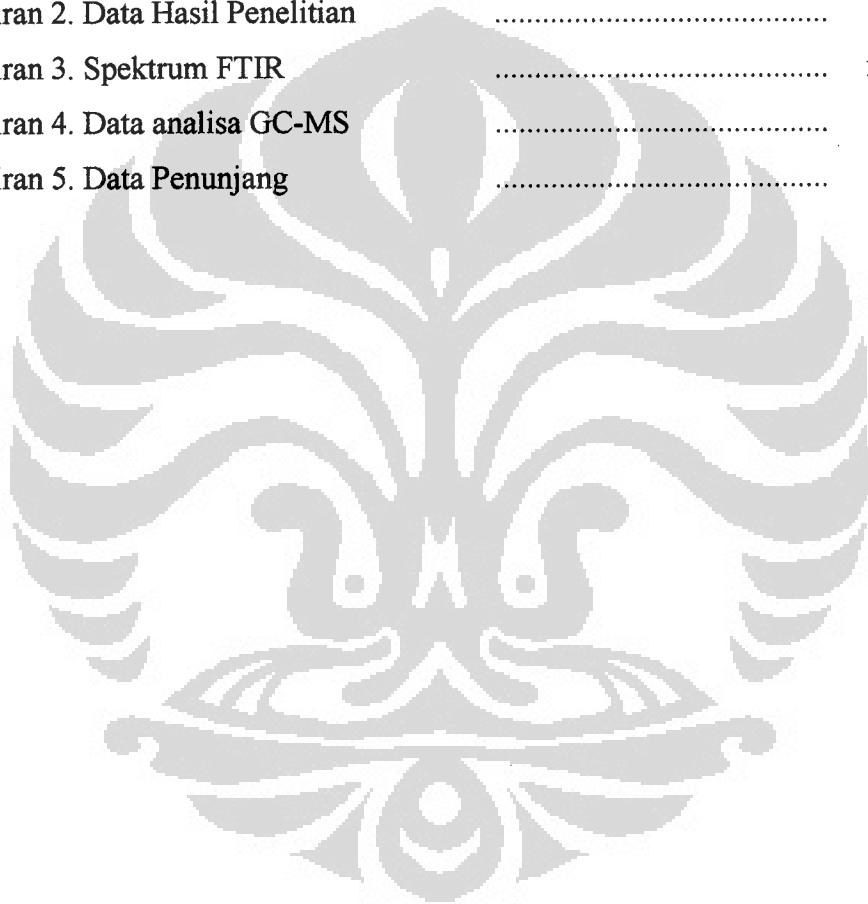
## Daftar Isi

Pernyataan Keaslian Tesis	.....	i
Lembar pengesahan	.....	ii
Ucapan Terima Kasih	.....	iii
Abstraks	.....	iv
Daftar isi	.....	vi
Daftar gambar	.....	ix
Daftar tabel	.....	x
Daftar lampiran	.....	xii
Daftar singkatan	.....	xii
Daftar istilah/symbol	.....	xiii
<b>BAB. I. Pendahuluan</b>		
1.1. Latar belakang	.....	1
1.2. Rumusan masalah	.....	3
1.3. Tujuan penelitian	.....	3
1.4. Hipotesa Penelitian	.....	3
1.5. Batasan masalah	.....	3
1.5. Sistematika penulisan	.....	4
<b>BAB. II. Tinjauan pustaka</b>		
2.1. Jarak		
2.1.1. Tanaman jarak	.....	5
2.1.2. Minyak jarak	.....	8
2.2. Trigliserida	.....	10
2.3. Ekspedisi Minyak Jarak	.....	12
2.4. <i>Thermal cracking</i>	.....	13
2.5. Peneliti pendahulu	.....	16
2.6. Bahan Bakar Mesin diesel	.....	17
2.7. Karakteristik Bahan Bakar		
2.7.1. Densitas	.....	18
2.7.2. Viskositas	.....	18
2.7.3. Angka setana	.....	19

2.7.4. Bilangan Iodin	.....	20
2.8. Minyak Solar	.....	21
2.9. FTIR dan GC-MS		
2.9.1. FTIR	.....	22
2.9.2. GC-MS	.....	23
2.10. Kinetika Reaksi	.....	24
<b>BAB. III. Metodologi penelitian</b>		
3.1. Tempat dan lokasi penelitian	.....	29
3.2. Tahap penelitian		
3.2.1. Tahap Persiapan Alat dan Bahan	.....	29
3.2.2. Tahap Blank Tes	.....	30
3.2.3. Tahap Reaksi Thermal cracking	.....	30
3.2.4. Tahap Analisa	.....	31
3.3. Tahap Pengolahan data	.....	34
3.4. Diagram alir penelitian	.....	35
3.5. Gambar Alat	.....	36
3.6. Gambar Sampel	.....	38
<b>BAB. IV. Hasil Dan Pembahasan</b>		
4.1. Analisa Penelitian	.....	41
4.1.1. Persiapan alat	.....	41
4.1.2. Sifat Fisik dan kimiawi SJO	.....	41
4.1.3. Penentuan tekanan awal	.....	42
4.1.4. Senyawa penyusun SJO	.....	44
4.1.5. Tahap Thermal cracking	.....	44
4.1.6. Densitas dan viskositas biosolar	.....	44
4.2. Analisa Komponen Penyusun Produk Thermal cracking		
4.2.1. Analisa FTIR	.....	46
4.2.2. Analisa GC-MS	.....	54
4.2.3. Pengaruh suhu dan waktu reaksi terhadap komp. penyusun	.....	56
4.3. Karakterisasi Produk Thermal cracking		
4.3.1. Densitas	.....	61
4.3.2. Viskositas	.....	63



4.3.3. Bil. Iodine .....	64
4.3.4. Angka Setana .....	65
4.3.5. Yield .....	67
4.4. Kinetika Reaksi .....	71
4.5. Perbandingan antara SJO, Biosolar dan Solar Komersial.....	76
BAB V. Kesimpulan .....	78
Daftar pustaka .....	xiv
Lampiran 1. Form .....	xvi
Lampiran 2. Data Hasil Penelitian .....	xvii
Lampiran 3. Spektrum FTIR .....	xviii
Lampiran 4. Data analisa GC-MS .....	xix
Lampiran 5. Data Penunjang .....	xx



## Daftar Gambar

Gambar 2.1 Jarak pagar .....	6
Gambar 2.2 Bunga tanaman jarak .....	6
Gambar 2.3. Biji tanaman jarak .....	7
Gambar 2.4. Struktur dari triglyserida .....	10
Gambar 2.5. Beberapa tipe rantai carbon dalam minyak jarak.....	10
Gambar 2.6. Triolein .....	11
Gambar 2.7. Fenomena Reaksi Thermal Cracking pada parafin .....	13
Gambar 2.8. Pembentukan radikal bebas pada proses Thermal cracking	14
Gambar 2.9. Skema Alat FTIR .....	22
Gambar 2.10 Skema Alat GC-MS .....	23
Gambar 3.1. Diagram Alir Penelitian .....	33
Gambar 3.2. Alat Tahap Blank Tes dan Reaksi Thermal cracking .....	35
Gambar 3.3. Alat FTIR .....	35
Gambar 3.4. Alat untuk analisa Densitas .....	36
Gambar 3.5. Alat untuk Analisa Viskositas .....	36
Gambar 3.6. Alat untuk Analisa Bil. Iodin .....	37
Gambar 3.7. Alat GC-MS .....	37
Gambar 3.8. SJO dan Solar .....	38
Gambar 3.9. Produk thermal cracking T325 .....	38
Gambar 3.10. Produk thermal cracking T350.....	39
Gambar 3.11. Produk thermal cracking T375.....	39
Gambar 4.1. Grafik Tekanan vs Temperatur pada reaksi TC.....	43
Gambar 4.2. Spektrum FTIR SJO dan Produk thermal cracking .....	48
Gambar 4.3. Absorbansi vs T Spektrum FTIR komponen (-CH <sub>3</sub> ).....	49
Gambar 4.4. Absorbansi vs T Spektrum FTIR komponen (-CH <sub>2</sub> ) .....	50
Gambar 4.5. Absorbansi vs T Spektrum FTIR komponen (C=C).....	51
Gambar 4.6. Absorbansi vs T Spektrum FTIR komponen (O-C=O).....	52
Gambar 4.7. Absorbansi vs T Spektrum FTIR komponen (CH <sub>2</sub> ) <sub>n</sub> .....	53
Gambar 4.8. Komposisi produk vs temperatur untuk t= 5 menit.....	56
Gambar 4.9. Komposisi produk vs temperatur untuk t= 10 menit.....	56

Gambar 4.10. Komposisi produk vs temperatur untuk $t= 15$ menit.....	57
Gambar 4.11. Komposisi produk vs temperatur untuk $t= 30$ menit.....	57
Gambar 4.12. Komposisi produk vs waktu reaksi untuk $T= 325$ .....	59
Gambar 4.13. Komposisi produk vs waktu reaksi untuk $T= 350$ .....	59
Gambar 4.14. Komposisi produk vs waktu reaksi untuk $T= 375$ .....	60
Gambar 4.15. Grafik hubungan densitas vs temperature operasi .....	62
Gambar 4.16. Grafik hubungan densitas vs temperature operasi .....	62
Gambar 4.17. Grafik hubungan Viskositas vs temperature operasi.....	63
Gambar 4.18. Grafik hubungan Viskositas vs waktu operasi.....	63
Gambar 4.19. Grafik Bil. Iodin vs Waktu reaksi.....	64
Gambar 4.20. Grafik Bil. Iodin vs Temperatur reaksi.....	65
Gambar 4.21. Grafik CN vs Temperatur .....	66
Gambar 4.22. Grafik CN vs waktu operasi .....	66
Gambar 4.23. Grafik yield vs temperature pada $t= 5$ menit.....	67
Gambar 4.24. Grafik yield vs temperature pada $t= 10$ menit.....	68
Gambar 4.25. Grafik yield vs temperature pada $t= 15$ menit.....	68
Gambar 4.26. Grafik yield vs temperature pada $t= 30$ menit.....	69
Gambar 4.27 Grafik hubungan antara $\ln Y$ vs $\ln C_A$ .....	73
Gambar 4.28 Grafik hubungan antara $\ln k$ dengan $T^{-1}$ .....	76

## Daftar Tabel

Tabel 1.1. Cadangan dan umur sumber energi non renewable .....	1
Tabel 2.1 Kandungan tumbuhan jarak yang di pergunakan .....	7
Tabel 2.2 Komposisi asam lemak dalam minyak jarak .....	8
Tabel 2.3. Sifat fisik dan kimiawi minyak jarak.....	9
Tabel.2.4. Perbandingan antara biodiesel, minyak jarak dan Solar terhadap performa mesin diesel.....	12
Tabel 2.5. Produk cracking pada penelian billaut.....	15
Tabel 2.6. Penelitian yang digunakan sebagai acuan proses pengolahan minyak jarak agar setara solar .....	16
Tabel 2.7. Perbedaan karakteristik Minyak Solar dan Minyak diesel .....	18
Tabel 2.8. Sifat Fisik Minyak solar .....	21
Tabel 4.1. Sifat Fisik dan kimia SJO .....	42
Tabel 4.2. Komposisi SJO .....	44
Tabel 4.3 Densitas Produk Thermal craking .....	45
Tabel 4.4. Viskositas Produk Thermal cracking.....	45
Tabel 4.5. Spektrum FTIR SJO dan Produk thermal cracking .....	48
Tabel 4.6. Data Analisa GC-MS .....	59
Tabel 4.7. Karakterisasi Produk thermal cracking.....	61
Tabel 4.8. Yield Reaksi Thermal Cracking SJO.....	67
Tabel 4.9. Pengolahan data Kinetika reaksi .....	71
Tabel 4.10. Harga k dan orde reaksi .....	73
Tabel 4.11. Tabel Ea untuk tiap suhu reaksi .....	75
Tabel 4.12. Karakteristik SJO, Biosolar dan Solar Komersial .....	76

## Daftar Lampiran

Lampiran 1. Form .....	xvi
1. Form Jurnal konsultasi Tesis	
2. Form Keterangan Bebas Pinjam Peralatan	
3. Form Surat Keterangan Bebas Pinjam Peralatan Laboratorium	
4. Form Bebas Pinjaman Buku Perpustakaan	
Lampiran 2. Data Hasil Penelitian .....	xvii
1. Analisa Densitas	
2. Analisa Viskositas	
3. Analisa Bil. Iodine	
4. Analisa Angka Setana	
5. Yield Reaksi	
6. Kinetika Reaksi	
Lampiran 3. Record FTIR .....	xviii
1. Spektrum FTIR Minyak Jarak	
2. Spektrum FTIR untuk $T=325^{\circ}\text{C}$	
3. Spektrum FTIR untuk $T=350^{\circ}\text{C}$	
4. Spektrum FTIR untuk $T=325^{\circ}\text{C}$	
Lampiran 4. Data analisa GC-MS .....	xix
1. Data GC-MS untuk Komponen Solar	
2. Data GC-MS untuk Komponen Minyak Jarak	
3. Data GC-MS Komponen untuk Produk Thermal Cracking pada kondisi operasi $T=325^{\circ}\text{C}$ dan $t=5$ menit	
4. Data GC-MS Komponen untuk Produk Thermal Cracking pada kondisi operasi $T=325^{\circ}\text{C}$ dan $t=10$ menit	
5. Data GC-MS Komponen untuk Produk Thermal Cracking pada kondisi operasi $T=325^{\circ}\text{C}$ dan $t=15$ menit	

6. Data GC-MS Komponen untuk Produk Thermal Cracking pada kondisi operasi  $T=325^{\circ}\text{C}$  dan  $t= 30$  menit
7. Data GC-MS Komponen untuk Produk Thermal Cracking pada kondisi operasi  $T=350^{\circ}\text{C}$  dan  $t= 5$  menit
8. Data GC-MS Komponen untuk Produk Thermal Cracking pada kondisi operasi  $T=350^{\circ}\text{C}$  dan  $t= 10$  menit
9. Data GC-MS Komponen untuk Produk Thermal Cracking pada kondisi operasi  $T=350^{\circ}\text{C}$  dan  $t= 15$  menit
10. Data GC-MS Komponen untuk Produk Thermal Cracking pada kondisi operasi  $T=350^{\circ}\text{C}$  dan  $t= 30$  menit
11. Data GC-MS Komponen untuk Produk Thermal Cracking pada kondisi operasi  $T=375^{\circ}\text{C}$  dan  $t= 5$  menit
12. Data GC-MS Komponen untuk Produk Thermal Cracking pada kondisi operasi  $T=375^{\circ}\text{C}$  dan  $t= 10$  menit
13. Data GC-MS Komponen untuk Produk Thermal Cracking pada kondisi operasi  $T=375^{\circ}\text{C}$  dan  $t= 15$  menit
14. Data GC-MS Komponen untuk Produk Thermal Cracking pada kondisi operasi  $T=375^{\circ}\text{C}$  dan  $t= 30$  menit

Lampiran 5. Data Penunjang ..... xx

## Daftar Singkatan

ADO	: Automotive Diesel Oil
SJO	: Straight Jatropa Oil
ASTM	: American Standart Term Mean
API	: American Petroleum Institute
ml	: milliliter
min	: minimum
max	: maksimum
cP	: centi poise
cSt	: centi stoke
gr	: gram
mg	: miligram
C	: celcius
F	: Fahrenheit



## Daftar Istilah/Simbul

P	: Tekanan
t	: Waktu
T	: Suhu
w/V	: Perbandingan antara massa dan volume
$\rho_1$	: Densitas senyawa referensi
$\rho_2$	: Densitas sampel
$\mu_1$	: Viskositas senyawa referensi
$\mu_2$	: Viskositas sampel
$t_1$	: Waktu senyawa referensi melewati viskometer
$t_2$	: Waktu sampel melewati viskometer
CN	: Cetane Number (angka setana)
CI	: Cetane Index (Prediksi dari angka setana)
TT <sub>50</sub>	: Suhu diatilasi dalam derajat fahrenheit untuk 50% distilasi
G	: API gravity
cSt	: Senti stokes



# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1. Latar Belakang

Kenaikkan harga minyak mentah dunia akhir-akhir ini memberi dampak yang besar pada perekonomian nasional, terlebih dengan problematika Indonesia yang menjadi negara net importir sejak tahun 2004. Dengan semakin menipisnya cadangan minyak bumi yang diperkirakan akan habis pada tahun 2010, maka Indonesiapun akan menjadi negara pengimport besar minyak bumi sekitar tahun 2015<sup>[1]</sup>. Keadaan ini dapat dilihat pada tabel dibawah ini:

Tabel 1.1 Cadangan dan umur sumber energi non renewable<sup>[1]</sup>

Jenis Energi	Cadangan Terbukti	Produksi	Sisa Umur(th)
Minyak Bumi	4,7 milyar Barel	1,126 juta barrel/hari	15
Gas Bumi	90,3 TSCF	2,6 TSCF/tahun	35
Batu Bara	4,968 milyar ton	81,4 juta ton/tahun	61

Oleh karena itu diperlukan kebijakan pemerintah untuk melaksanakan penganeekaragaman energi dengan memanfaatkan energi terbarukan<sup>[2]</sup>. Bahan bakar alternative yang bersifat terbarukan dapat diperoleh dari minyak nabati. Salah satu sumber energi alternatif dari minyak nabati adalah minyak jarak (*jatropha oil*)<sup>[3-5]</sup>.

Minyak jarak merupakan bahan alam sehingga bersifat *biodegradable*. Perkembangan minyak jarak saat ini sangat menjanjikan karena mendapatkan perhatian dari pemerintah secara serius, terbukti dengan dirintisnya penelitian dan pengembangan oleh berbagai instansi pemerintahan dan pendidikan di Indonesia<sup>[3]</sup>. Peluang pasar bagi minyak jarak cukup terbuka dengan kesiapan Pertamina untuk menampung minyak jarak dari masyarakat. Disamping itu, penggunaan minyak jarak dapat menciptakan lapangan kerja di pedesaan dan pemulihan kembali lahan kritis<sup>[6]</sup>.

Minyak jarak ini telah banyak di uji coba sebagai bahan bakar dibidang *automotive*. Bahan bakar dari minyak jarak dapat diperoleh dengan dua cara yaitu dengan proses transesterifikasi menjadi biodiesel dan pemakaian secara langsung. Uji coba pemakaian minyak jarak di Indonesia yang dilakukan terakhir pada “*Jatropha Expedition 2006*” menunjukkan suatu permasalahan baru yaitu pada saat pemakaian minyak jarak 100%, langsung pada mesin diesel dengan menggunakan konverter terjadi pengentalan minyak jarak pada suhu rendah<sup>[4-5]</sup>.

Minyak jarak yang dipakai dalam “*Jatropha Expedition 2006*” ini merupakan minyak jarak semi mulus (*straight jatropha oil-SJO*) yang mempunyai viskositas sepuluh kali lebih tinggi dibandingkan solar. Tingginya viskositas minyak jarak disebabkan minyak jarak memiliki rantai hidrokarbon yang panjang yaitu sekitar 18<sup>[7-9]</sup> dengan ikatan rangkap lebih dari satu. Beberapa penelitian mengenai *thermal cracking* hidrokarbon pada minyak nabati telah dilakukan, diantaranya oleh peneliti Billaut et al (1995)<sup>[10]</sup> dan Fangrui Ma et al (1999)<sup>[11]</sup>, didapatkan skenario bahwa rantai hidrokarbon panjang yang mengandung ikatan rangkap tersebut dapat *tercracking* tanpa katalis dan menghasilkan produk *thermal cracking* hingga berfase gas.

Penelitian ini bertujuan untuk merengkah minyak jarak menjadi senyawa hidrokarbon dengan rantai C lebih pendek sehingga memiliki viskositas yang lebih rendah dan dapat langsung dipakai pada mesin diesel. Penelitian ini dilakukan dalam empat tahap yaitu tahap pertama Persiapan alat, tahap kedua *blank test* yang bertujuan untuk mendapatkan tekanan optimum yang diperlukan agar reaksi tetap berada pada fasa cair dan tahap ketiga proses *thermal cracking* yang bertujuan untuk mencari kondisi operasi yang paling optimum sehingga didapatkan karakteristik minyak jarak setara solar (*automotive diesel oil*) dan tahap keempat adalah tahapan analisa. Karakteristik-karakteristik yang dimaksud adalah densitas, viskositas, angka setana dan bilangan iodine.

## 1.2. Rumusan Masalah

Rumusan masalah penelitian ini adalah untuk mengetahui bagaimana kinerja proses *thermal cracking* dalam menkonversi minyak jarak semi mulus (*straight jatropha oil*) agar karakteristiknya setara solar (*automotive diesel oil*). Karakteristik yang dimaksudkan adalah viskositas dan densitasnya

## 1.3. Tujuan Penelitian

1. Mensintesa biosolar dari minyak jarak semi mulus (*SJO*)
2. Mendapatkan kondisi operasi optimum pada reaksi *thermal cracking* untuk mendapatkan karakteristik minyak jarak semi mulus (*SJO*) setara solar, terutama dengan variabel temperature dan waktu reaksi
3. Melakukan perbandingan antara produk *thermal cracking* dengan solar komersial.
4. Menentukan kinetika reaksi *thermal cracking*

## 1.4. Hipotesa Penelitian

Proses *thermal cracking* akan mampu mensintesa minyak jarak semi mulus (*SJO*) menjadi bahan bakar setara solar jika dilihat dari viskositas, densitas, angka setana dan bilangan iodine dengan kondisi optimum pada rentang suhu dan waktu tertentu

## 1.5. Batasan Masalah

1. Bahan baku yang dipakai dalam penelitian ini adalah Minyak jarak semi mulus (*SJO*).
2. Karakteristik produk *thermal cracking* minyak jarak dengan solar dilihat dari viskositas, densitas, angka setana dan bilangan iodin.
3. Reaksi dilakukan dalam reaktor *semi batch*.

## **1.6. Sistematika Penulisan**

Laporan ini ditulis dengan sistematika sebagai berikut:

### **BAB I. PENDAHULUAN**

Bagian pendahuluan ini terdiri atas latar belakang , rumusan masalah, tujuan, batasan masalah, dan sistematika penulisan

### **BAB II. TINJAUAN PUSTAKA**

Berisi tentang informasi mengenai hal-hal yang berkaitan dengan penelitian ini, seperti bahan dan alat yang digunakan dalam penelitian, katalis yang digunakan, proses perengkahan dan proses perengkahan yang digunakan dalam beberapa penelitian terdahulu.

### **BAB III. METODOLOGI PENELITIAN**

Berisi tahapan-tahapan penelitian yang dilakukan dari awal hingga akhir. Mulai dari metode pengumpulan data hingga pengolahan data dan fungsinya dalam penelitian.

### **BAB IV. HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN**

Berisi data-data yang didapatkan dari hasil penelitian serta pembahasan terhadap data tersebut.

### **BAB V. KESIMPULAN**

Berisi kesimpulan yang didapat dari hasil penelitian yang yang telah dilakukan.

## BAB II

### TINJAUAN PUSTAKA

#### 2.1. Jarak

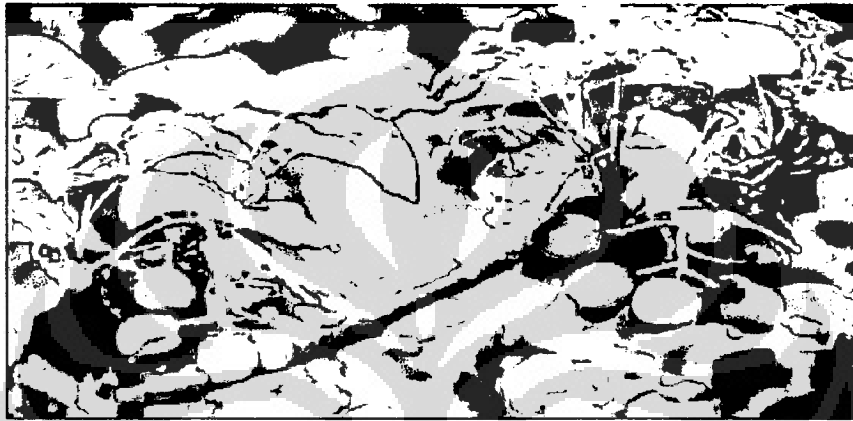
##### 2.1.1 Tanaman Jarak “*Physic Nut*”

Tanaman jarak penghasil minyak jarak semi mulus (*straight jatropha oil-SJO*) ini berasal dari jenis tanaman jarak pagar yang dalam bahasa Inggrisnya bernama “*Physic Nut*” dengan nama species *jatropha curcas*. Tanaman ini seringkali salah diidentifikasi dengan tanaman jarak yang dalam bahasa Inggris disebut *Castor Bean* dengan nama species *Ricinus Communis*<sup>[3]</sup>. Kedua tanaman ini berasal dari kerabat klasifikasi tanaman (*family*) yang sama yaitu “*Euphorbiaceae*”. Tidak sedikit dari kerabat klasifikasi tanaman *euphorbiaceae* ini dikenal dengan nama lokal Indonesia sebagai tanaman jarak. Selain dikenal dengan nama lokal yang sama, tanaman jarak ini banyak ditemukan di daerah tropis seperti Indonesia, bahkan dari kedua jenis tanaman ini dapat diperoleh ekstrak minyak dari bijinya. Jarak pagar (*Jatropha curcas*) adalah tanaman asli Amerika Latin yang kini menyebar luas di berbagai daerah kering, semi kering dan sub-tropik di seluruh dunia. Tanaman ini sangat tahan kering, hidup sepanjang tahun dan dapat tumbuh di daerah dengan curah hujan kurang dari 1000 mm sampai di atas 1000 mm per tahun. Tanaman ini bisa hidup sampai 50 tahun dan tahan di tanah-tanah tandus dan tidak subur<sup>[3,8]</sup>.

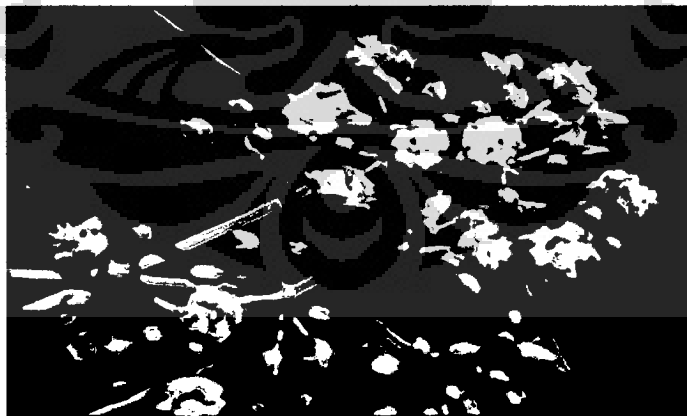
*Jatropha* memerlukan curah hujan minimum 600 mm per tahun dan bisa tahan tumbuh dalam musim kemarau panjang antara 7 – 8 bulan. Namun tanaman ini juga tumbuh baik jika curah hujan lebih dari 2000 mm. Adaptasi ini cocok dengan kondisi tanah dan iklim semi kering seperti di NTT, NTB, Sulawesi, sebagian Jawa Timur dan Bali yang mempunyai curah hujan kurang dari 1000 mm sampai dengan 2000 mm atau lebih per tahun tergantung wilayah dan kondisi geografisnya.

Jarak pagar (*Jatropha curcas*) banyak ditanam secara tradisional oleh masyarakat di Nusa Tenggara Barat dan Nusa Tenggara Timur. Dalam satu hektar

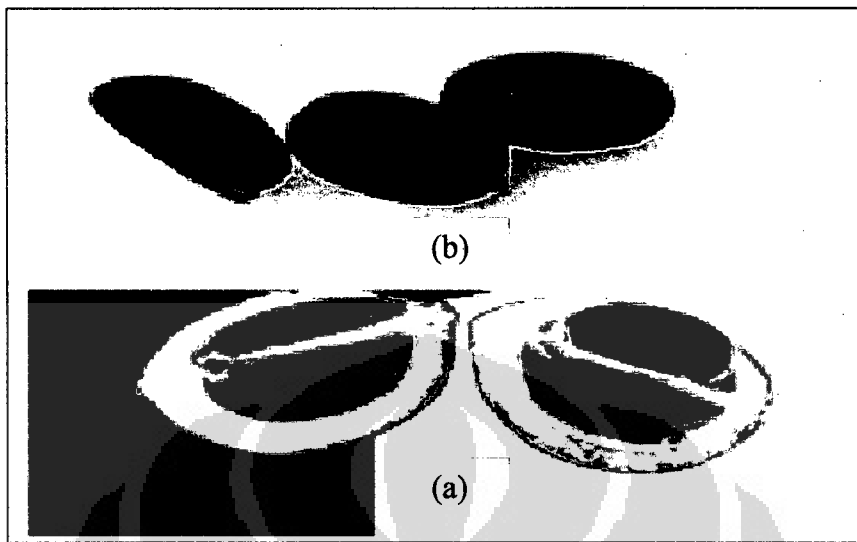
dapat dihasilkan biji jarak sekitar 4-6 ton yang sudah dapat dipetik setelah ditanam selama lima bulan.<sup>[3,15,26]</sup> Bentuk morfologi tanaman jarak bisa kita lihat pada Gambar 2.1 dan 2.2, untuk biji jarak penghasil minyak dapat di lihat pada Gambar 2.3 dengan kondisi sebelum (a) dan sesudah (b) dikeringkan.



**Gambar 2.1** Jarak Pagar (*Jatropha Curcas*)<sup>[3]</sup>



**Gambar 2.2** Bunga Tanaman Jarak(*Jatropha Curcas*)<sup>[3]</sup>



**Gambar 2.3.**Biji Tanaman Jarak (*Jatropha Curcas*)<sup>[3]</sup>

(a) sebelum dikeringkan

(b) sesudah dikeringkan

Tabel 2.1 dibawah ini menunjukkan lebih spesifik kandungan daun, batang, biji dan getah tanaman jarak serta penggunaannya secara umum

**Tabel 2.1** Kandungan tumbuhan jarak yang di pergunakan<sup>[8]</sup>

Bagian tumbuhan	Kandungan	Penggunaan
Daun	Saponin, flavonoida, tannin, senyawa poli fennol	Mengobati bengkak, luka, gatal-gatal (eksim, jamur), lepra, kencing manis dan penyubur rambut
Batang	Saponin, flavonoida, tannin, senyawa polifenol	- Sama dengan daun -
Biji	Senyawa alkaloid, saponin, kursin, 35-45% minyak/ lemak	Bahan baku pembuatan minyak jarak
Getah	Tannin(11-18%)	Mengobati kudis, eksim, sembelit dan sakit gigi

### 2.1.2. Minyak Jarak (*jatropha oil*)

Minyak jarak sebagai substitusi bahan bakar sebenarnya telah lama diketahui. Misalnya melalui review yang di publikasikan Gubitz dkk, disebutkan bahwa pada tahun 1997 grupnya di Austria, telah mempublikasikan hasil uji coba minyak jarak pada mesin diesel standar. Dalam review tersebut juga di sebutkan bahwa jauh sebelum pengujian tersebut dilaksanakan pada tahun 1982, peneliti dari Jepang juga telah memperoleh hasil cukup memuaskan dalam pengujian performansi mesin dalam menggunakan minyak jarak di Thailand<sup>[9]</sup>.

Tahapan pembuatan minyak jarak sendiri proses pembuatan minyak jarak mula-mula biji jarak dikeringkan (mengandung 12-15% air), kemudian dikeringkan hingga kandungan air menjadi 7-8%, dihaluskan dengan ukuran 1-2 mm, dimasak kemudian di *press* hingga menghasilkan minyak jarak. Minyak jarak keluaran dari *filter press* dimasukkan dalam *oil dryer* untuk menghilangkan kandar air dalam minyak jarak<sup>[9]</sup>.

Dalam biji tanaman jarak yang mengandung kurang lebih 45% minyak, diketahui merupakan trigliserida campuran, yang berarti ketiga asam lemak (dari) gliserida itu pada umumnya tidak sama. Komposisi Asam lemak dalam minyak jarak diketahui sebagai berikut:

Tabel 2.2. Komposisi Asam lemak dalam *jatropha oil* dan *palm oil*<sup>[9]</sup>

Asam lemak		Jatropha	Palm
Asam Miristat	14:0	0 - 0.1	0.9 - 1.5
Asam Palmitat	16:0	14.1- 15.3	39.2 - 45.8
Asam Stearat	18:0	3.7 - 9.8	3.7 - 5.1
Asam Palmitoleat	16:1	0 - 1.3	0 - 0.4
Asam Oleat	18:1	34.3 - 45.8	37.4 - 44.1
Asam Linoleat	18:2	29.0 - 44.2	8.7 - 12.5
Asam Linolenat	18:3	0 - 0.3	0 - 0.6
Asam Arakhidat	20:0	0 - 0.3	0 - 0.04
Asam Behenat	20:0	0 - 0.2	NA



Minyak jarak yang telah melalui proses pemberisihan daripengorot mempunyai sifat sebagai berikut:

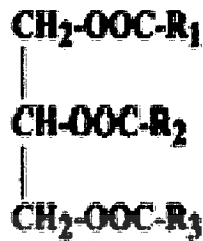
**Tabel 2.3.** Sifat fisik dan kimiawi Minyak Jarak <sup>[9]</sup>

<b>Parameter</b>	<b>Minyak jarak (<i>Jatropha oil</i>)</b>
Specific Gravity 15°C (gr/cm <sup>3</sup> )	0,918-0,92
Sulfur (wt%)	<1
Caloric Value (Kcal/kg)	9470
Viscosity 30°C(cSt)	17,1-52
Cetane Value	39
Flash Point °C	240-290

Dari table 2.2 dan tabel 2.3 dapat diketahui komposisi minyak jarak, sebagian besar merupakan asam lemak yang tersusun dari rantai karbon yang panjang tak jenuh dan viskositas minyak jarak sangat besar, sehingga dalam penelitian ini diharapkan rantai karbon panjang tak jenuh tersebut dapat *dicracking* sehingga viskositas minyak jarak akan diturunkan mendekati viskositas solar.

## 2.2. Triglicerida

Struktur molekul dari triglicerida adalah sebagai berikut:



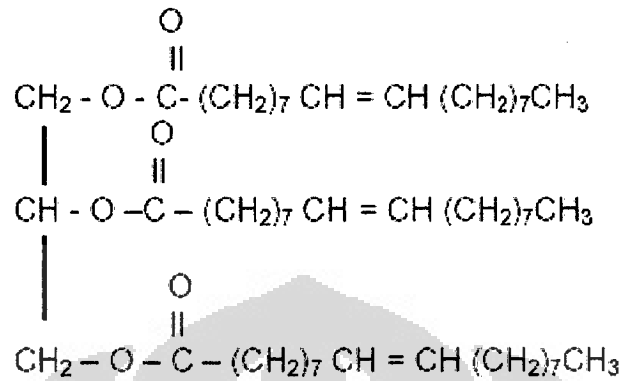
Gambar 2.4. Struktur dari triglicerida<sup>[12]</sup>

Rantai karbon asam lemak digambarkan oleh R1, R2 dan R3. Ada beberapa tipe Asam lemak dalam minyak jarak, misalnya:

Palmitik	$R = -(\text{CH}_2)_{14} - \text{CH}_3$	16 karbon termasuk R (16:0)
Stearik	$R = -(\text{CH}_2)_{16} - \text{CH}_3$	18 karbon, 0 ikatan rangkap (18:0)
Oleat	$R = -(\text{CH}_2)_7 \text{CH} = \text{CH} (\text{CH}_2)_7 \text{CH}_3$	18 karbon, 1 ikatan rangkap (18:1)
Linoleat	$R = -(\text{CH}_2)_7 \text{CH} = \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH} = \text{CH} (\text{CH}_2)_4 \text{CH}_3$	18 karbon, 2 ikatan rangkap (18:2)
Linolenik	$R = -(\text{CH}_2)_7 \text{CH} = \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH} = \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH} = \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$	18 karbon, 3 ikatan rangkap (18:3)

Gambar 2.5. Beberapa tipe rantai karbon dalam Minyak jarak

Misal dari R1, R2 dan R3 tersusun oleh oleat maka jenis trigliserida adalah triolein, yang dapat digambarkan sebagai berikut:



**Gambar 2.6.** Triolein

Jika *thermal cracking* dilakukan terhadap triolein maka diharapkan terjadi pemutusan rantai karbon pada oleat sehingga viskositas minyak jarak akan turun dengan semakin pendek rantai hidrokarbon.

### 2.3. Ekspedisi “Minyak Jarak”

Ekspedisi uji coba secara empiris dan ilmiah kelayakan minyak jarak pagar (*Jatropha curcas*) murni dari Atambua, Timor ke Jakarta, 12 hingga 20 Juli 2006 telah dilakukan oleh “ NATIONAL GEOGRAPHIC INDONESIA-BIOTECHNOLOGY RESEARCH CENTER ITB- BIOCHEM PRIMA INTERNATIONAL”. Dalam ekspedisi ini dipasang konverter pada mesin untuk merubah sifat minyak jarak agar dapat berfungsi seperti solar. Namun dalam uji coba tersebut terdapat kendala pada konverter pada saat penurunan suhu yaitu terjadinya pengentalan minyak<sup>[5]</sup>. Kendala pada uji coba tersebut terjadi karena viskositas minyak jarak delapan kali viskositas solar. Pada penelitian ini dilakukan modifikasi sifat minyak jarak agar setara sifat solar, sehingga konverter tidak diperlukan lagi.

Tabel.2.4. Perbandingan antara Biodiesel, Minyak Jarak dan solar terhadap performa mesin diesel<sup>[16]</sup>

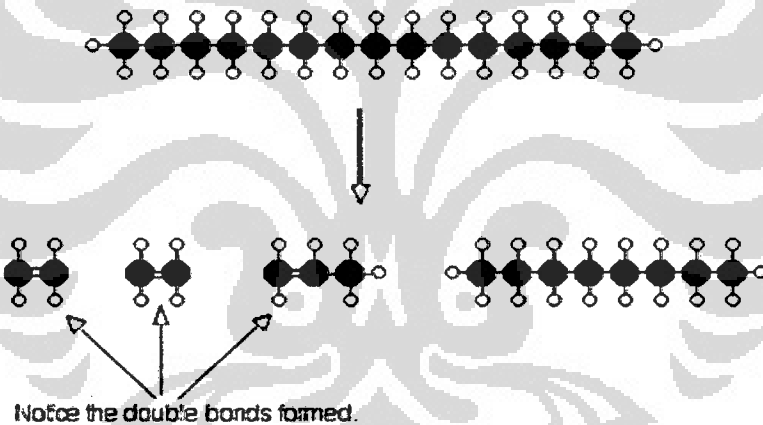
No.	Sifat Perbandingan	Biodiesel	Minyak Jarak	Solar
1	Modifikasi mesin	Tidak	Perlu	Tidak
2	Viskositas (cP)	5	32	2-6
3	Angka setana	51	39	45
4	Deguming	Tidak	Perlu	
5	Korosivitas	-	+	-
6	Stabilitas Penyimpanan	+	-	+
7	Kerak diruang bakar	-	+	-
8	Biodegradability	+	+	-
9	Kalor (MJ/L)	36	35	37

Tabel 2.4 diatas menunjukkan perlunya pemasangan konverter pada mesin karena perbedaan viskositas yang tajam antara minyak jarak dengan solar.

## 2.4. Thermal Cracking

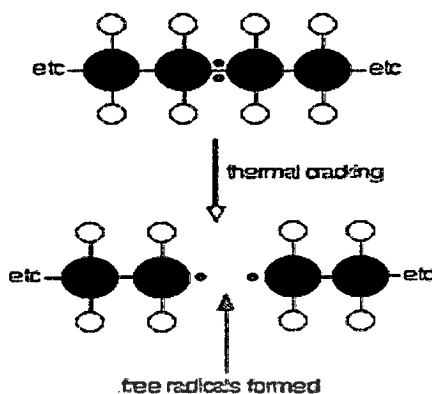
*Cracking* merupakan proses pemecahan molekul-molekul hidrokarbon besar (rantai panjang) menjadi molekul-molekul hidrokarbon yang lebih kecil (rantai pendek) dengan adanya pemanasan dengan ataupun tanpa katalis. Semua reaksi *cracking* adalah endotermik dan melibatkan energi. Sehingga apabila dikaji secara termodinamika maka diperlukan pemanasan, atau dengan kata lain reaksi dilakukan pada suhu yang cukup tinggi<sup>[17-19]</sup>.

Pada *thermal cracking* reaksi terjadi secara acak, tidak ada suatu molekul hidrokarbon yang terengkah menurut satu mekanisme reaksi yang pasti. Molekul dapat terengkah diberbagai tempat tergantung pada jenis molekul hidrokarbon dan kondisi operasi. Fenomena *Thermal cracking* apabila terjadi pada rantai hidrokarbon parafinik dapat digambarkan sebagai berikut:



**Gambar 2.7.** Fenomena Reaksi *Thermal cracking* pada parafinik

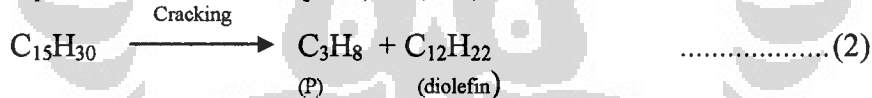
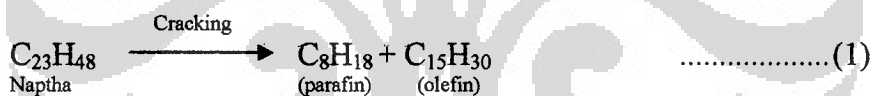
Reaksi *thermal cracking* bila dilihat dari disosiasi ikatan, merupakan pemisahan homolitik yaitu setiap atom yang turut dalam ikatan kovalen akan menerima satu elektron dari pasangan. Sehingga akan terbentuk radikal bebas. Fenomena kejadian diatas dapat digambarkan sebagai berikut:



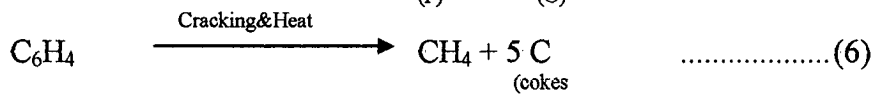
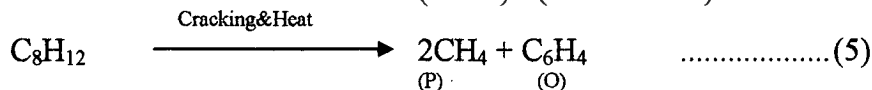
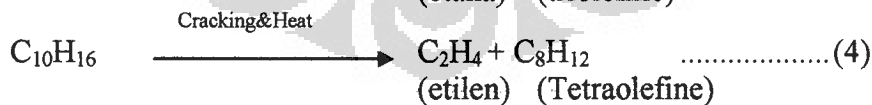
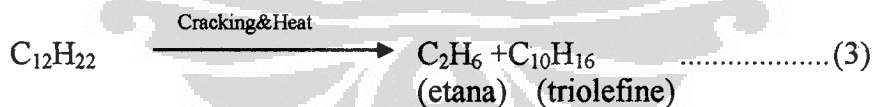
**Gambar 2.8.** Pembentukan radikal bebas pada proses *Thermal cracking*

Reaksi pada *thermal cracking* pada minyak bumi membutuhkan suhu dan tekanan yang relatif tinggi antara 450-750<sup>o</sup>C dengan tekanan hingga 70 atm<sup>[17-19]</sup>.

Pada *petrochemical building block* reaksi *thermal cracking* untuk menghasilkan olefin dari naptha, berlangsung dalam reaktor *tubuler furnace*, operasi berjalan pada suhu 370-100<sup>o</sup>C dan tekanan 10-25 atm. Proses perengkahan dapat berjalan secara terus menerus hingga meghasilkan *coke*.



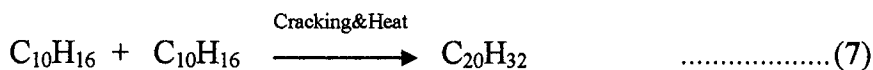
Reaksi dapat berjalan terus:



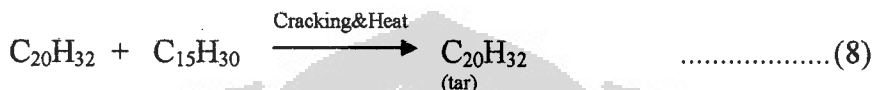
Disamping pembentukan *cokes*, molekul-molekul yang terengkah tidak selalu berjalan sebagaimana tertera pada reaksi diatas. Banyak sekali

kemungkinan yang dapat terjadi seperti terbentuknya *tar* dari hasil polimerisasi dan kopolimerisasi olefin sebagai berikut:

- Dimerisasi dari C<sub>10</sub>H<sub>16</sub> hasil reaksi (4) diatas:



- Hasil reaksi dimerisasi (7) diatas mengadakan kopolimerisasi dengan C<sub>15</sub>H<sub>30</sub> hasil reaksi (1) menghasilkan:



*Thermal cracking* terhadap minyak nabati juga pernah dilakukan antara lain oleh Billaut dkk <sup>[10]</sup> pada pembuatan campuran ester dari *rapeseed oil* dengan suhu operasi 550-850<sup>o</sup>C dan *dipurge* menggunakan N<sub>2</sub> pada reactor agar tidak terjadi oksidasi. Tabel 2.5 berikut menunjukkan keberhasilan proses *thermal cracking* yang dilakukan billaut dkk.

**Tabel 2.5.** Produk *cracking rapeseed oil* berdasarkan proses *thermal cracking* <sup>[10]</sup>

Selectivity (molar % of carbon atoms cracked)							
	550 <sup>o</sup> C	600 <sup>o</sup> C	650 <sup>o</sup> C	700 <sup>o</sup> C	750 <sup>o</sup> C	800 <sup>o</sup> C	850 <sup>o</sup> C
C <sub>1</sub> -C <sub>4</sub> cut		18.6	28.2	38.7	35.1	45.1	66.1
C <sub>5</sub> -C <sub>9</sub> cut	10.0	19.6	17.6	13.2	17.5	12.6	3.6
C <sub>10</sub> -C <sub>14</sub> cut	36.0	3.5	3.5	2.7	1.7	1.0	0.3
C <sub>15</sub> -C <sub>18</sub> cut	3.0	0.7	0.3	1.1	0.3	0.2	0.3
Aromatics	0.9	2.0	2.7	3.9	7.2	11.6	8.9
C <sub>34</sub> -C <sub>84</sub> esters	5.2	16.6	10.3	7.2	5.9	4.1	0.9
C <sub>94</sub> -C <sub>164</sub> esters	8.5	3.2	3.4	2.3	0.9	0.5	0.3
Saturated esters	2.3	1.2	1.6	2.4	3.7	3.1	2.6
CO	2.0	1.2	1.3	2.3	2.7	3.8	5.3
CO <sub>2</sub>	0.5	0.6	0.6	1.1	1.5	1.6	2.1
Coke	0.3	3.8	4.2	4.7	2.2	3.1	4.5
Others	6.1	29.0	25.3	20.4	21.3	13.3	5.1
Products	25.2						
Selectivity (molar % of hydrogen atoms cracked)							
H <sub>2</sub>	0.3	0.9	1.7	2.7	3.6	4.6	5.9

## 2.5. Beberapa Penelitian Mengenai *Thermal Cracking* Minyak Nabati

Minyak jarak merupakan salah satu minyak nabati yang dapat dijadikan sebagai sumber energi alternatif yang terbaharukan. Minyak jarak yang beredar dipasaran merupakan minyak jarak semi mulus. Beberapa penelitian mengenai *thermal cracking* pada minyak nabati telah dilakukan namun peneliti-peneliti berorientasi bahwa produk akhir berupa biodiesel, seperti ditunjukkan pada Tabel 2.6

**Tabel.2.6.** Penelitian yang digunakan sebagai acuan proses pengolahan minyak jarak menjadi bahan bakar setara solar

Peneliti	Tahun	Bahan dasar	Proses dan Kesimpulan	Hasil
Billaut dkk <sup>[10]</sup>	1995	Rapseed oil	<i>Pyrolysis</i> pada T = 550-850°C , N <sub>2</sub> , selama 5 jam	C1-C4
Fangrui Ma dkk <sup>[11]</sup>	1999	Vegetable oil	Blending, trans-esterifikasi, <i>thermal cracking</i> , <i>catalytic cracking</i> . <i>Catalytic cracking</i> pada T450°C katalis SiO <sub>2</sub> /Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Banyak yang berupa gas

Tabel 2.6 menunjukkan keberhasilan *cracking* terhadap berbagai minyak nabati. Pada proses-proses tersebut dihasilkan hidrokarbon yang lebih pendek, bahkan hidrokarbon berfase gas. Pada penelitian yang diusulkan, proses perengkahan diarahkan pada terbentuknya fraksi hidrokarbon yang lebih pendek dari C<sub>18</sub> yang berasal dari trigliserida. Fraksi hidrokarbon yang lebih pendek ini dapat menurunkan viskositas minyak jarak.



## 2.6. Bahan Bakar Mesin Diesel

Bahan bakar mesin diesel yang biasa digunakan sekarang ini merupakan produk dari minyak bumi yang merupakan fraksi minyak yang relatif ringan yang diperoleh dari fraksinasi minyak mentah dimana minyak mentah ini sebagian besar terdiri dari senyawa hidrokarbon. Senyawa hidrokarbon yang dapat ditemukan dalam minyak diesel adalah hidrokarbon parafinik, naftenik, olefinik dan aromatik. Putaran mesin yang berbeda menyebabkan bahan bakar yang diperlukan memiliki karakteristik tertentu pula. Ada dua golongan bahan bakar diesel bila digolongkan berdasarkan jenis putaran mesin diesel, yaitu<sup>[20]</sup>:

### 1. *Industrial Diesel Oil (IDO)*.

Bahan bakar diesel jenis ini digunakan untuk mesin diesel dengan kecepatan putaran mesin dibawah 1000 rpm atau *low speed diesel (LSD)*, misalnya mesin industri. Bahan bakar diesel ini biasa disebut minyak diesel.

### 2. *Automotif Diesel Oil (ADO)*

Bahan bakar diesel jenis ini digunakan untuk mesin diesel dengan kecepatan putaran mesin diatas 1000 rpm atau *High speed diesel (HSD)*, misalnya mesin kendaraan bermotor. Bahan bakar diesel ini biasa disebut minyak solar.

Karakteristik bahan bakar diesel yang diperlukan berdasarkan putaran mesin berhubungan dengan *auto ignition*, kemudahan bahan bakar mengalir dalam saluran bahan bakar, kemampuan untuk teratomisasi.

Bahan bakar diesel mutunya ditentukan oleh angka cetana. Makin tinggi angka cetana, makin tinggi unjuk kerja yang diberikan oleh bahan bakar diesel. Angka cetana adalah besarnya kadar volume cetana dalam campurannya dengan metilnaphtalen. Cetan murni mempunyai angka cetana = 100, sedang aromatik mempunyai angka cetana = 0. Unjuk kerja adalah persentase rata-rata daya yang dapat diperoleh dari mesin dengan bahan bakar tertentu dibandingkan dengan daya yang diperoleh dari bahan bakar yang mempunyai angka cetana = 100.

Perbedaan karakteristik dari kedua golongan bahan bakar desel diatas, dapat dilihat pada tabel 2.7 dibawah ini:

**Tabel.2.7** Perbedaan Karakteristik Minyak Solar (*Automotive Diesel Oil*) dan minyak diesel<sup>[1]</sup>

Sifat	Minyak solar		Minyak Diesel	
	Min	Max	Min	Max
Spesifik Gravity 60/60 °F	0.82	0.87	0.84	0.92
Colour ASTM		3.0		6.0
Pour point, °F		65		65
Flash Point, °F	150		150	
Sulfure Content, %wt		0.5		1.5
Viscosity	1.6 (kinematik)	5.8 (cSt.100°F)	35 (Redwood)	45 (cSt.100°F)
Sediment, %wt		0.01		0.02
Ash Content, %wt		0.01		0.02
Water Content, %vol		0.1		1.0
Coradson Carbon Residue, %wt		0.05		0.25

## 2.7. Karakteristi Bahan Bakar

Karakteristik bahan bakar yang dapat mempengaruhi kerja mesin diesel sebagai berikut:

### 2.7.1. Densitas

Densitas merupakan perbandingan antara massa per satuan volume bahan<sup>[21]</sup>. Untuk suatu minyak diesel, densitas diukur dengan menggunakan metode ASTM D 287 atau ASTM D 1298. Densitas suatu minyak diesel diukur, karena karakteristik ini berhubungan erat dengan nilai kalor dan daya yang dihasilkan oleh suatu mesin diesel persatuan bahan bakar yang digunakan<sup>[24]</sup>.

### 2.7.2. Viskositas

Viskositas adalah tahanan suatu fluida terhadap pengaliran yang umumnya menyatakan waktu yang diperlukan oleh sejumlah fluida tertentu untuk mengalir dalam pengaruh gaya gravitasi bumi pada sebuah pipa kapiler<sup>[22]</sup>. Makin besar viscositas maka makin besar tahanannya untuk mengalir yang berarti makin besar kekentalannya, dan demikian pula sebaliknya. Kecepatan alir bahan bakar melalui

injektor akan mempengaruhi derajat atomisasi bahan bakar di dalam ruang bakar<sup>[24]</sup>. Untuk bahan bakar mesin diesel viskositas diukur dengan menggunakan metode **ASTM D 445** dengan satuan cSt. Selain itu, viskositas bahan bakar juga berpengaruh secara langsung terhadap kemampuan bahan bakar tersebut bercampur dengan udara. Dengan demikian, viskositas bahan bakar yang tinggi, seperti yang terdapat pada *SJO*, tidak diharapkan pada bahan bakar mesin diesel. Oleh karena itulah penggunaan *SJO* secara langsung pada mesin diesel menuntut digunakannya mekanisme pemanas bahan bakar sebelum memasuki sistem pompa dan injeksi bahan bakar.

### **2.7.3. Angka Setana (ASTM D 613-95)**

Angka setane menunjukkan seberapa cepat bahan bakar mesin diesel yang diinjeksikan ke ruang bakar bisa terbakar secara spontan (*auto ignition*). Angka setana pada bahan bakar mesin diesel memiliki pengertian yang berkebalikan dengan angka oktan pada bahan bakar mesin bensin, karena angka oktan menunjukkan kemampuan campuran bensin-udara menunggu rambatan api dari busi (*spark ignition*)<sup>[23-24]</sup>.

Angka setana semakin tinggi menunjukkan bahwa minyak solar tersebut dapat menyala pada temperatur yang relatif rendah. Pengukuran angka setane dari bahan bakar mesin diesel menggunakan **ASTM D 613-65** atau **ISO 5165**, standart pengukuran menggunakan hexadecane ( $C_{16}H_{34}$ , yang memiliki nama lain cetane) sebagai patokan tertinggi (angka setana, CN=100), dan 2,2,4,4,6,8,8 heptamethylnonane (HMN yang juga memiliki komposisi  $C_{16}H_{34}$  sebagai patokan terendah (CN=15)<sup>[27]</sup>. Dari standard tersebut bisa dilihat bahwa hidrokarbon dengan rantai lurus (*straight chain*) lebih mudah terbakar dibandingkan dengan hidrokarbon yang memiliki banyak cabang (*branch*)<sup>[24]</sup>.

#### 2.7.4. Bilangan Iodine

Bilangan iodine adalah gram iodine ( $I_2$ ) yang diserap oleh 100 gram sampel yang akan diukur, yang menunjukkan ikatan karbon tak jenuh dalam sampel.  $I_2$  akan mengadisi ikatan karbon tak jenuh (ikatan rangkap) sedangkan sisa  $I_2$  yang tidak bereaksi dengan ikatan rangkap karbon akan bereaksi dengan  $Na_2S_2O_3$  (sodium tiosulfat).

Bilangan iodine pada biosolar menunjukkan tingkat ketidakjenuhan senyawa penyusun biodiesel. Di satu sisi, keberadaan senyawa lemak tak jenuh meningkatkan performansi biosolar pada temperatur rendah, karena senyawa ini memiliki titik leleh (*melting point*) yang lebih rendah, sehingga berkorelasi pada *cloud* dan *pour point* yang juga rendah<sup>[20,24]</sup>. Namun di sisi lain, banyaknya senyawa lemak tak jenuh di dalam biosolar memudahkan senyawa tersebut bereaksi dengan oksigen di atmosfer dan bisa terpolimerisasi membentuk material serupa plastik. Di samping itu, konsentrasi asam linolenic dan asam yang memiliki 4 ikatan ganda masing-masing tidak boleh melebihi 12 dan 1%<sup>[20]</sup>.

## 2.8. Minyak Solar

Solar secara rumus molekul karbonnya berada pada rentang tertentu yaitu  $C_{12}-C_{30}$ <sup>[25]</sup>. Sedangkan untuk karakteristik dari solar dapat dilihat dalam tabel dibawah ini.

**Tabel 2.8.** Sifat Fisika Minyak Solar (*Automotive Diesel Oil*)<sup>[27]</sup>

No	Karakteristik	Satuan	Batas		Metode
			Min	Max	
1.	Bilangan Cetana				
	Angka Setana atau	-	48	-	D 613-95
	Index Setana	-	45	-	D 4737-96a
2.	Massa Jenis pada 15°C	Kg/m <sup>3</sup>	815	870	D 1298
3.	Visc. kinematik pada suhu 40°C	mm <sup>2</sup> /sec	2.0	5.0	D445-97
4.	Kandungan Sulfur	%m/m	-	0.35 <sup>1)</sup>	D 2622-98
5.	Distillas Temp.95°C	°C	-	370	
6.	Titik Nyala	°C	60	-	D 93-99c
7.	Titik Tuang	°C	-	18	D 97
8.	Residu Karbon	%m/m	-	0.1	D 4530-93
9.	Kandungan Air	mg/Kg	-	500	D 1744-92
10.	Biological Grow *)	-	Nihil		
11.	Kandungan FAME *)	%v/v	-	10	
12.	Kandungan Metanol dan Etanol	%v/v	Tak terdeteksi		D 4815
13.	Korosi Lempeng Logam	Merit	-	Kelas 1	D 130-94
14.	Kandungan Abu	%v/v	-	0.01	D 482-95
15.	Kandungan Sedimen	%m/m	-	0.01	D 473
16.	Bilangan Asam Kuat	mg KOH/gr	-	0	D 664
17.	Bilangan Asam Total	mg KOH/gr	-	0.6	D 664
18.	Partikulat	mg/lt	-	-	D 2276-99
19.	Penampilan Visual	-	Jernih & Terang		
20.	Warna	No.ASTM	-	3.0	D 1500

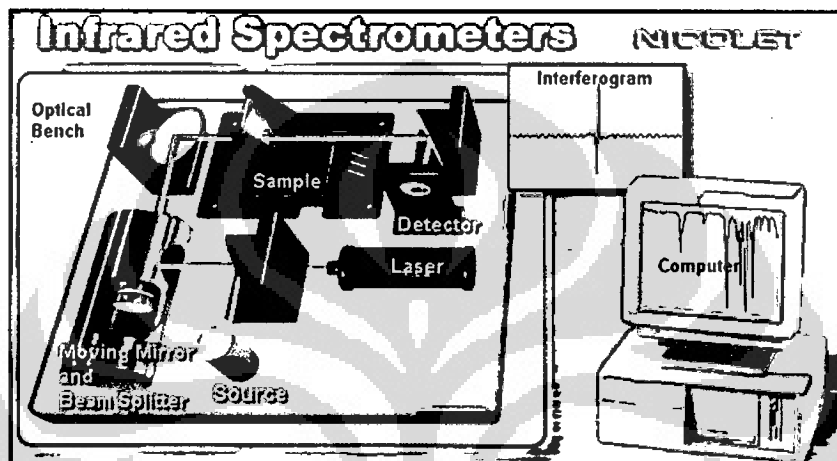
\*) Khusus minyak solar yang mengandung biodiesel , jenis dan spesifikasi biodieselnnya mengacu kepada pemerintah

<sup>1)</sup> Batasan 0.35% m/m setara dengan 3500 ppm

## 2.9. FTIR dan GC-MS

### 2.9.1. Spektrofotometri FTIR (*Fourier Transform Infra Red*)

Analisa dengan alat FTIR bertujuan untuk mengetahui jenis ikatan kimia dari senyawa-senyawa yang terkandung dalam sampel sehingga dapat ditentukan jenis senyawa tersebut lebih akurat. Sampel yang digunakan adalah produk cair.

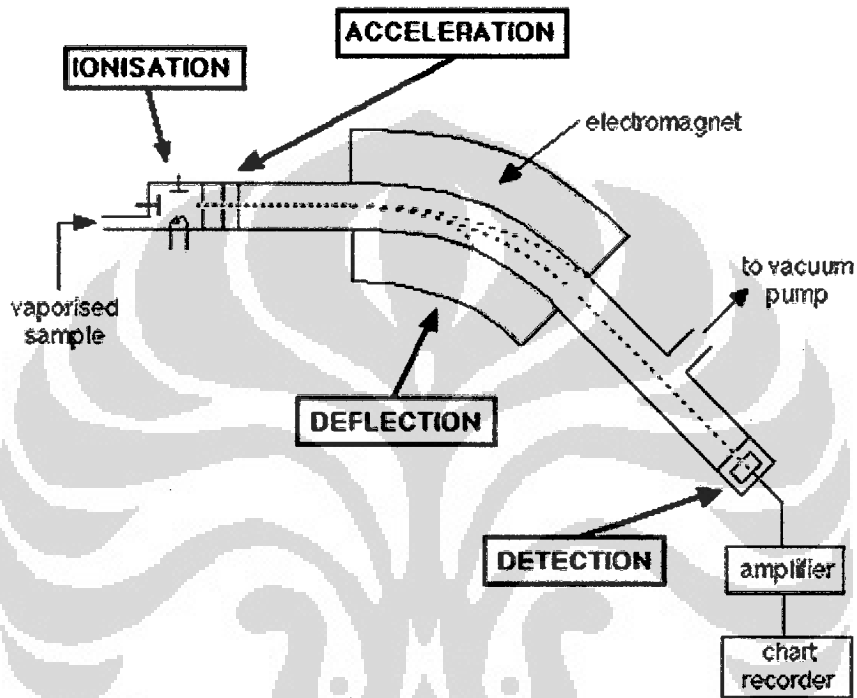


Gambar 2.9. Skema Kerja Alat Spektrofotometer FTIR <sup>[28]</sup>

Prinsip kerja FTIR adalah sebagai berikut, suatu sumber infra merah akan mengemisikan energi infra merah dan berjalan melalui bagian optik dari spektrometer. Kemudian, gelombang sinar akan melewati interferometer dimana sinar tersebut dipisahkan dan digabungkan kembali untuk menghasilkan suatu pola interferensi. Lalu, intensitas dari frekuensi sinar ditransmisikan dan diukur oleh detektor. Hasil dari detektor adalah interferogram, yaitu suatu daerah waktu yang menggambarkan pola interferensi. Dengan adanya ADC (*analog to digital converter*) akan mengubah pengukuran tersebut menjadi suatu format digital yang dapat digunakan oleh komputer. Kemudian interferogram diubah menjadi suatu pita spektrum tunggal (*single beam spectrum*) oleh FFT (*Fast Fourier Transform*).

### 2.9.2. Kromatografi Gas Spektroskopi Massa (GC-MS)

GC-MS adalah metode yang menggabungkan kromatografi gas dan spektroskopi massa untuk mengidentifikasi zat dalam sampel (komponen penyusun). Skema Alat GC-MS dapat dilihat pada Gambar 2.8.



Gambar 2.10. Skema Alat GC-MS<sup>[29-30]</sup>

Prinsip kerja GC-MS dimulai dari senyawa sampel yang akan ditembak oleh arus elektron dan menyebabkan senyawa terpisah menjadi fragmen. Fragmen ini dapat lebih besar atau lebih kecil dari molekul aslinya. Fragmen sebenarnya adalah muatan ion dengan massa tertentu. Massa fragmen jika dibagi muatan disebut perbandingan massa per muatan ( $M/Z$ ).  $M/Z$  biasanya mewakili berat molekul fragmen. Empat elektromagnet (quadropole) akan memfokuskan fragmen melewati celah menuju detektor. Quadropole diprogram oleh komputer untuk hanya mengarahkan fragmen  $M/Z$  tertentu yang melewati celah. Sisanya akan terpental menjauh. Komputer memiliki siklus quadropole untuk  $M/Z$  berbeda hingga semua daerah  $M/Z$  telah terdeteksi. Siklus ini berlangsung berkali-kali per

detik. Setiap siklus disebut *scan*. Komputer merekam grafik pada setiap *scan*. Sumbu x mewakili rasio perbandingan M/Z. Sumbu y mewakili intensitas sinyal untuk setiap fragmen terdeteksi selama *scan*. Grafik ini disebut spektrum massa. Spektrum massa yang dihasilkan oleh senyawa kimia biasanya sama untuk setiap waktu. Oleh karena itu, spektrum massa sangat penting untuk mengidentifikasi senyawa. Komputer GC-MS memiliki literatur spektrum yang bisa digunakan untuk mengidentifikasi senyawa kimia yang tidak diketahui. Literatur akan membandingkan spektrum massa dari komponen sampel dan membandingkan dengan spektrum massa dari literatur. Hasilnya berupa identifikasi bersama dengan probabilitas kemiripan secara statistik.

## 2.10. Kinetika Reaksi.

### 2.10.1. Teori dasar kinetika reaksi kimia

Kinetika reaksi dapat didefinisikan ilmu yang mempelajari kecepatan reaksi kimia serta faktor-faktor yang mempengaruhi laju reaksi tersebut<sup>[31]</sup>

Faktor-faktor yang mempengaruhi laju reaksi antara lain:

- Konsentrasi
- Tekanan
- Temperatur
- Katalis

Salah satu cara penentuan kinetika reaksi adalah melalui pengukuran konsentrasi selama reaksi berlangsung.

Bila Suatu reaksi berjalan menurut persamaan :



Maka Persamaan laju Reaksinya sebagai berikut:

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = kC_A^n \quad \dots\dots\dots (10)$$

- Dimana:
- $r_B$  = laju reaksi (lt / menit)
  - $C_A$  = konsentrasi komponen A (mol/lt)
  - $k$  = konstanta laju reaksi ( $\text{min}^{-1}$ )
  - $n$  = orde reaksi
  - $t$  = waktu (menit)



Persamaan laju reaksi diatas menunjukkan pengaruh dari perubahan konsentrasi reaktan terhadap laju reaksi.

Perubahan ini digambarkan secara matematis oleh persamaan Arrhenius sebagai berikut:

$$k = A e^{-\frac{E_A}{RT}}$$

activation energy  
 ↓  
 $E_A$   
 ↓  
 $RT$   
 ← kelvin temperature  
 ← the gas constant  
 ← mathematical quantity, e  
 ← frequency factor or pre-exponential factor  
 ← rate constant

.....(11)

Arti dari berbagai simbol diatas:

- *Temperatur atau suhu, T*  
Agar berlaku dalam persamaan, suhu harus diukur dalam kelvin.
- *Konstanta atau tetapan gas, R*  
Tetapan ini datang dari persamaan,  $pV=nRT$ , yang berhubungan dengan tekanan, volume dan suhu dalam jumlah tertentu dari mol gas.
- *Energi aktivasi,  $E_A$*   
Ini merupakan energi minimum yang diperlukan bagi reaksi untuk berlangsung. Agar berlaku dalam persamaan, kita harus mengubahnya menjadi satuan Joule per mole, bukan  $\text{kJ mol}^{-1}$
- *e*  
Harga dari satuan ini adalah 2.71828 ... dan ini merupakan satuan matematis seperti layaknya pi.
- *Ekspresi,  $e^{-\frac{E_A}{RT}}$*   
Ekspresi ini menghitung fraksi dari molekul yang berada dalam keadaan gas dimana memiliki energi yang sama atau lebih dari energi aktivasi pada suhu tertentu.

- *Faktor frekwensi, A*

Kita juga dapat menyebut ini sebagai faktor pre-eksponensial atau faktor sterik. A merupakan istilah yang meliputi faktor seperti frekwensi tumbukan dan orientasinya. A sangat bervariasi bergantung pada suhu walau hanya sedikit. A sering dianggap sebagai konstanta pada jarak perbedaan suhu yang kecil.

Kita dapat mengalikan kedua sisinya pada pers.(11) dengan "ln" sehingga menjadi persamaan:

$$\ln k = \ln A - \frac{E_A}{RT} \dots\dots\dots(12)$$

Bila kita substitusikan persamaan (11) ke persamaan (10) maka akan didapatkan hubungan sebagai berikut:

$$-\frac{dC_A}{dt} = A.e^{-\frac{E_A}{RT}}.C_A^n \dots\dots\dots(13)$$

**2.10.2. Penurunan Rumus Reaksi SJO menjadi Biosolar**

Bila dalam penelitian kali ini diketahui beberapa kondisi sebagai berikut:

1. Reaksi  $A \xrightarrow{k} B$

Dimana: A = SJO

B = Biosolar

K = konstanta kecepatan reaksi (lt/menit)

2. Komponen

- SJO

Komponen	Komposisi (%massa)
C12:0	4.99
C16:0	8.66
C18:0	12.9
C18:1	21.3
C18:2	46.26
C24:6	0.65
Lain	4.71
Total	99.47

- Biosolar (Produk thermal cracking), senyawa hidrokarbon jenuh dengan rentang C5-C29
3. Sistem reaktor ideal
  4. Aliran reaktor batch
  5. Bentuk reaktor Packed bed reactor
  6. Reaktor Non katalitik
  7. Reaktor homogen
  8. Kondisi operasi reaktor adalah isothermal

Dengan mengasumsikan beberapa faktor, misalkan:

1. Volume campuran tetap
2. Panas reaksi pada interval suhu reaksi tidak berubah (tetap)
3. Kapasitas panas campuran tetap Campuran bersifat homogen
4. Panas yang diserap tangki diabaikan

Maka dapat kita buat persamaan kinetika sebagai berikut:

Neraca Massa :

$$\begin{array}{rclcl}
 \text{Rate} & & \text{Rate} & & \\
 \text{Input} & - & \text{Rate Output} & - & \text{Rate. Acc} \\
 & & & & \text{Reaksi} \\
 0 & - & 0 & - & V k C_A^n = \frac{d}{dt} V(C_A) \dots\dots\dots(14)
 \end{array}$$

Karena V konstan, maka persamaan (14) menjadi:

$$- \frac{dC_A}{dt} = k C_A^n \dots\dots\dots(15)$$

Dimana:  $C_A$  = konsentrasi komponen SJO (massa komponen A/massa total)

$k$  = konstanta laju reaksi ( $\text{min}^{-1}$ )

$n$  = orde reaksi

$t$  = waktu (menit)

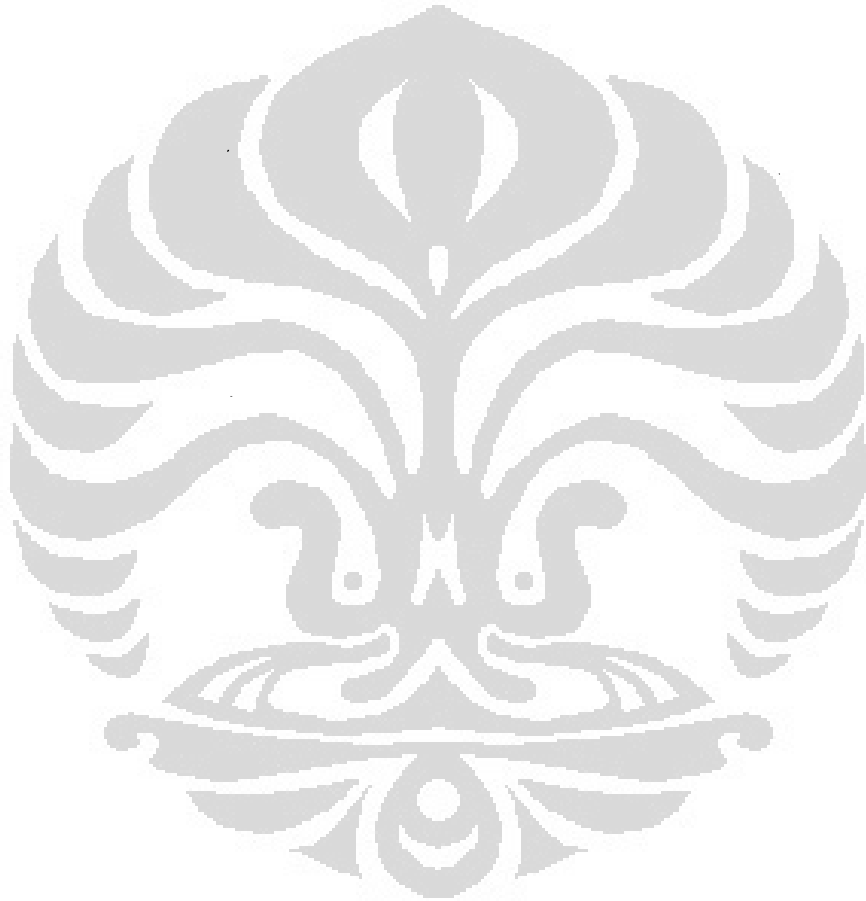
$-\frac{dC_A}{dt}$  = perubahan massa komponen SJO /perubahan waktu

Misal  $-\frac{dC_A}{dt} = Y$

Apabila kita kalikan dengan ln pada kedua sisinya maka persamaan (15) akan menjadi:

$$\ln Y = \ln k + n \ln C_A \quad \dots\dots\dots(16)$$

Dari persamaan (16) apabila dibuat grafik hubungan antara ln Y vs ln C<sub>A</sub> akan didapatkan harga k=intersep dan orde reaksi = slope



# BAB III

## METODE PENELITIAN

### 3.1. Tempat dan Lokasi Penelitian

Penelitian ini dilakukan di Laboratorium Rekayasa Produk Kimia dan Bahan Alam Departemen Teknik Kimia Universitas Indonesia, Depok, Indonesia.

### 3.2. Tahapan Penelitian

#### 3.2.1. Tahap persiapan alat dan bahan

Alat:

• Reaktor <i>stainlesssteel</i>	• Ball pipet
• Stopwatch	• Picnometer
• <i>Thermocouple</i>	• Pipet tetes
• <i>Pressure gauge</i>	• Statip+klem
• <i>Furnace</i>	• FTIR
• Biuret	• GCMS
• Pompa + kondensor	• Viskometer

Pada tahap ini dibuat *reactor batch* dari bahan *stainlesssteel* untuk proses *thermal cracking* yaitu sebuah reaktor yang dapat dioperasikan pada suhu dan tekanan tinggi dengan kapasitas sampel 20 ml.

Bahan:

1. Minyak jarak
2. N<sub>2</sub> UHP

### 3.2.2. Tahap *Blank Test*

Tahap *blank test* bertujuan untuk mendapatkan tekanan optimum yang diperlukan agar reaksi berada pada fasa cair. Adapun prosedur tahap *blank test* adalah sebagai berikut:

1. Masukkan *SJO* sebanyak 15 ml kedalam reactor kemudian tutup reactor rapat-rapat untuk menghindari masuknya oksigen.
2. Mengalirkan  $N_2$  kedalam reactor untuk *mempurge*  $O_2$  dan mengkondisikan hingga tekanan awal dalam reactor mencapai 2 bar.
3. Menaikkan suhu reactor dengan pemanas *furnace* secara perlahan.
4. Mengamati dan mencatat tekanan dan temperatur dengan membaca pada indikator perubahan tekanan yang ditunjukkan oleh alat pengontrol tekanan (*pressure gauge*) dan temperature, kondisi operasi terpenuhi apabila tekanan mengalami kenaikan secara linier terhadap temperature.
5. Menghentikan proses dengan cara mematikan *furnace*, apabila tekanan mengalami kenaikan tidak linier terhadap temperatur.
6. Melakukan pengulangan prosedur diatas untuk berbagai variasi tekanan awal.
7. Melakukan ekstrapolasi tekanan awal untuk suhu reaksi  $400^\circ C$

### 3.2.3. Tahap reaksi *thermal cracking*

Tahap reaksi *thermal cracking* dilakukan menggunakan minyak jarak semi mulus (*SJO*) sebagai reaktan dan reactor *semi batch* yang dibuat dari bahan *stainless steel*. Sebelum reaksi,  $O_2$  dalam reactor *dipurge* menggunakan  $N_2$ . Perengkahan dilakukan pada suhu operasi (T)  $325^\circ C$  hingga  $375^\circ C$  dengan waktu operasi (t) 5 hingga 30 menit. Berikut ini prosedur reaksi *thermal cracking*:

1. Masukkan *SJO* sebanyak 15 ml kedalam reactor kemudian tutup reactor rapat-rapat untuk menghindari masuknya oksigen.
2. Mengalirkan  $N_2$  kedalam reactor untuk *mempurge*  $O_2$  dan mengkondisikan hingga tekanan dalam reactor mencapai 18 bar.
3. Menaikkan suhu reactor dengan pemanas *furnace* hingga suhu  $325^\circ C$
4. Reaksi berjalan pada suhu  $325^\circ C$

5. Mengamati indikator perubahan tekanan yang ditunjukkan oleh *pressure gauge*.
6. Mencatat waktu reaksi (mulai ketika suhu furnace 325°C) untuk waktu 5-30 menit
7. Mengulangi prosedur diatas untuk suhu 350 dan 375°C selama t menit tadi.

### 3.2.4. Tahap analisa

Tahap analisis dilakukan untuk mengetahui perubahan kondisi awal sampel dan produk *thermal cracking* terhadap komponen penyusun, viskositas, densitas, angka setana dan bilangan iodin dengan analisis menggunakan FTIR, GC-MS, ASTM D 445-7, ASTM D 287, dan ASTM D 613-95

#### 3.2.4.1. Penentuan Densitas (ASTM D 928)

Penentuan densitas dilakukan dengan menggunakan piknometer 10 ml, dengan prosedur sebagai berikut:

- Memastikan bahwa piknometer benar-benar dalam keadaan kering
- Menimbang piknometer kosong dan mencatat massanya
- Memasukkan sampel hasil perengkahan kedalam piknometer sampai batas sampel
- Menutup piknometer dan memastikan tidak ada gelembung udara
- Menimbang piknometer berisi sampel dan mencatat massanya.
- Menghitung densitas sampel

$$\rho = \frac{m_1 - m_0}{V_{\text{piknometer}}}$$

Dimana:  $\rho$  = densitas (gr/cm<sup>3</sup>)

$M_1$  = massa piknometer + sampel

$M_0$  = massa piknometer kosong

$V_{\text{pikno}}$  = Volume piknometer

### 3.2.4.2. Penentuan Viskositas (ASTM D 445)

Penentuan viskositas sampel diukur dengan menggunakan viskometer dengan cara mencatat waktu yang diperlukan fluida untuk mengalir dari batas atas ke batas bawah reservoir kecil. Prosedure dalam penentuan viskositas sebagai berikut:

- Masukkan sampel kedalam viskometer hingga tiga perempat bagian reservoir besar terisi.
- Menghisap sampel kedalam reservoir kecil bagian atas hingga tanda batas, tahan permukaan sample dalam viskometer dengan penghisap karet.
- Mengukur waktu yang diperlukan sample untuk mengalir dalam reservoir kecil dari batas atas hingga batas bawah, dengan cara melonggarkan penghisap karet pelan-pelan agar permukaan cairan dalam reservoir kecil turun. Pada saat permukaan aliran cairan mulai turun, waktu mulai dihitung dan saat cairan mencapai batas bawah maka pencatatan waktu dihentikan.
- Mencatat semua waktu yang diperlukan untuk setiap sampel
- Menghitung viskositas sampel dengan menggunakan rumus:

$$\frac{\mu_1}{\mu_2} = \frac{\rho_1 t_1}{\rho_2 t_2}$$

Dengan:  $\rho_1$  = densitas senyawa referensi

$\rho_2$  = densitas sampel

$\mu_1$  = viscositas senyawa referensi

$\mu_2$  = viscositas sampel

$t_1$  = waktu senyawa referensi melewati viscometer

$t_2$  = waktu sample melewati viscometer

### 3.2.4.3. Bilangan Iodin

#### 3.2.4.3.1. Pembuatan larutan Soluble Starch

- Membuat pasta dari 1 kg kanji dan sedikit aquadest, sambil diaduk
- Membuat larutan dengan menambahkan 200ml aquadest panas pada pasta.



- Melarutkan 5 ml larutan diatas dengan 100 ml aquadest
- Menambahkan 1 ml larutan WIJS.
- Titrasi larutan diatas dengan larutan  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$  0.1 N hingga warna biru pekat hilang

#### 3.2.4.3.2. Pembuatan Larutan $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ 0.1 N

- Melarutkan 24.9  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$  gram dalam 1 lt aquadest

#### 3.2.4.3.3. Analisa Sample

- Menimbang 0.5 gr sampel kedalam labu iodine yang kering
- Menambahkan 10 ml  $\text{CCl}_4$  dan kocok untuk memastikan bahwa sampel telah larut sempurna.
- Menambahkan 10 ml larutan WIJS kedalam labu, kocok agar tercampur.
- Memasang timer 30 menit, menyimpan labu ditempat yang gelap pada suhu kamar.
- Mengeluarkan labu dan menambahkan 10 ml larutan KI 15%
- Menambahkan 25 ml air demin, kocok agar tercampur.
- Melakukan titrasi dengan larutan  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$  0.1 N secara perlahan hingga warna kuning hampir hilang.
- Menambahkan 2 ml larutan kanji dan melakukan titrasi kembali secara perlahan hingga warna biru hilang

#### 3.2.4.4. Angka Setana (ASTM D 613-95)

- Melakukan memasukkan 10 ml sampel kedalam kolom distilasi.
- Memanaskan kolom secara bertahap.
- Mencatat data temperature pada termokopel pada saat solar terevaporasi sebanyak 50%
- Memasukkan nilai yang didapat kedalam persamaan:

$$\text{CN} = \text{CI} - 2 \dots\dots\dots (1)$$

$$\text{CI} = 0.49083 + (1.06577X) - (0.001052X^2) \dots\dots\dots (2)$$

$$X = 97.833(\log TT_{50})^2 + (2.2088 G \lg TT_{50}) + 0.0127 G^2 - (423.51 \lg TT_{50}) - 4.78008 G + 419.59 \dots \dots \dots (3)$$

Dengan:

CN= *cetane number* (angka setana)

CI = indeks setana atau prediksi dari bilangan setana

G = API gravity

TT<sub>50</sub>= suhu distilasi dalam derajat fahrenheit untuk 50% distilat yang terbentuk

### 3.3. Tahap Pengolahan data

Pada tahap ini dilakukan pengolahan data untuk memperoleh parameter-parameter yang diinginkan:

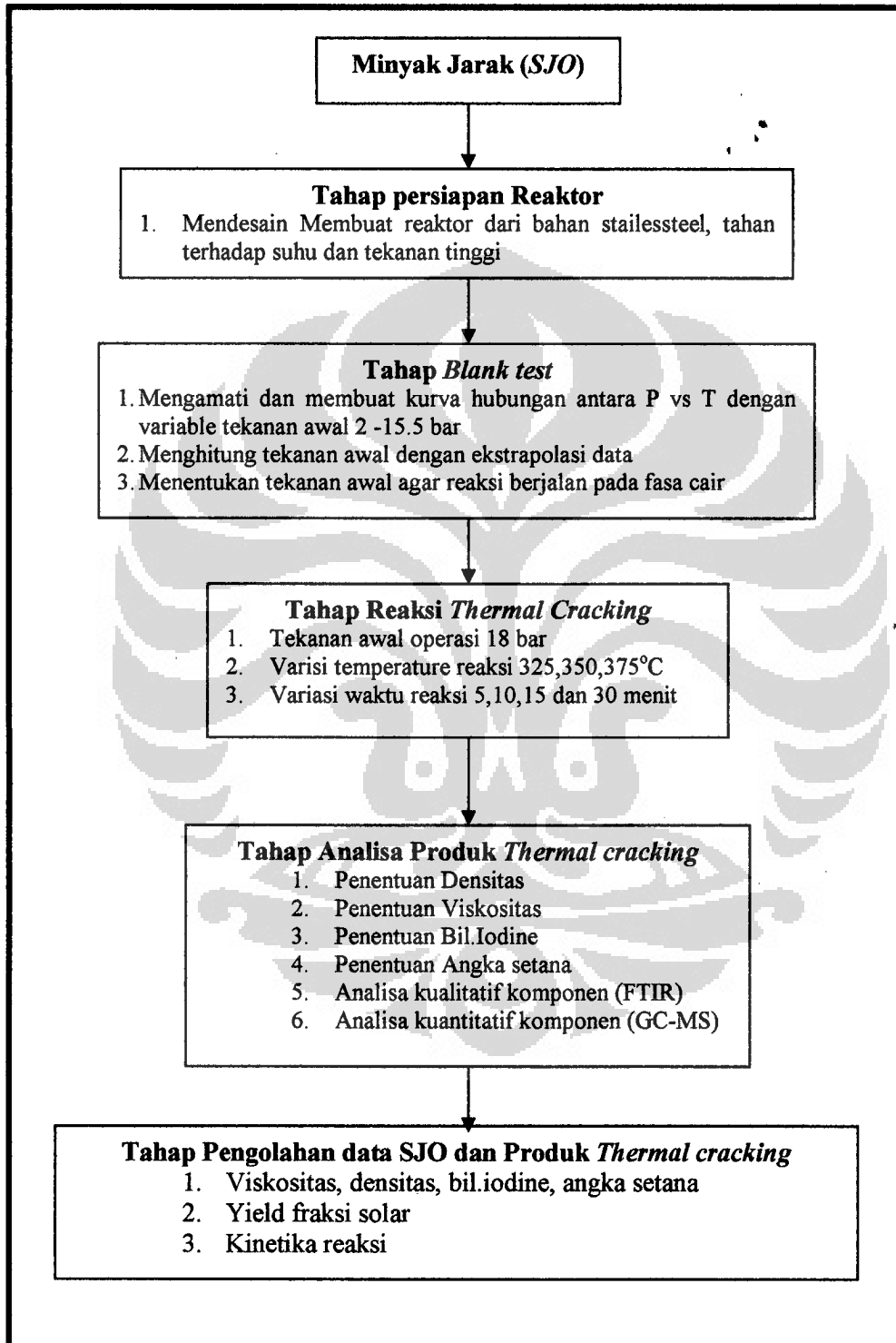
- Mengkonfersi densitas dan viskositas *SJO* dan produk *thermal cracking* untuk temperatur 15°C.
- Membandingkan karakteristik *SJO*, produk *thermal cracking* dan solar komersial.
- Perhitungan untuk kinetika reaksi secara *bulk*
- Yield dari fraksi solar yang terbentuk.

$$\text{Yield} = \frac{\text{Massa Hidrokarbon}}{\text{Massa Reaktan}} \times 100\%$$

Massa hidokarbon = massa senyawa hidrokarbon jenuh dengan rentang C<sub>5</sub>-C<sub>29</sub> yang terbentuk.

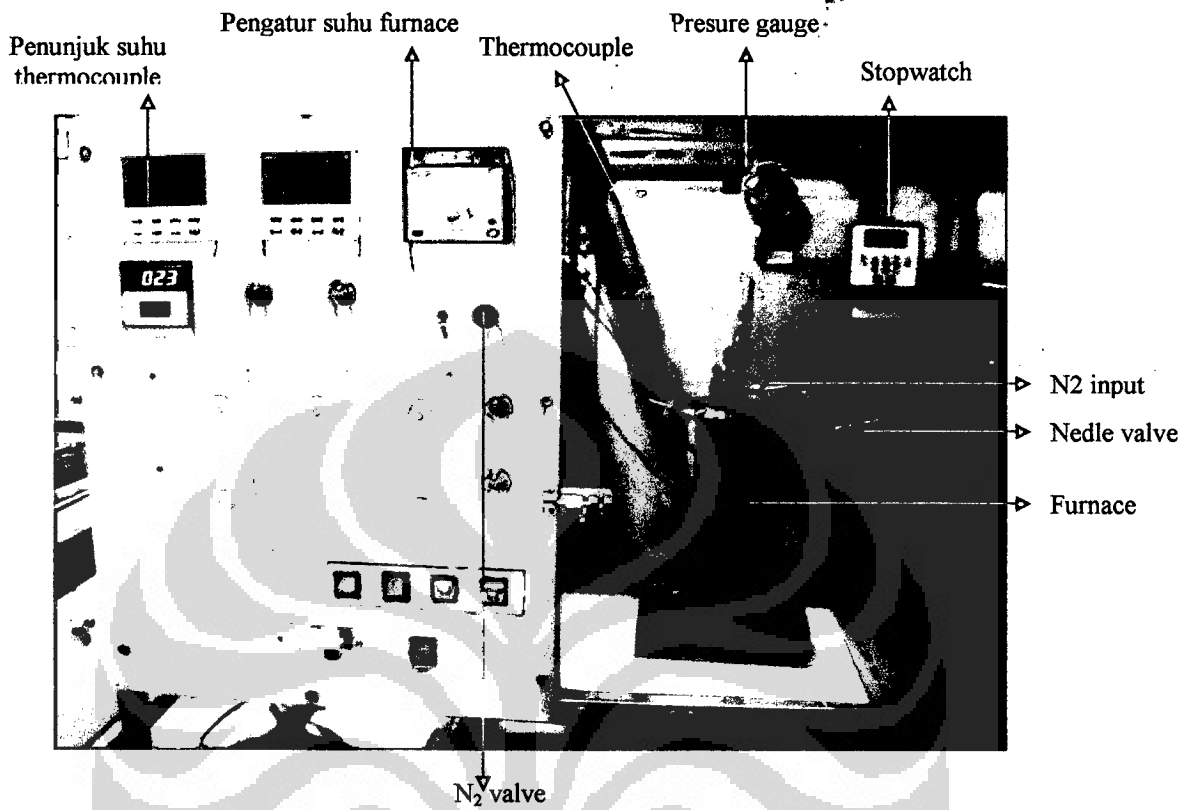
Massa reaktan = massa reaktan (*SJO*)

### 3.4. Diagram alir penelitian.



Gambar 3.1. Diagram alir penelitian

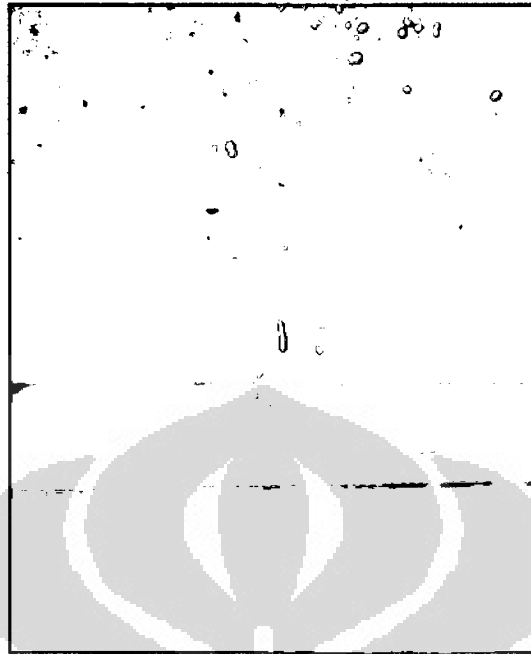
### 3.5. Gambar alat



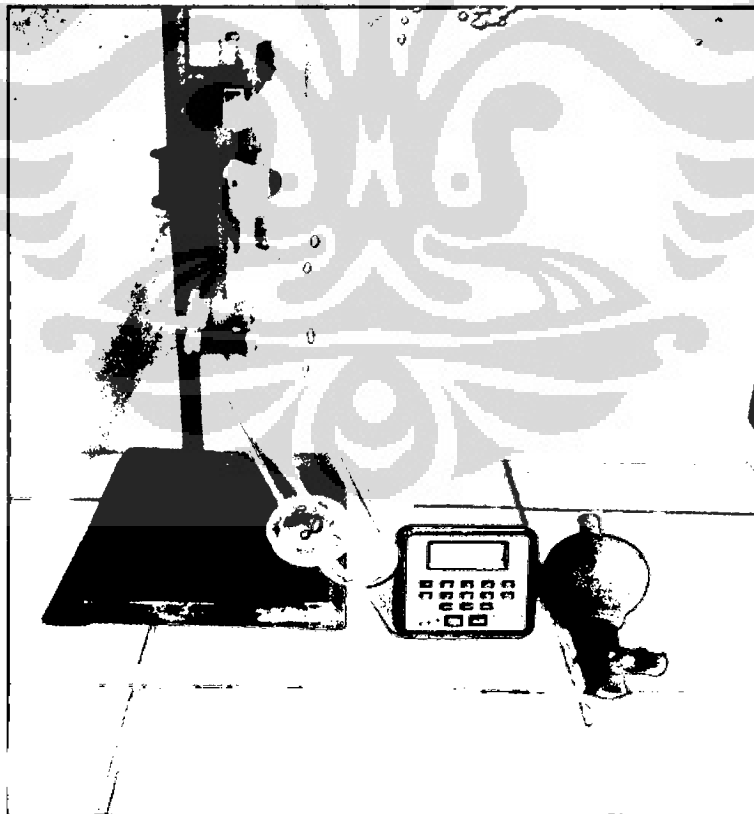
Gambar 3.2. Alat pada Tahap *blank test* dan tahap reaksi *thermal cracking*



Gambar 3.3. Alat FTIR



**Gambar 3.4.** Alat untuk analisa densitas (Piknometer)



**Gambar 3.5.** Alat untuk analisa Viskositas

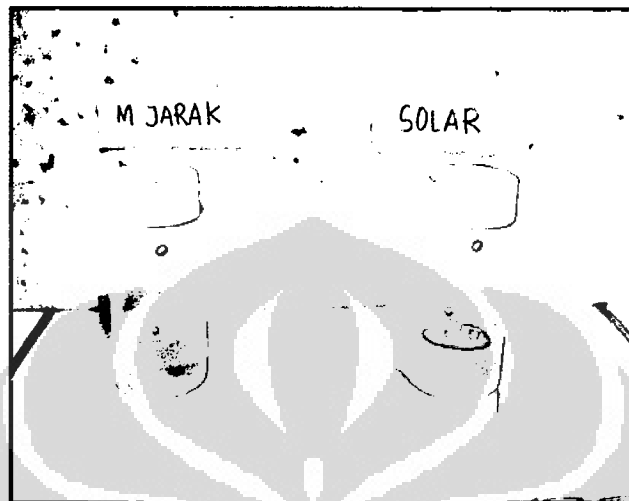


**Gambar 3.6. Alat untuk analisa Bilangan Iodin**

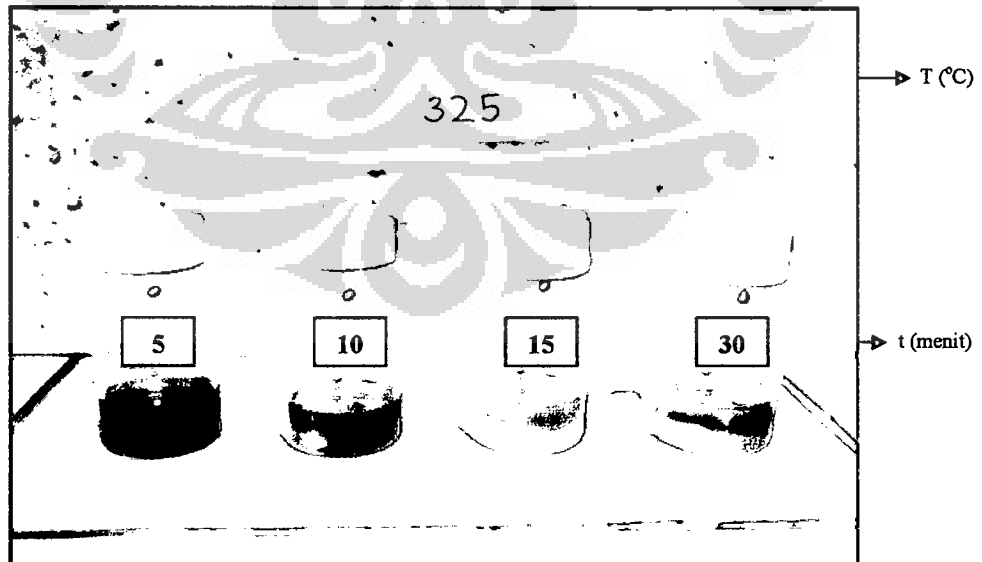


**Gambar 3.7. Alat CG-MS**

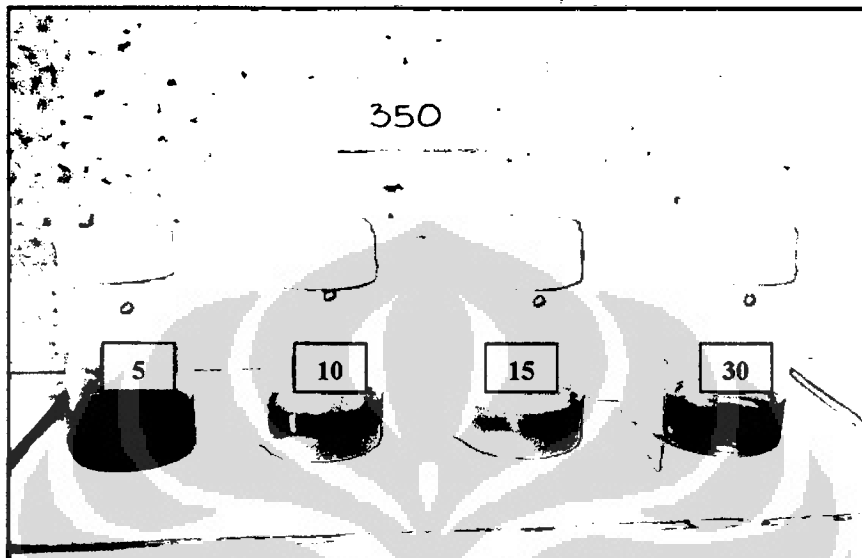
### 3.5. Gambar Sampel yang digunakan dalam penelitian



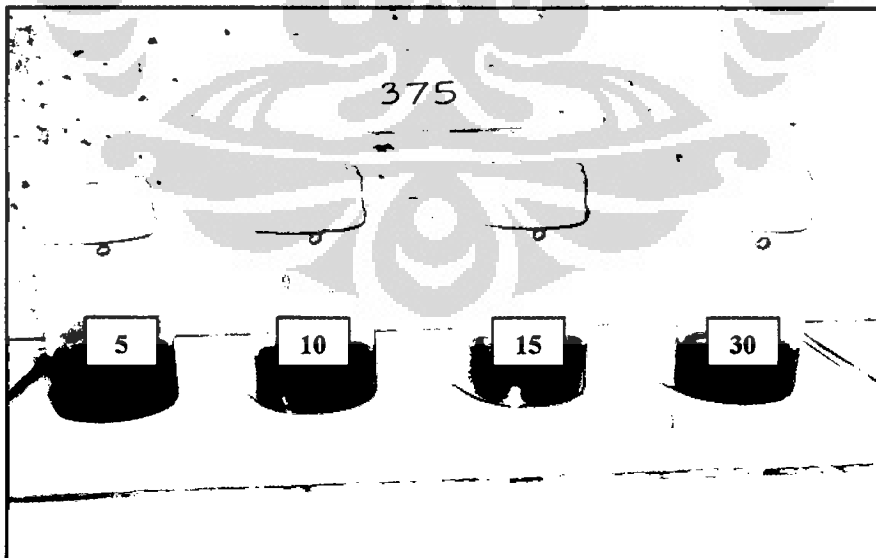
Gambar 3.8. SJO dan solar



Gambar 3.9. Produk *thermal cracking* untuk T 325°C



Gambar 3.10. Produk *thermal cracking* untuk T 350°C



Gambar 3.11. Produk *thermal cracking* untuk T 375°C



## BAB IV

### HASIL DAN PEMBAHASAN

#### 4.1. Analisa Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan teknologi *thermal cracking* yang optimum dalam merekayasa minyak jarak semi mulus (*SJO*) menjadi bahan bakar setara solar, dengan variabel suhu dan waktu reaksi.

##### 4.1.1. Persiapan Alat

Pada tahap ini dilakukan pembuatan *reactor batch* dari bahan *stainlesssteel* untuk proses *thermal cracking*, yaitu sebuah reaktor yang dapat dioperasikan pada suhu dan tekanan tinggi dengan kapasitas sampel 20 ml. Alat di rangkai sedemikian agar tekanan dan suhu didalam reaktor dapat terdeteksi setiap saat dengan pemasangan *pressure gauge* dan termokople

##### 4.1.2. Sifat Fisik dan Kimia SJO

Penentuan Sifat fisik dan kimia *SJO* dalam penelitian ini diperlukan sebagai acuan awal, sehingga setelah proses *thermal cracking* nanti dapat disimpulkan seberapa besar pengaruh reaksi *thermal cracking* dalam merekayasa *SJO* menjadi bahan bakar setara solar. Analisa awal dilakukan pada tahap *blank test* untuk menentukan komposisi zat penyusun sampel, densitas, viskositas, angka setana dan bilangan iodin dari *SJO* serta penentuan titik didih *SJO*. Dari analisa awal pada tahap *blank test* terhadap sifat fisik dan kimia *SJO* didapatkan data sebagai berikut:

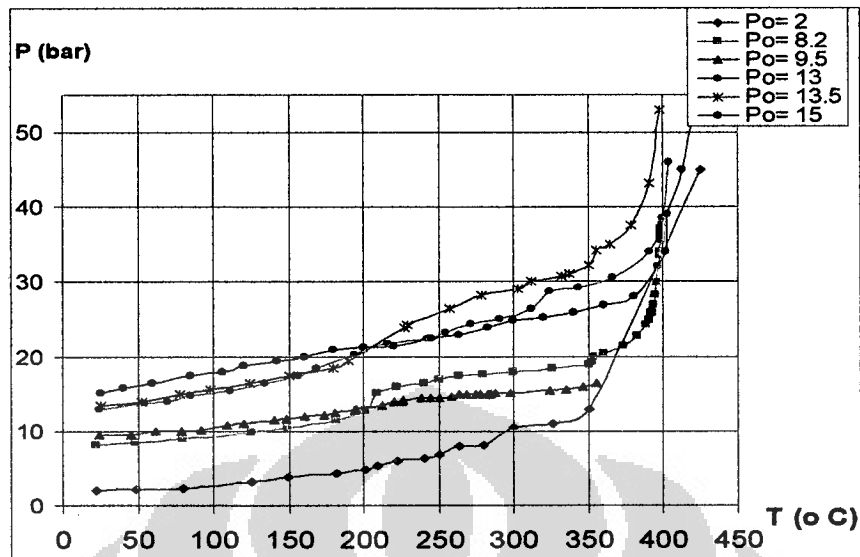
**Tabel 4.1.** Sifat fisik dan kimiawi *SJO*

Parameter	Minyak jarak ( <i>Jatropha oil</i> )
Densitas pada 24 °C (gr/cm <sup>3</sup> )	0.917
Viscositas kinematik 24 °C(cSt)	73.3253
Angka setana	40.46256
Bilangan Iodine (gr Iod/100 gr sampel) <sub>Wijs</sub>	44.960
Titik didih (1atm) (°C)	270

Tabel 4.1 diatas menunjukkan bahwa minyak jarak yang dipakai pada penelitian ini memiliki densitas, terutama viskositas yang jauh lebih tinggi dari solar, dimana densitas dan viskositas solar adalah 0.815 s/d 0.870 (gr/cm<sup>3</sup>)<sub>15°C</sub> dan 2 s/d 5 (cSt)<sub>40°C</sub>.

#### 4.1.3. Penentuan Tekanan Awal

Penentuan Tekanan awal dilakukan pada tahap *blank test*, dengan memvariasikan tekanan awal operasi dari 2 hingga 15 bar. Selanjutnya mengamati dan mencatat tekanan dan suhu operasi, dengan membaca perubahan tekanan yang ditunjukkan *pressure gauge* dan suhu yang ditunjukkan pada alat pembaca skala termokopel. Apabila tekanan mengalami kenaikan tidak linier terhadap suhu, maka proses dihentikan dengan cara mematikan *furnace*. Dari penelitian didapatkan data sebagai berikut:



**Gambar 4.1.** Grafik Tekanan vs suhu pada reaksi *thermal cracking* dengan variasi tekanan awal

Gambar 4.1 diatas menunjukkan apabila diinginkan kondisi operasi berada pada fasa cair, maka untuk suhu operasi dibawah 350°C dapat menggunakan tekanan awal 9.5 bar. Apabila operasi dilakukan diatas suhu 350°C tekanan awal 9.5 bar sudah tidak memenuhi kondisi operasi pada fasa cair lagi, karena hubungan antara tekanan dan suhu sudah tidak linier, yang diakibatkan oleh perubahan sebagian reaktan menjadi berfase gas<sup>[11]</sup>.

Pada penelitian ini, produk *thermal cracking* yang berupa hidrokarbon rantai pendek bercampur dengan trigliserida yang tidak terengkah dan campuran ini diberi nama biosolar. Berdasarkan peneliti sebelumnya<sup>[10]</sup>, produk *thermal cracking* dari *rapseed oil* memiliki komposisi terbesar berupa C<sub>10</sub>-C<sub>14</sub> dengan suhu operasi diatas 500°C. Apabila pada penelitian ini produk yang diinginkan adalah bahan bakar setara solar, dimana solar mempunyai rentang C<sub>8</sub>-C<sub>29</sub> (lampiran 3, data GC-MS solar komersial) dan titik didih solar adalah 270°C maka suhu operasi *thermal cracking* cukup dikondisikan dibawah 500°C. Dari Gambar 4.1 diatas apabila dilakukan ekstrapolasi maka tekanan awal yang digunakan untuk suhu operasi antara 300 – 400°C adalah 18 bar.

#### 4.1.4. Senyawa Penyusun SJO

Pada tahap awal juga dianalisa senyawa penyusun *SJO* dengan menggunakan GC-MS. Diketahui komponen *SJO* sebagai berikut:

**Tabel 4.2** Senyawa penyusun *SJO* sebelum di *cracking*

Komponen	Komposisi (%) <i>massa</i>
C12:0	4.99
C16:0	8.66
C18:0	12.9
C18:1	21.3
C18:2	46.26
C24:6	0.65
Lain	4.71
Total	99.47

Tabel 4.2 diatas menunjukkan *SJO* tersusun dari senyawa hidrokarbon tak jenuh (C18:1, C18:2 dan C24:6) dalam jumlah yang relatif besar yaitu 68.21%. Bila dibandingkan dengan solar komersial hidrokarbon tak jenuh hanya C14:1 dengan jumlah 0.99% (lihat lampiran 3). Banyaknya hidrokarbon tak jenuh inilah yang menyebabkan viskositas *SJO* sangat tinggi.

#### 4.1.5. Tahap Thermal Cracking

Tahap *thermal cracking* dilakukan pada tekanan awal 18 bar dengan variabel suhu (325, 350 dan 375 °C) dan waktu operasi (5, 10 ,15 dan 30 menit). Kondisi tekanan awal dan suhu pada penelitian ini sesuai dengan kondisi operasi *thermal cracking* yang dilaporkan peneliti terdahulu<sup>[10,11,17-19]</sup>.

#### 4.1.6. Densitas dan Viskositas Biosolar

Data densitas dan viskositas biosolar menunjukkan dengan semakin tinggi suhu dan waktu reaksi semakin lama akan mengalami penurunan, namun hal ini tidak selamanya konsisten karena ketika suhu reaksi 375°C viskositas dan densitas justru mengalami kenaikan. Keadaan ini didukung oleh data GC-MS bawa pada suhu 375°C ternyata telah terbentuk senyawa C<sub>29:1</sub>(lihat tabel 4.6). Data densitas dan viskositas Biosolar disajikan pada Tabel 4.3 dan 4.5 dibawah ini:

**Tabel 4.3. Densitas biosolar**

t (menit)	Suhu Operasi (°C)		
	Densitas (gr/cm <sup>3</sup> ) <sub>24°C</sub>		
	325	350	375
0	0.9174	0.9174	0.9174
5	0.9162	0.9162	0.9153
10	0.9158	0.9140	0.9108
15	0.9140	0.9054	0.9124
30	0.9137	0.9038	0.9146

**Tabel 4.4 Viskositas Biosolar**

t (menit)	Suhu Operasi (°C)			
	Viskositas kinematik (cSt) <sub>24°C</sub>			
	25	325	350	375
0	73.3253	73.3253	73.3253	73.3253
5	73.3253	59.8499	56.8456	111.1485
10	73.3253	59.7709	50.9441	109.3863
15	73.3253	59.3756	54.4763	127.1053
30	73.3253	64.1983	54.5211	132.2252

Tabel 4.3 dan 4.4 menunjukkan telah terjadi penurunan densitas dan viskositas pada biosolar. Tetapi pada suhu 375°C mengalami kenaikan, hal ini menunjukkan terjadinya reaksi propagasi antara radikal bebas rantai panjang hidrokarbon tak jenuh yang menyerang senyawa hidrokarbon jenuh, membentuk senyawa hidrokarbon C<sub>29</sub>:1. Dari Tabel 4.3 dan 4.4 diketahui bahwa penurunan terbesar viskositas dari 73.3253 cSt menjadi 72.0768 s/d 54.2693 terjadi pada suhu 325 dan 350°C dengan waktu reaksi 5 -10 menit. Suhu dan waktu reaksi ini dianggap optimum karena untuk waktu hingga 30 menit penurunan densitas hanya mencapai 53.8780 cSt. Namun apabila dibandingkan dengan solar komersial, densitas dan viskositas dari biosolar ini masih berbeda jauh .

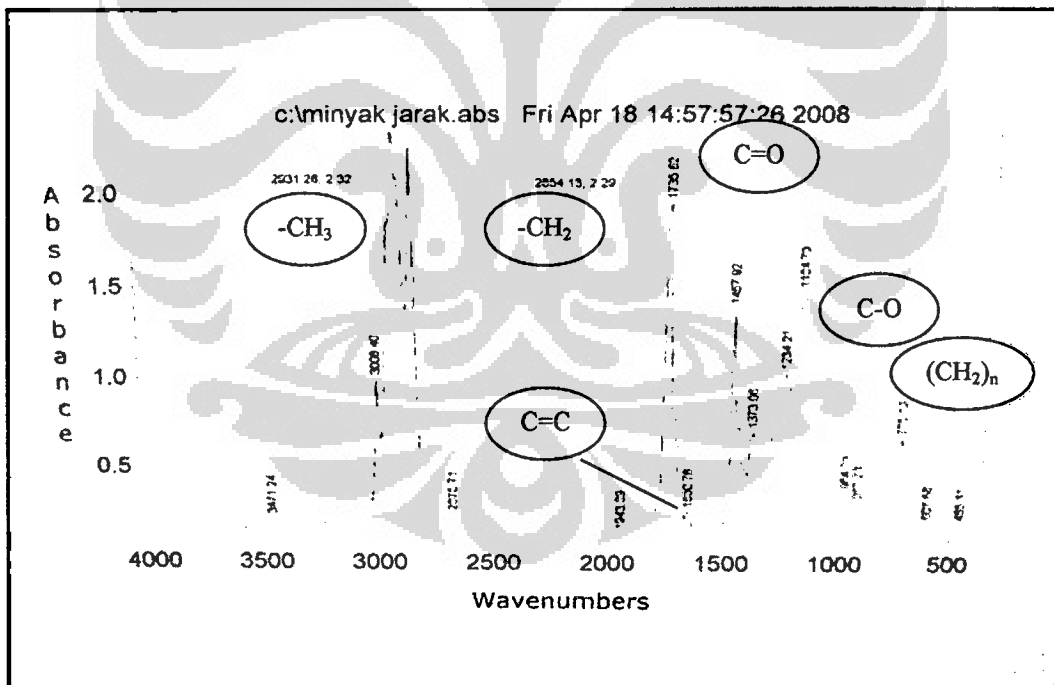
## 4.2. Analisa Komponen Penyusun Produk *Thermal Cracking*

### 4.2.1. Analisa FTIR

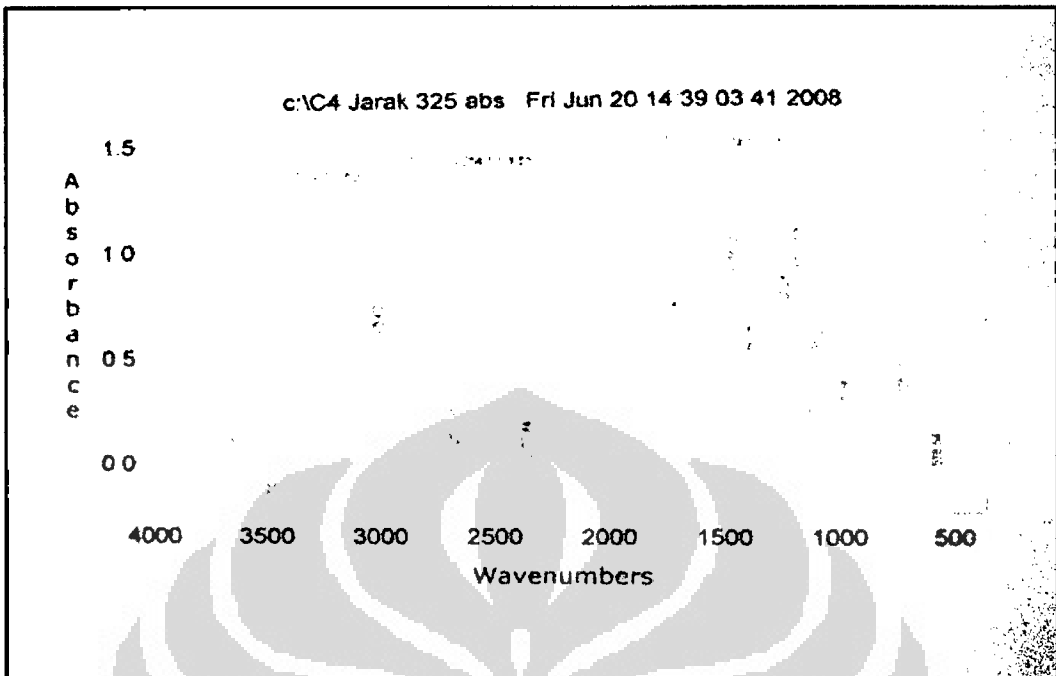
Untuk memastikan telah terjadi perubahan struktur molekul trigliserida dalam biosolar, dilakukan analisa kualitatif menggunakan FTIR. Melalui metode ini dapat diperhatikan gugus-gugus apa saja yang mengalami perubahan.

Hasil FTIR dari minyak jarak menunjukkan bahwa *SJO* (lihat Gambar 4.2.a) memiliki berbagai ikatan dominan antara lain ikatan C-H pada  $-CH_3$  pada  $2931.26\text{ cm}^{-1}$ , ikatan C-H pada  $-CH_2$  pada  $2854.13\text{ cm}^{-1}$ , ikatan C=O pada  $1735.62\text{ cm}^{-1}$ , ikatan C=C pada  $1650.76$ , ikatan O-C=O (ester) pada  $1164.79\text{ cm}^{-1}$  serta ikatan  $(CH_2)_n$  pada  $725.10\text{ cm}^{-1}$ .

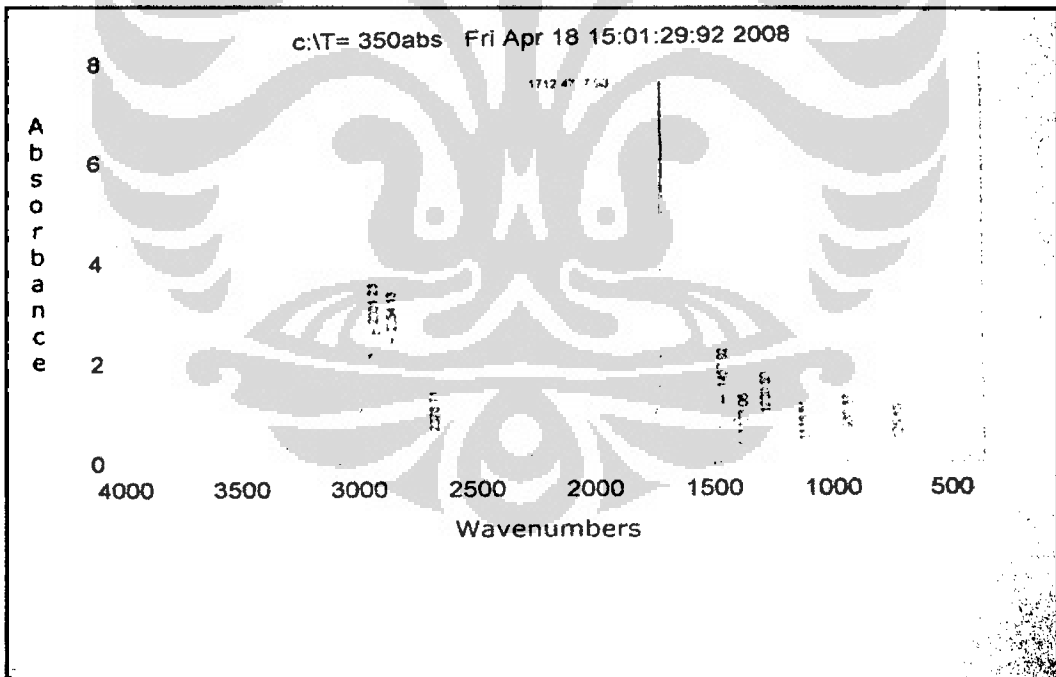
Hasil Spektrum FTIR dari *SJO* dan biosolar ditunjukkan pada gambar berikut ini:



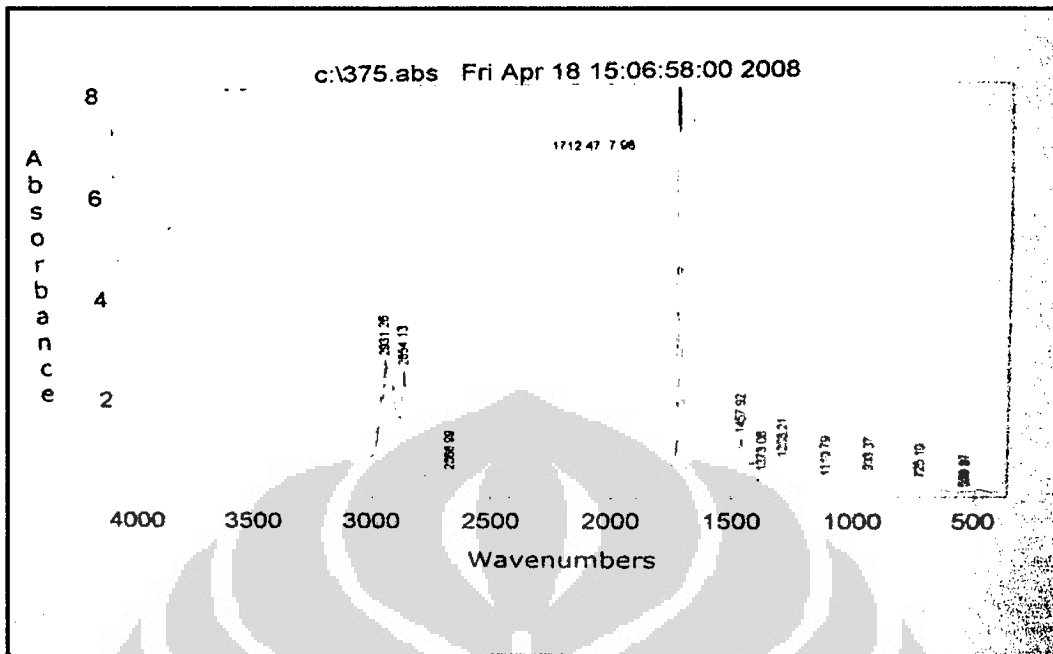
a



b



c



Gambar 4.2. Spektrum FTIR dari (a) *SJO* dan biosolar pada suhu (b)325°C, (c)350 °C, (d)375 °C

Perbandingan spektrum FTIR sebelum dan setelah reaksi, menunjukkan terjadinya reaksi *cracking*. Hal ini terlihat dari perubahan intensitas absorbansi dari beberapa ikatan antar atom yang dihitung relatif terhadap standar komponen pada panjang gelombang 1735.62  $\text{cm}^{-1}$  yaitu ikatan C=O yang tidak mengalami perubahan. Dari spektrum FTIR *SJO* sebelum dan setelah dilakukan *cracking* dapat dibuat tabel absorbansi tiap ikatan antar atom sebagai berikut:

Tabel. 4.5 Spektrum FTIR ikatan antar atom dalam *SJO* dan biosolar

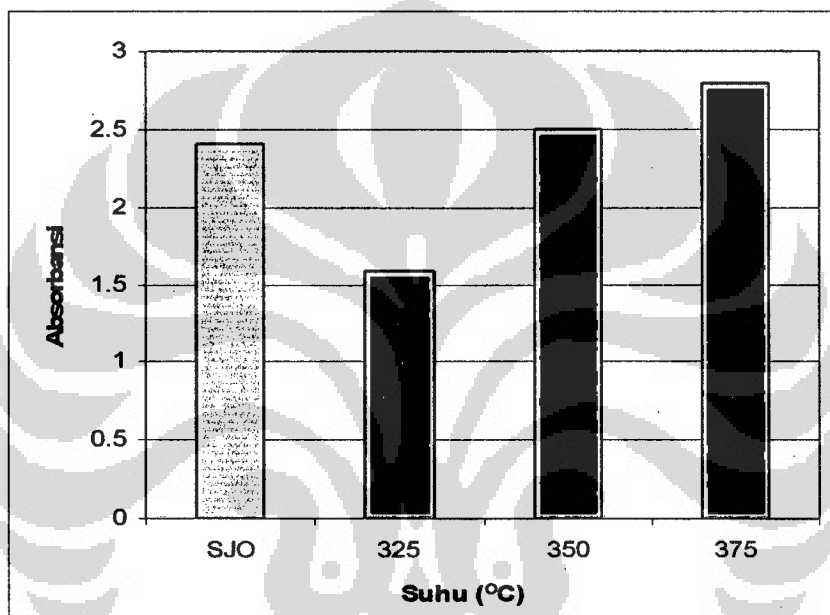
Jenis Ikatan	Panjang Gelombang ( $\text{cm}^{-1}$ )	Absorbansi			
		SJO	Suhu ( $^{\circ}\text{C}$ )		
			325	350	375
-CH <sub>3</sub>	2931.26	2.41	1.58	2.5	2.8
-CH <sub>2</sub>	2854.13	2.30	1.55	2.05	2.25
C=C	1650.76	0.22	0.15	0	0
O-C=O (ester)	1164.79	1.46	0.85	0.45	0.3
(CH <sub>2</sub> ) <sub>n</sub>	725.10	0.75	0.25	0.25	0.2



Tabel 4.5 diatas menjelaskan perbandingan absorbansi tiap ikatan antar atom yang terdapat pada *SJO* dan biosolar pada berbagai suhu reaksi. Jenis ikatan yang di analisa mempunyai pengaruh sangat besar dalam identifikasi senyawa produk *thermal cracking*.

Hubungan antara suhu dengan hasil spektrum FTIR terhadap jenis ikatan dapat dilihat pada gambar dibawah ini:

- Ikatan  $-CH_3$

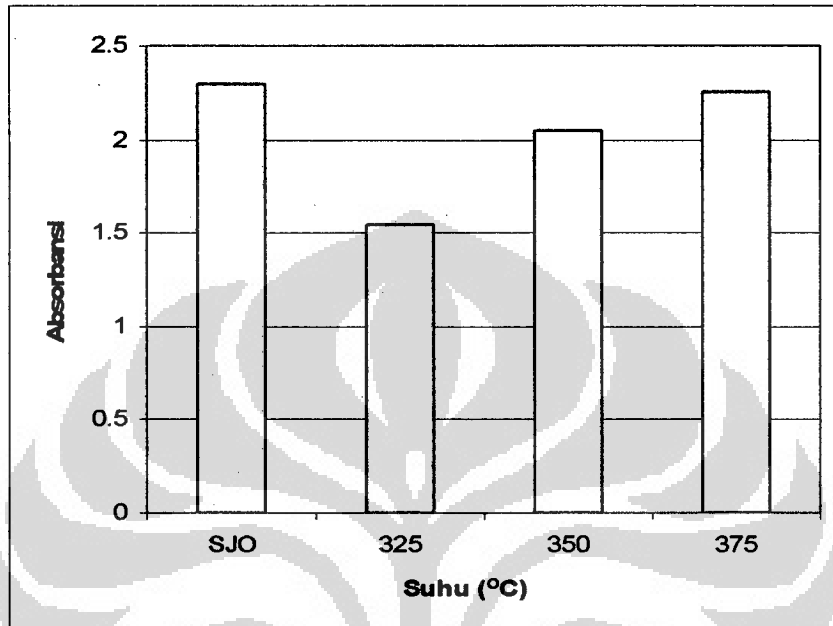


**Gambar 4.3.** Absorbansi vs suhu untuk Spektrum FTIR untuk komponen ( $-CH_3$ )

Gambar 4.3. diatas menunjukkan dengan semakin tinggi suhu reaksi maka absorbansi  $CH_3$  cenderung mengalami kenaikan yang mengindikasikan bertambahnya jumlah hidrokarbon yang terengah dan membentuk senyawa hidrokarbon baru.

- Ikatan  $-CH_2$

Jumlah ikatan  $-CH_2$  menunjukkan adanya gugus alkil pada hidrokarbon rantai panjang.



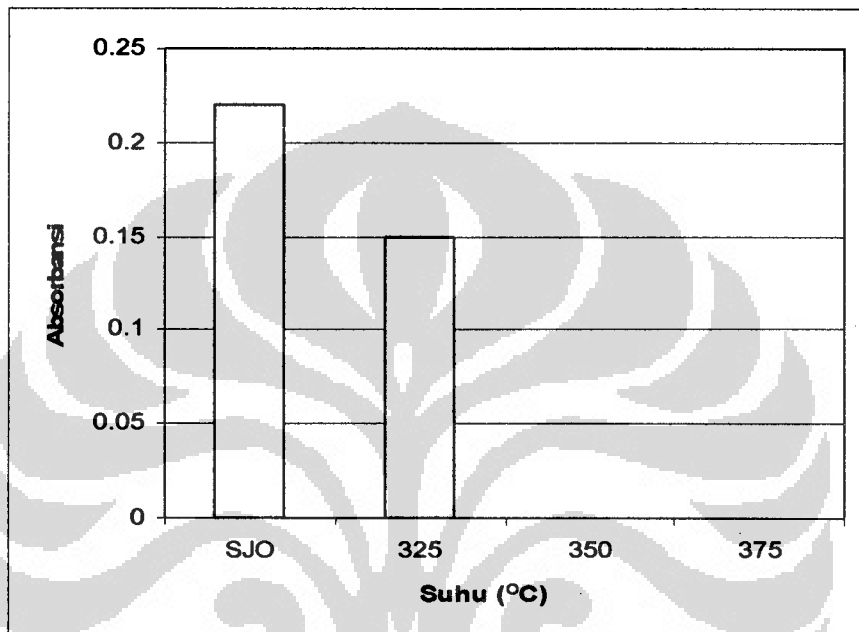
**Gambar 4.4.** Absorbansi vs suhu untuk Spektrum FTIR komponen ( $-CH_2$ )

Gambar 4.4. menunjukkan dengan semakin tinggi suhu reaksi maka absorbansi  $-CH_2$  cenderung mengalami penurunan, hal ini mengindikasikan adanya senyawa hidrokarbon yang terputus pada reaksi *thermal cracking*.

Pemutusan rantai hidrokarbon yang dimaksud adalah pemutusan dari senyawa hidrokarbon rantai panjang menjadi senyawa hidrokarbon rantai pendek dalam.

- Ikatan C=C

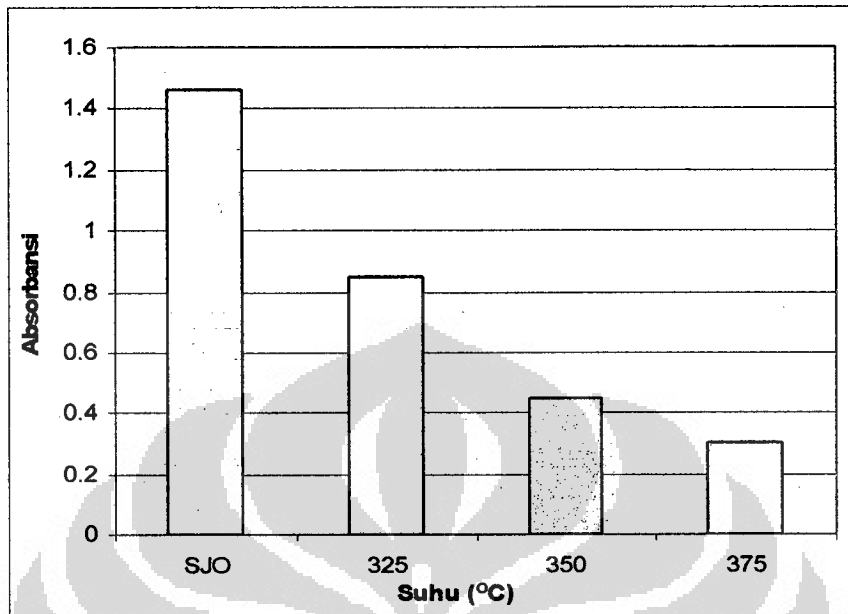
Ikatan C=C menunjukkan dalam SJO terdapat senyawa hidrokarbon tak jenuh. Hubungan antara suhu vs absorbansi ikatan antar atom C=C dapat digambarkan sebagai berikut:



**Gambar 4.5.** Absorbansi vs Suhu untuk Spektrum FTIR komponen (C=C)

Gambar 4.5 menunjukkan reaksi thermal cracking mampu mengurangi senyawa hidrokarbon tak jenuh, semakin tinggi suhu reaksi maka gugus C=C mengalami penurunan. Bahkan untuk suhu 350 °C dan 375 °C keberadaan ikatan tak jenuh tidak terdeteksi.

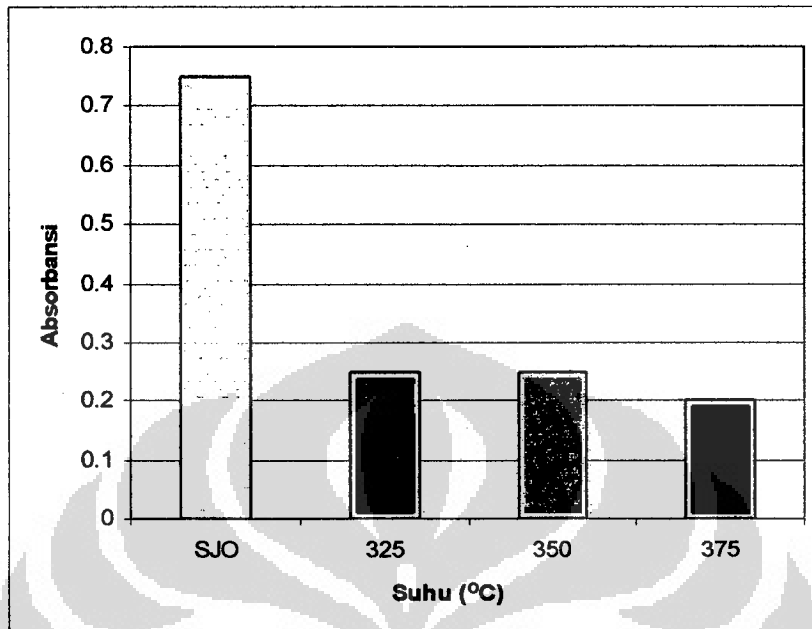
- Ikatan O-C=O (Ester)



**Gambar 4.6.** Absorbansi vs Suhu untuk Spektrum FTIR komponen (O-C=O)

Absorbansi ikatan O-C=O pada panjang gelombang  $1164.79 \text{ cm}^{-1}$  yang merupakan gugus ester. Gambar 4.6. menunjukkan semakin tinggi suhu reaksi gugus O-C=O mengalami penurunan. Hal ini menjelaskan bahwa pada reaksi *thermal cracking SJO* terjadi pelepasan gugus ester dari senyawa trigliserida.

- Ikatan (CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>



**Grafik 4.7.** Absorbansi vs Temperatur untuk Spektrum FTIR komponen (CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>

Ikatan (CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub> menunjukkan rantai pada hidrokarbon. Gambar 4.7 menunjukkan dengan semakin tinggi suhu reaksi *thermal cracking* absorbansi dari ikatan (CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub> mengalami penurunan. Dari analisa FTIR menjelaskan terjadinya proses pemutusan senyawa hidrokarbon rantai panjang dalam *SJO* terpotong menjadi senyawa hidrokarbon dengan rantai yang lebih pendek.

#### 4.2.2. Analisa GC-MS

Untuk memastikan bahwa telah terjadi perubahan struktur dalam molekul trigliserida dalam minyak jarak, dilakukan analisa kuantitatif dengan menggunakan GC-MS. Pada penelitian ini didapatkan data sebagai berikut:

**Tabel 4.6.** Data analisa GC-MS produk *thermal cracking*

Komponen	Komposisi %(massa)											
	325				350				375			
T (oC)												
t (menit)	5	10	15	30	5	10	15	30	5	10	15	30
Aromatis	0	0	0	0	8.6	5.27	6.71	0	0	0.21	0.33	0.48
C5:0	0	0	0	0	0	0.49	0	0	0	0	0	0
C6:0	0	0	0	0	0	7.57	0	0	0	0	0	0
C9:0	0	0	0	0	0	0	0.3	0	0	0	0	0
C10:0	0	0	0	0	0	0	0.24	0	0	0	0	0
C11:1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.18	0	0.19
C12:0	0	0.12	0	0	3.13	0.22	0.25	0	0	0	0	0
C12:3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C13:1	0	0	0	0	0	0	0	0.44	0.35	0.32	0.33	0
C14:0	0	0	5.84	8.26	0	0	0	0	0	0	0	0.32
C15:0	0	0	0	0	0.15	0	0	0	0.27	0.75	0	0.64
C15:1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.33	0
C16:0	11.28	11.74	0	0.78	6.52	12.38	9.76	10.59	11.65	16.29	9.11	15.82
C16:1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1.59
C17:0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.43	0	0.36
C17:1	0	0	0	0	0	0	0	0.22	0.34	1.35	0.8	1.17
C18:0	2.54	2.2	24.2	0	4.12	15.18	8.39	7.61	0.55	0	0.43	0.51
C18:1	63.13	77.05	11.65	55.32	28.54	48.86	50.87	76.05	80.24	74.56	84.06	75.72
C18:2	17.14	6.05	45.74	25.83	31.71	6.6	19.35	3.34	1.87	0.4	0.61	0
C19:1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.76	0	0
C20:0	0	0	0	0	0.68	0	0	0	0	0	0	0
C20:1	0	0	0	0	0	0	0	0.35	0	0	0	0
C20:2	0	0	7.69	2.14	0	0	0.31	0	0	0	0	0
C21:1	0	0	0	0	0	0	0	0	0.14	0	0.4	0
C22:0	0	0	0	0	0	0	0.4	0	0	0	0	0
C22:1	0	0	0	0	0	0	0	0	0.68	1.55	0.48	1.73
C23:0	0	0	0	0	0	0	0.1	0	0	0	0	0
C23:1	0	0	0	0	0	0	0	0	1.5	0	2.06	0.68
C24:0	0	0	0	0	0	0	0.38	0	0	0	0	0
C24:6	0.19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C29:1	0	0	0	0	0	0	0	1.19	1.12	3.42	0	0
Lain	5.7	2.35	4.9	2.65	12.04	3.42	2.09	0.22	1.26	0.84	1.06	0.78
Total	99.98	99.51	100	94.98	95.49	99.99	99.15	100	99.97	101.1	100	99.99

Tabel 4.6 diatas menunjukkan telah terjadi proses *thermal cracking* pada *SJO*, menghasilkan senyawa hidrokarbon dengan rantai hidrokarbon yang lebih pendek. Analisa GC-MS diatas memberikan beberapa gambaran sebagai berikut:

- Pengaruh *cracking* terhadap densitas

Semakin tinggi suhu dan semakin lama waktu reaksi, densitas akan mengalami penurunan, karena senyawa  $C_{24:6}$  sudah tidak ada lagi dan  $C_{18:2}$  berkurang serta terbentuk berbagai senyawa dengan rantai karbon yang lebih pendek. Hal ini didukung oleh analisa FTIR bahwa gugus ikatan  $(CH_2)_n$  mengalami penurunan. Namun keadaan ini hanya berlaku untuk suhu 325 dan 350 °C. Sedangkan untuk suhu 375°C malah sebaliknya, densitas mengalami kenaikan. Pada suhu tersebut terbentuknya senyawa  $C_{29:1}$ , yang mempunyai rantai hidrokarbon lebih panjang dari pada rantai hidrokarbon *SJO*, sehingga berat molekul hasil reaksi akan mengalami kenaikan, dan hal ini akan berpengaruh terhadap densitas produk biosolar.

- Pengaruh *cracking* terhadap viskositas

Pengaruh suhu dan waktu reaksi *cracking* terhadap viskositas, mempunyai karakter yang sama dengan densitas. Semakin tinggi suhu dan semakin lama waktu reaksi maka viskositas akan mengalami penurunan.

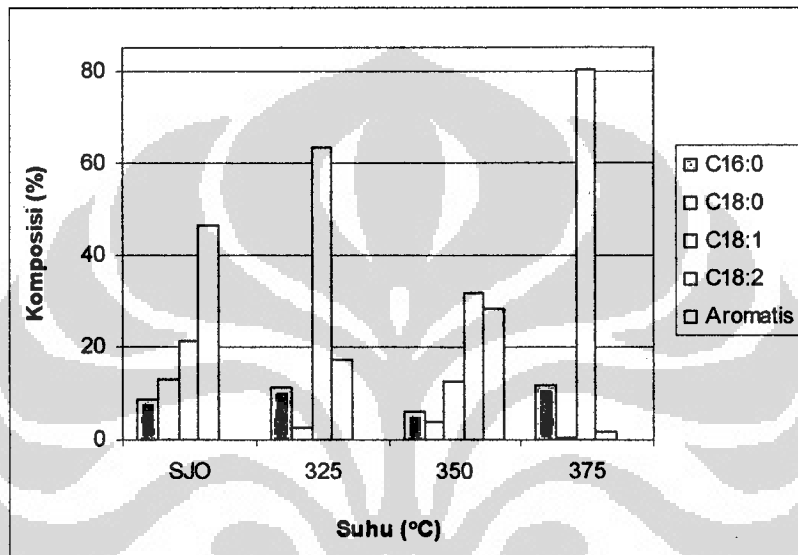
- Pengaruh *cracking* terhadap bilangan iodine

Semakin tinggi suhu dan semakin lama waktu reaksi, bilangan iodine mengalami penurunan (lihat Gambar 4.18 dan 4.19 ). Hal ini akibat hilangnya senyawa  $C_{24:6}$  dan berkurangnya  $C_{18:2}$  .

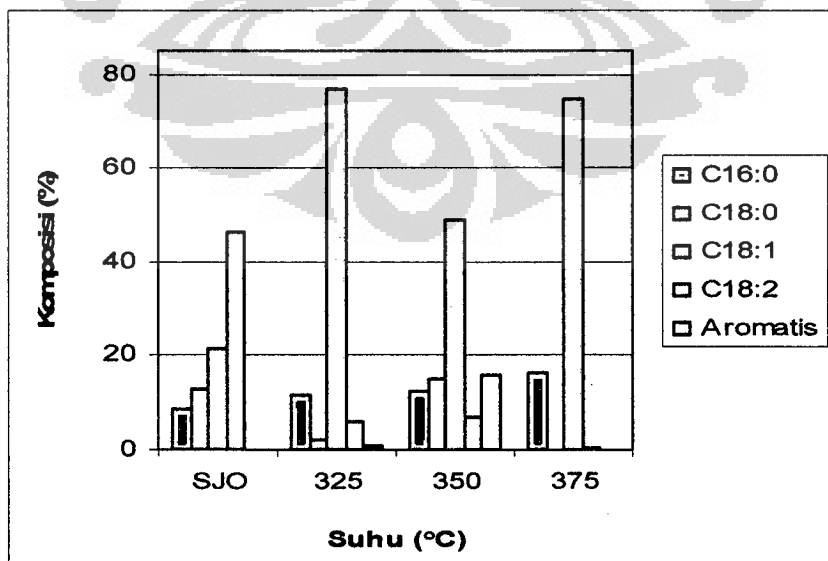
### 4.2.3 Pengaruh Suhu dan Waktu reaksi terhadap komponen penyusun biosolar

Analisa GC-MS dilakukan terhadap produk pada berbagai suhu dan waktu reaksi. Hubungan antara suhu dan waktu reaksi dengan hasil analisa GC-MS terhadap terhadap komponen pennusun dapat dilihat pada Gambar dibawah ini:

- Hubungan antara komposisi vs suhu reaksi

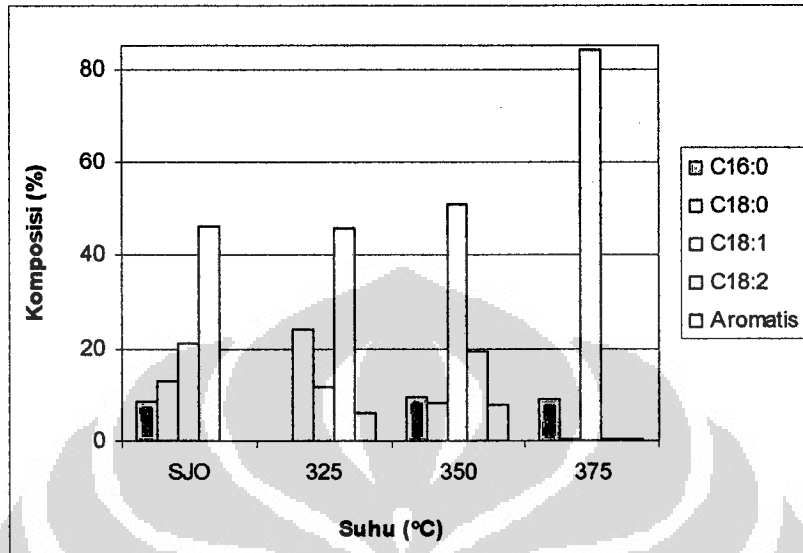


Gambar 4.8. Komposisi produk *thermal cracking* vs suhu untuk t= 5 menit

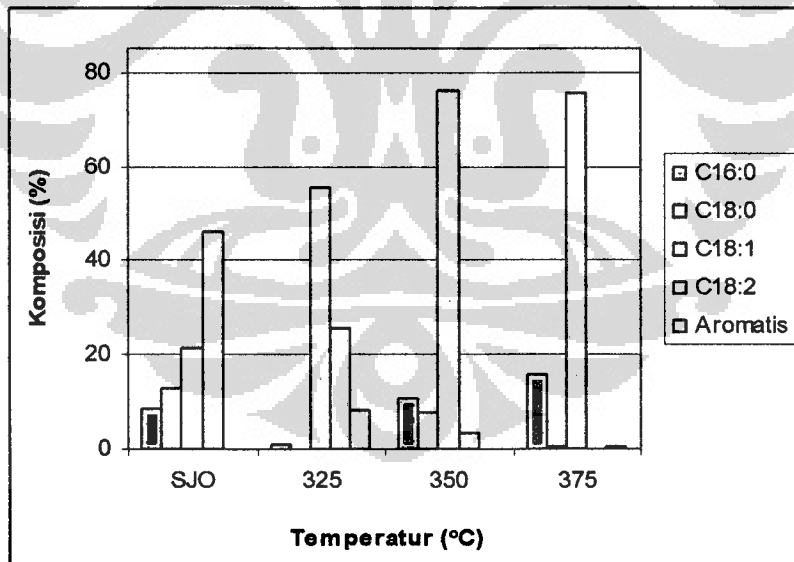


Gambar 4.9. Komposisi produk *thermal cracking* vs suhu untuk t= 10 menit





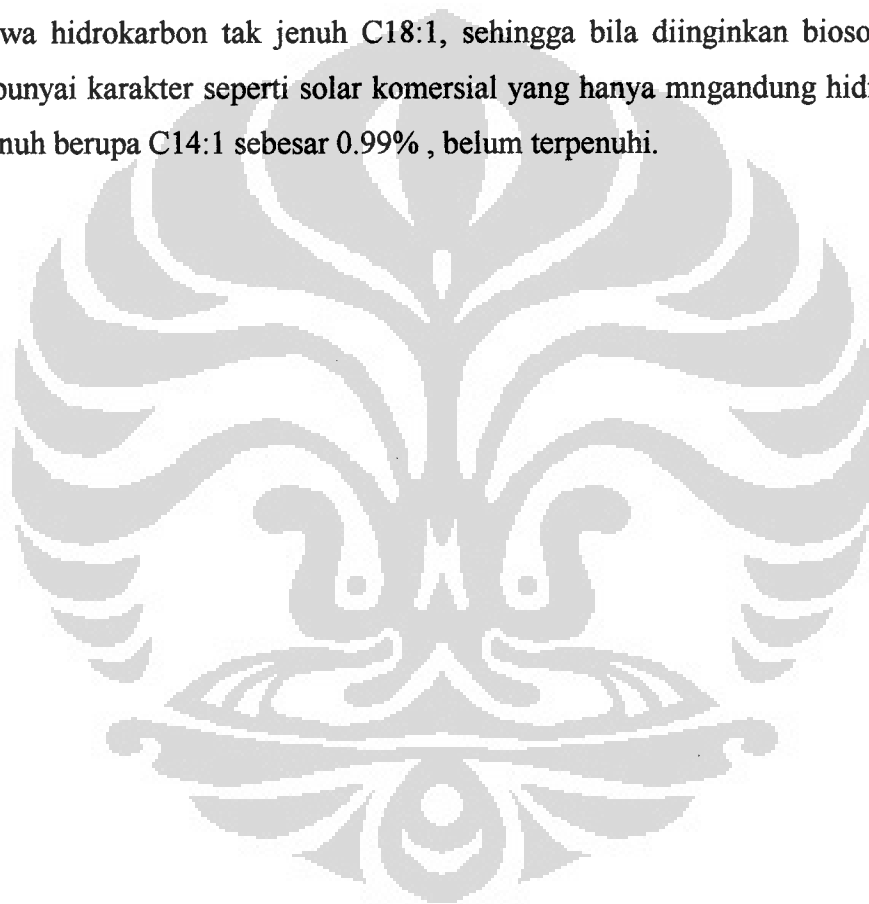
**Gambar 4.10.** Komposisi produk *thermal cracking* vs suhu untuk  $t= 15$  menit



**Gambar 4.11** Komposisi produk *thermal cracking* vs suhu untuk  $t= 30$  menit

Gambar 4.9 s/d 4.11 secara garis besar menunjukkan semakin tinggi suhu reaksi maka komponen C16:0 dan C18:1 cenderung mengalami kenaikan, hal ini menunjukkan terjadinya *cracking* senyawa hidrokarbon rantai panjang menjadi senyawa hidrokarbon rantai pendek.

Bertambahnya senyawa C16:0 dan C18:1 ditunjukkan pula oleh data spektrum FTIR (Gambar 4.4) yang mengindikasikan bahwa semakin tinggi suhu maka ikatan (CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub> mengalami penurunan. Hubungan antara jumlah komponen C16:0,C18:0,C18:1,C18:2 dan senyawa aromatis sebagai komponen penyusun dalam jumlah besar pada biosolar terhadap suhu dan waktu reaksi digambarkan, untuk mengetahui pengaruh reaksi *thermal cracking* terhadap komponen tersebut, yang akan menunjukkan bahwa pada reaksi kali ini masih banyak dihasilkan senyawa hidrokarbon tak jenuh C18:1, sehingga bila diinginkan biosolar yang mempunyai karakter seperti solar komersial yang hanya mengandung hidrokarbon tak jenuh berupa C14:1 sebesar 0.99% , belum terpenuhi.



### 4.3. Karakterisasi Produk *Thermal Cracking*

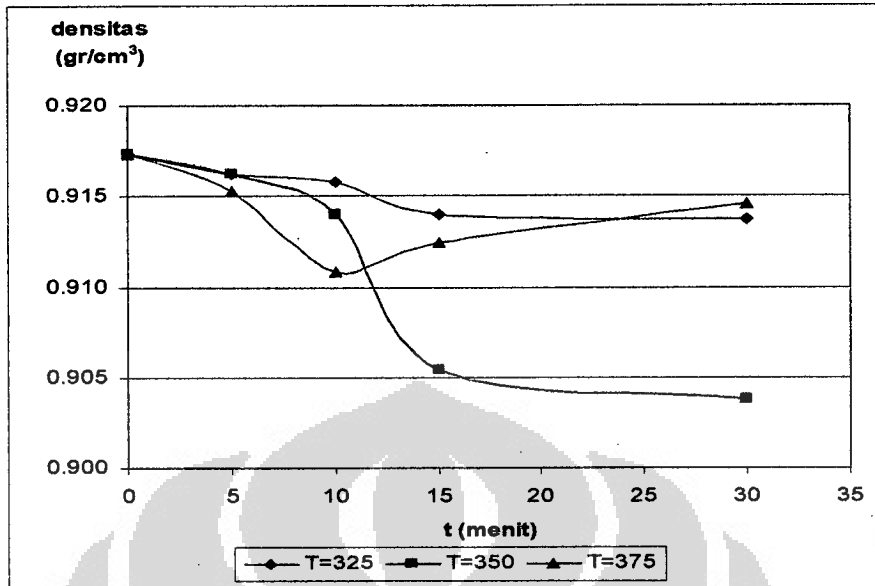
Hasil uji karakterisasi produk *thermal cracking* dari *SJO* dapat dilihat pada tabel dibawah ini:

Tabel 4.7 Karakterisasi Produk *Thermal Cracking*

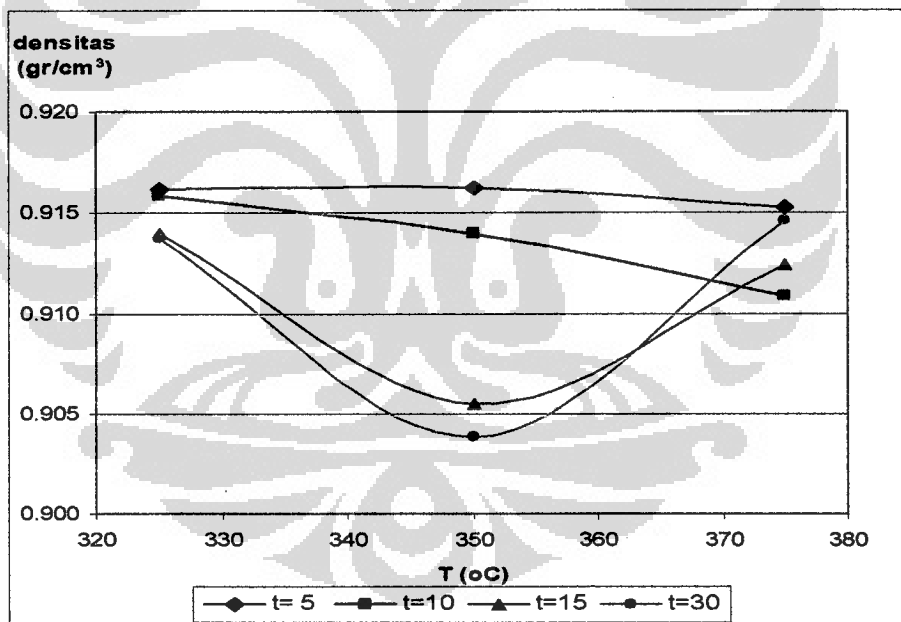
T(°C)	t(menit)	Karakteristik			
		Densitas,24°C (gr/cm <sup>3</sup> )	Viskositas,24°C(cSt)	Bil.Iodine	CN
24	0	0.9173	73.3253	44.960	38.4626
325	5	0.9162	59.8499	42.040	27.5808
	10	0.9158	59.7709	41.250	27.0948
	15	0.9140	59.3756	39.510	26.4945
	30	0.9137	64.1983	44.660	26.4704
350	5	0.9162	56.8456	40.700	39.3899
	10	0.9140	50.9441	36.700	40.0082
	15	0.9054	54.4763	38.670	26.7126
	30	0.9038	54.5211	32.730	26.5820
375	5	0.9153	111.1485	33.820	31.0681
	10	0.9108	109.3863	38.480	30.2650
	15	0.9124	127.1053	29.950	29.9540
	30	0.9146	132.2252	17.150	30.7943

#### 4.3.1. Densitas

Dari Tabel 4.7 menunjukkan semakin tinggi suhu dan waktu reaksi, densitas mengalami penurunan, namun penurunan tersebut belum memberikan pengaruh yang signifikan pada karakter densitas, bila dibandingkan dengan densitas solar komersial yaitu 0.815 s/d 0.87 (gr/cm<sup>3</sup>,15°C). Pengaruh suhu dan waktu reaksi terhadap densitas produk *thermal cracking* dapat dilihat pada grafik dibawah ini:



Gambar 4.15. Grafik hubungan densitas vs suhu operasi

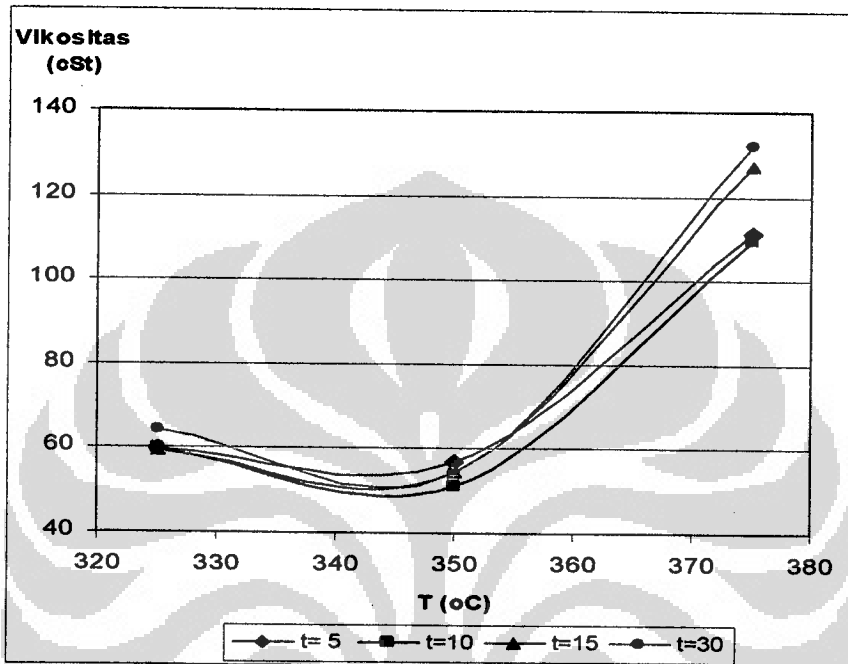


Gambar 4.16. Grafik hubungan densitas vs waktu operasi

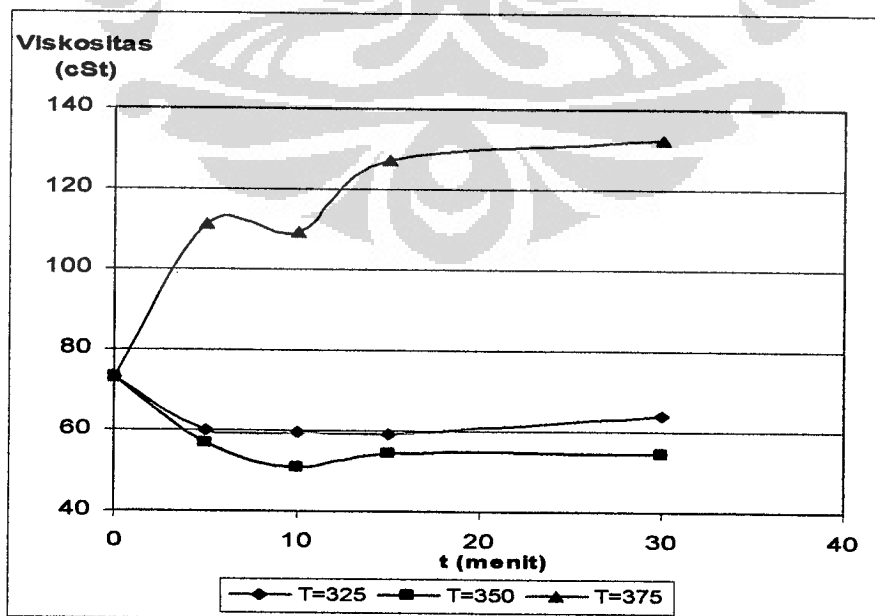
Dari gambar 4.15 dan 4.16 menunjukkan suhu 350°C mempunyai pengaruh lebih signifikan dibandingkan suhu reaksi 325°C dalam rentang waktu reaksi 10 menit terhadap penurunan harga densitas. Hal ini disebabkan pada suhu 350°C terbentuk senyawa aromatis, C5 dan C6.

### 4.3.2. Viskositas

Hubungan antara suhu dan waktu operasi dapat dilihat pada Gambar 4.17 dan 4.18 dibawah ini:



Gambar 4.17. Grafik hubungan Viskositas vs suhu operasi

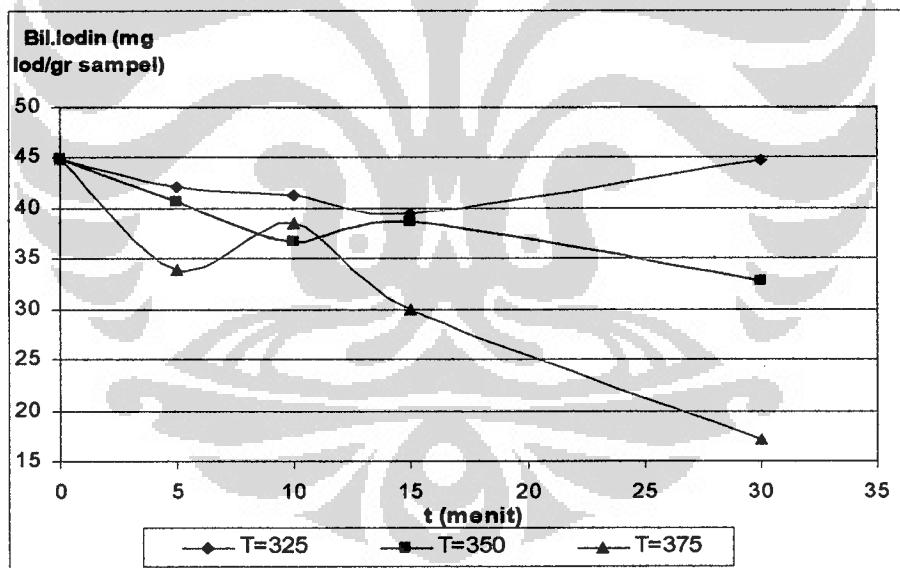


Gambar 4.18. Grafik hubungan Viskositas vs waktu operasi

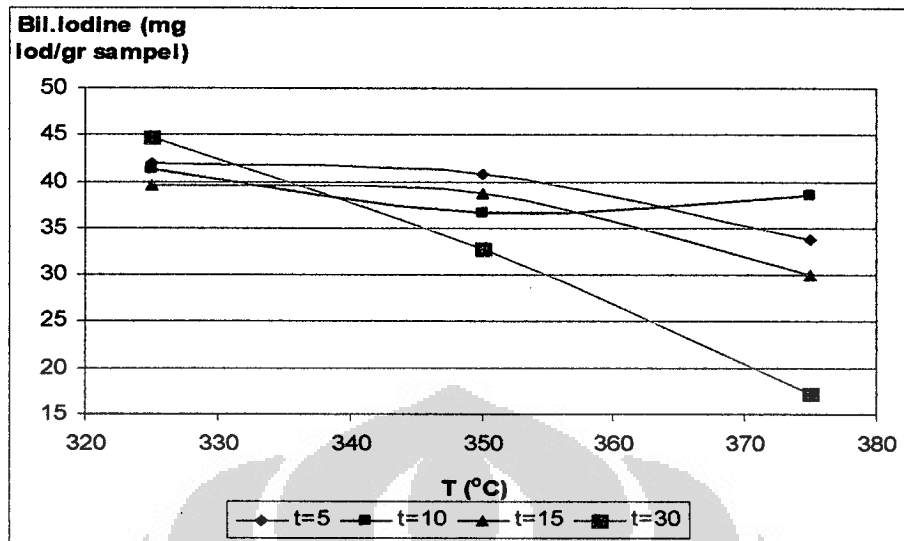
Gambar 4.17 dan 4.18 menunjukkan pada penelitian ini didapatkan data semakin tinggi suhu dan semakin lama waktu reaksi, viskositas akan berkurang. Suhu 350°C mempunyai pengaruh lebih signifikan dibandingkan suhu reaksi 325°C dalam rentang waktu reaksi 10 menit terhadap penurunan harga viskositas. Sedangkan suhu operasi 375°C sudah tidak memenuhi lagi, karena densitas dari produk thermal cracking justru mengalami kenaikan, berarti tidak sesuai dengan tujuan penelitian merengkah *SJO* agar komponen penyusunnya menjadi senyawa hidrokarbon lebih pendek sehingga viskositasnya turun.

#### 4.3.3. Bilangan Iodine

Hubungan antara bilangan iodin dan temperatur reaksi dapat dilihat pada gambar 4.19 dan 4.20 dibawah ini:



**Gambar 4.19.** Grafik Bil. Iodin vs Waktu reaksi



**Gambar 4.20.** Grafik Bil. Iodin vs suhu reaksi

Dari penelitian didapatkan data bahwa semakin tinggi suhu dan waktu reaksi makin lama, bilangan iodine mengalami penurunan. Keadaan ini menunjukkan senyawa hidrokarbon tak jenuh dalam biosolar lebih sedikit dibandingkan dalam *SJO*. Kondisi ini ditunjang data spektrum FTIR bahwa terjadi penurunan ikatan C=C (Gambar 4.5).

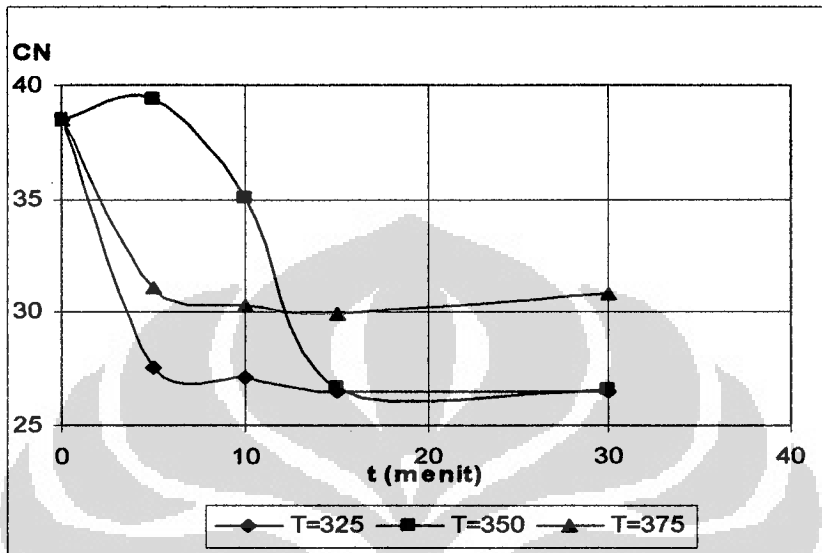
Hal ini semakin dipertegas dengan data GC-MS dengan sudah tidak ada lagi C24:6 dan berkurangnya C18:2.

#### 4.3.4. Angka Setana

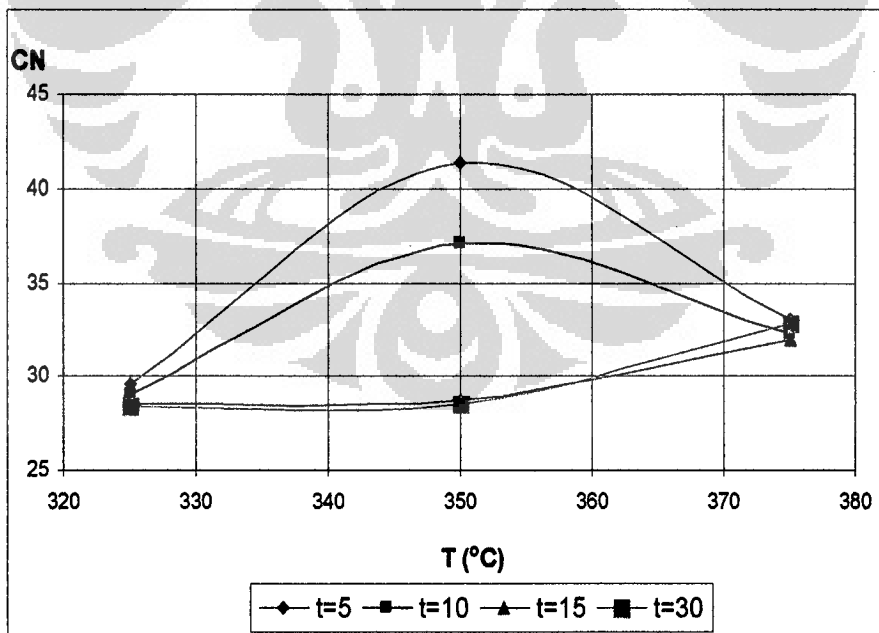
Dalam penelitian ini dengan suhu *thermal cracking* 325 dan 375 °C angka setana mengalami penurunan bila dibandingkan dengan *SJO*. Pada suhu 350°C mengalami angka setana mengalami kenaikan dari 38.4626 menjadi 39.3899-40.008 untuk waktu reaksi 5-10 menit. Hal ini akibat terbentuk senyawa hidrokarbon tak jenuh dengan rantai pendek yaitu C5, C6 dan C12.

Diketahui berdasarkan teori bahwa angka setana akan turun apabila didalam bahan bakar diesel terdapat senyawa dengan rantai hidrokarbon tak jenuh<sup>[26]</sup>.

Sedangkan pengaruh waktu reaksi *thermal cracking* terhadap angka setana, secara keseluruhan mengalami penurunan, kecuali untuk suhu 350°C. Hal ini dapat dilihat pada gambar 4.21 dan 4.22 dibawah ini:



Gambar 4.21. Grafik CN vs Temperatur



Gambar 4.22. Grafik CN vs waktu operasi



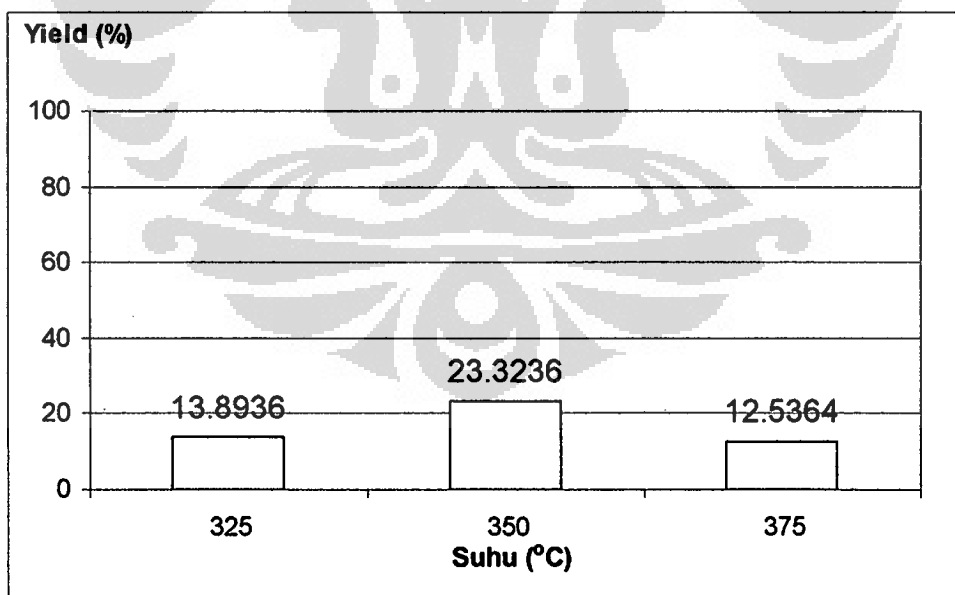
#### 4.3.5. Yield

Pada penelitian ini yield identik dengan konversi menyatakan perbandingan massa senyawa hidrokarbon jenuh dengan rentang C<sub>5</sub>-C<sub>29</sub> dan senyawa aromatis yang terbentuk terhadap massa reaktan (SJO). Dari penelitian didapatkan data sebagai berikut:

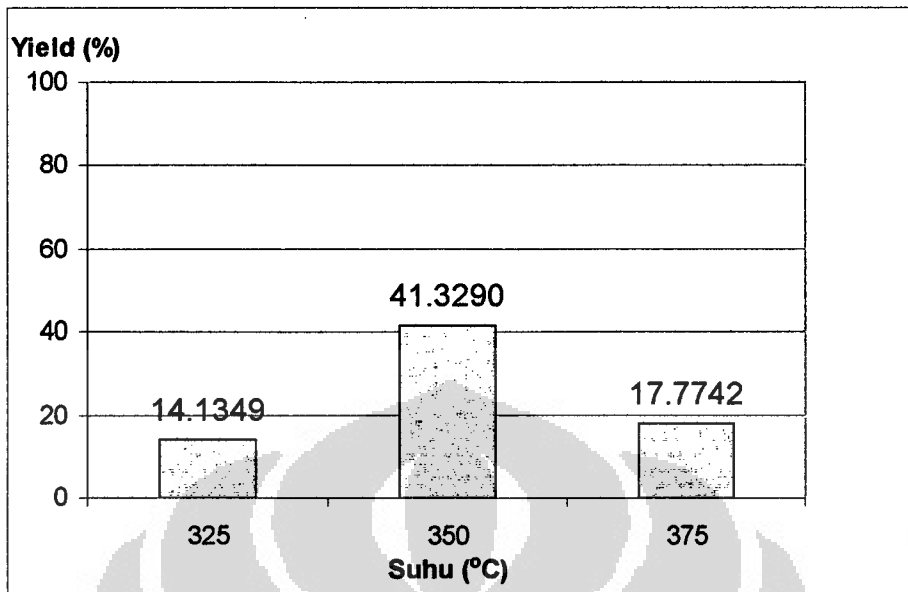
**Tabel 4.8.** Yield Reaksi Thermal Cracking SJO

t (menit)	Yield (%)		
	Suhu Operasi (°C)		
	325	350	375
5	13.8936	23.3236	12.5364
10	14.1349	41.3290	17.7742
15	30.2001	26.5708	9.9226
30	9.0882	18.7393	18.2266

Tabel 4.8. diatas menunjukkan bahwa yield terbesar diperoleh ketika kondisi operasi 350°C dengan waktu reaksi 10 menit. Sedangkan grafik hubungan antara yield dengan suhu dan waktu reaksi dapat dilihat pada gambar dibawah ini:

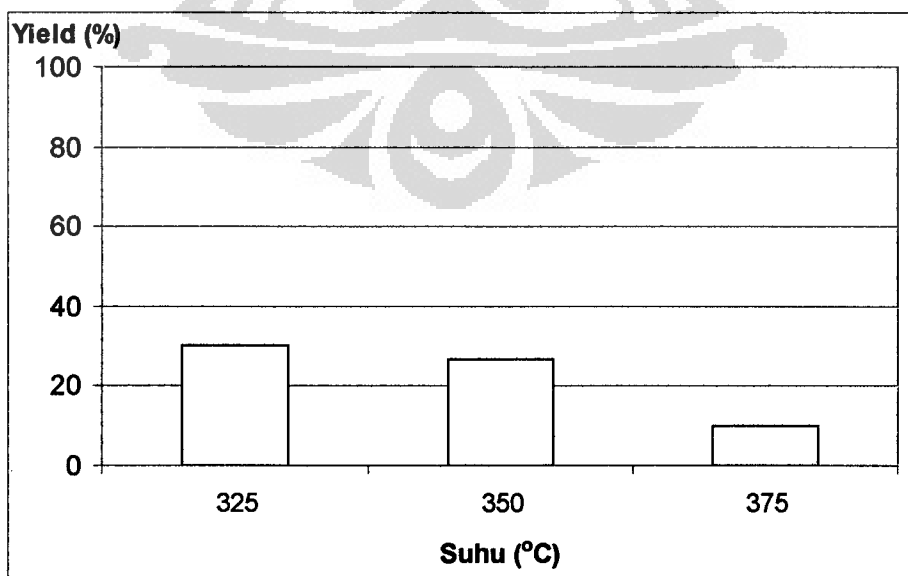


**Gambar 4.23.** Gambar Yield vs temperature pada t= 5 menit



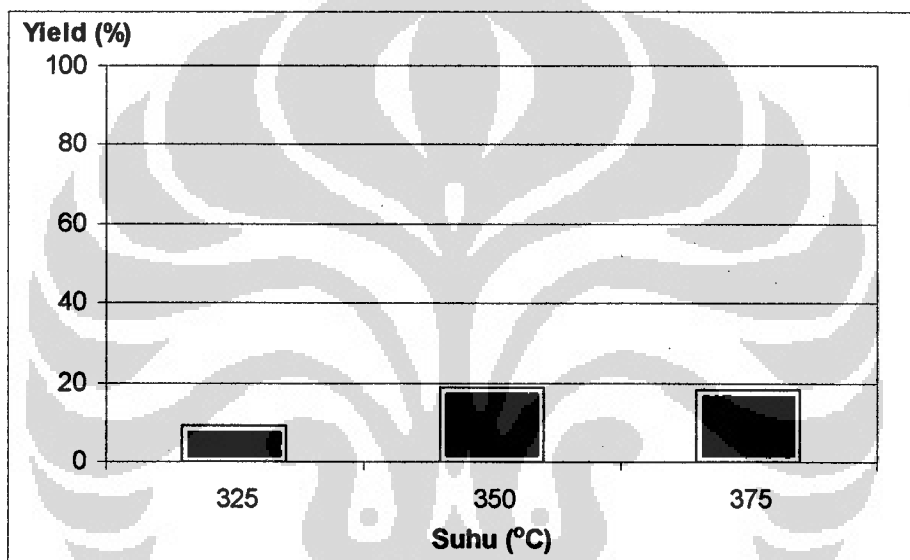
**Gambar 4.24.** Gambar Yield vs suhu pada  $t=10$  menit

Gambar 4.23 dan 4.24 menunjukkan bahwa yield terbesar didapatkan pada suhu 350 °C. Pada waktu reaksi 5 dan 10 menit faktor suhu tidak memperlihatkan trend kenaikan ataupun penurunan yield, hal ini menunjukkan pada waktu 5 dan 10 menit pada tiap-tiap variable suhu reaksi mempunyai karakter tersendiri, tergantung pada senyawa penyusun yang dihasilkan dari *reaksi thermal cracking*.



**Gambar 4.25.** Grafik yield vs suhu pada  $t=15$  menit

Gambar 4.25 menunjukkan dengan semakin tinggi suhu reaksi yield yang dihasilkan akan semakin kecil. Hal ini karena pada waktu 15 menit reaksi berjalan lebih kompleks, terbentuk senyawa hidrokarbon tak jenuh dari C11:1 hingga C29:1. Hal ini didukung oleh data GC-MS pada Tabel 4.6 menunjukkan bahwa waktu 15 menit, semakin tinggi suhu akan menghasilkan berbagai macam senyawa olefinik.



Gambar 4.26. Grafik yield vs suhu pada  $t=30$  menit

Gambar 4.26 menunjukkan semakin tinggi suhu reaksi yield bertambah besar, hal ini menunjukkan senyawa olefin yang terbentuk pada waktu 15 menit akan terengkah kembali dan terjadi pemutusan C18:2 dalam jumlah yang lebih besar. Jadi meskipun terjadi reaksi pembentukan olefin, namun dibarengi dengan pembentukan senyawa parafin dengan rantai hidrokarbon yang lebih pendek, maka kondisi ini akan menaikkan yield. Hal ini dapat dilihat pada data GC-MS pada suhu 375 °C dihasilkan C14:0 dan C15:0.

Karakter tiap suhu dapat diidentifikasi oleh data GC-MS, pada suhu 325 °C proses *cracking* terjadi dengan pemutusan sebagian rantai C24:6, C18:2 dan C18:0 membentuk C16:0 dan C18:1. Pada suhu 350°C terjadi pemutusan rantai

C24:6, C18:2 dan C18:0 membentuk C12:0, C16:0 dan C18:1. Sedangkan pada suhu 375 °C proses thermal cracking terjadi dengan pemutusan rantai C24:6, C18:2 dan C18:0 membentuk C13:1, C16:0, C17:1, C18:1, C21:1, C22:1, C23:1, dan C26:1. Dari data diatas dapat dibuat kesimpulan:

- Dengan T=325 °C, belum terjadi perengkahan rantai panjang tak jenuh C24:6 keseluruhan, hal ini menunjukkan dengan suhu 325 energi yang dibutuhkan belum mencukupi kebutuhan dari energi disosiasi.
- Dengan T=350 °C, *SJO* dapat terengkah hingga menghasilkan senyawa paraffinik dengan rantai lebih pendek C12:0, sehingga yield menjadi lebih besar.
- Dengan T=375 °C, *SJO* dapat terengkah dan terjadi reaksi pembentukan senyawa olefin. Hal ini ditunjukkan dengan terbentuknya senyawa olefinik dari C11:1 s/d C29:1.

#### 4.4.Kinetika reaksi

Kinetika reaksi menunjukkan laju pembentukan dari biosolar. Dari pengolahan data dengan persamaan:

$$-\frac{dC_A}{dt} = kC_A^n$$

Misalkan  $-\frac{dC_A}{dt} = Y$ , nilai kita lnkan kedua sisi persamaan diatas akan menjadi:

$$\ln Y = \ln k + n \ln C_A$$

Dengan

$C_A$  = jumlah komponen hidrokarbon jenuh  $C_5$ - $C_{29}$  dan senyawa aromatis dalam biosolar (%massa)

$n$  = orde reaksi

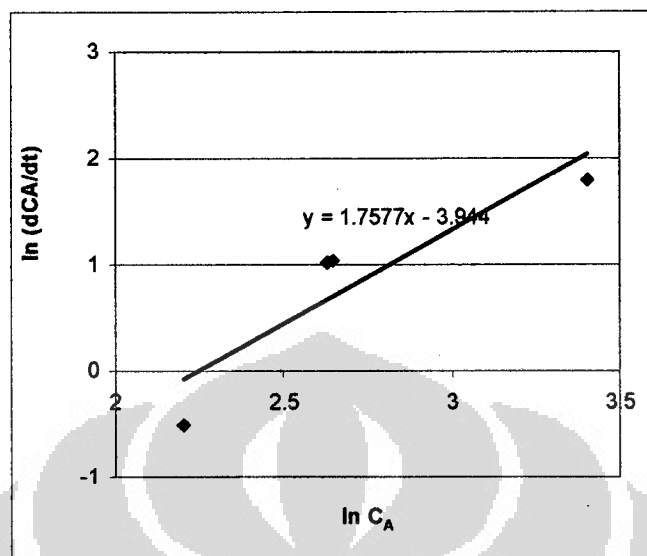
$k$  = konstanta kecepatan reaksi ( $\text{min}^{-1}$ )

Dari GC-MS didapatkan data sebagai berikut:

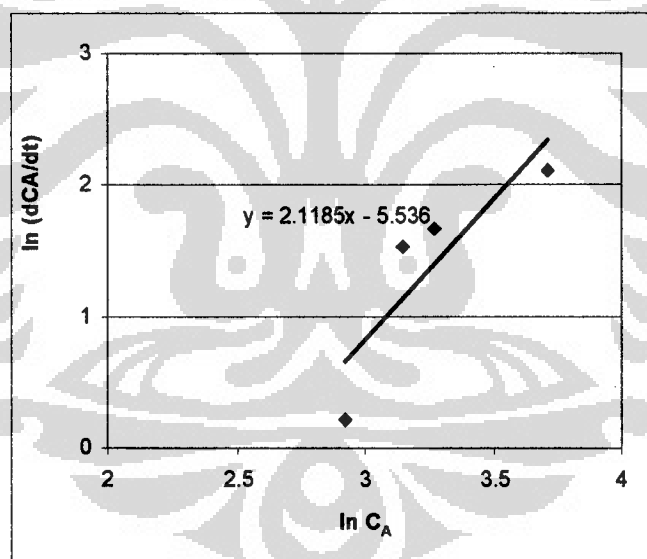
Tabel 4.9 Tabel  $C_B$

t (menit)	Suhu operasi ( $^{\circ}\text{C}$ )		
	325	350	375
5	13.82	23.2	12.47
10	14.06	41.11	17.68
15	30.04	26.43	9.87
30	9.04	18.64	18.13

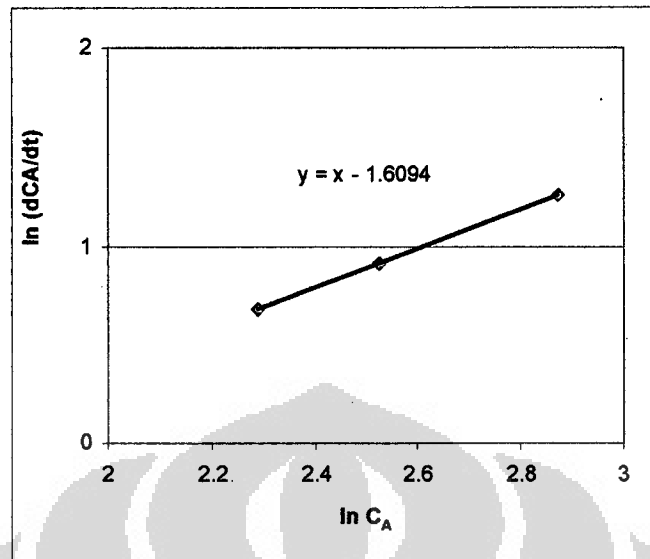
Dengan data yang ada dapat dibuat grafik hubungan antara  $\ln Y$  dengan  $\ln C_A$ . Grafik tersebut akan menghasilkan sebuah garis linier yang menunjukkan harga  $\ln k$  = intersep dan  $n$  adalah orde reaksi = slope



(a)



(b)



( c )

Gambar 4.27 Grafik hubungan antara ln Y vs ln C<sub>A</sub>

(a) Pada T 325 °C

(b) Pada T 350 °C

(c) Pada T 375 °C

Dari Gambar 4.27 diatas menunjukkan konstanta laju reaksi dan orde reaksi dapat dihitung. Dari perhitungan dan pengolahan data didapatkan harga k dan orde reaksi sebagai berikut:

Tabel 4.10. Harga k dan orde reaksi

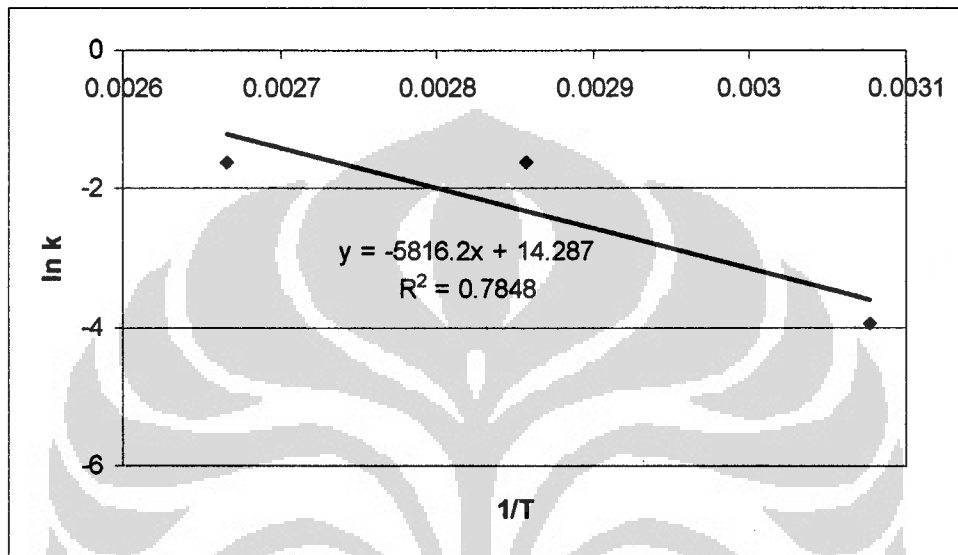
T (°C)	ln k	k(min <sup>-1</sup> )	orde reaksi
325	-3.944	1.9x10 <sup>-02</sup>	1.7577
350	-1.6094	2.0x10 <sup>-01</sup>	1
375	-1.6094	2.0x10 <sup>-01</sup>	1

Tabel 4.10 menunjukkan reaksi *thermal cracking* pada *SJO* kali ini merupakan reaksi dengan orde reaksi antara 1 s/d 2.1, konstanta laju reaksinya antara 3.9x10<sup>-03</sup> s/d 2.0x10<sup>-01</sup> min<sup>-1</sup>.

Tahap selanjutnya adalah perhitungan untuk mencari harga E<sub>a</sub> (Energi aktivasi ) dan A (faktor frekwensi). Dengan persamaan arhenius sebagai berikut

$$\ln k = \ln A - \frac{E_A}{RT}$$

Dengan data k dan T dapat dibuat grafik hubungan antara  $\ln k$  dengan  $T^{-1}$ . Grafik tersebut akan menghasilkan sebuah garis linier yang menunjukkan harga  $\ln A =$  intersep dan  $-\frac{E_A}{R} = \text{slope}$



**Gambar 4.28** Grafik hubungan antara  $\ln k$  dengan  $T^{-1}$

Dari gambar 4.28 dapat diketahui:

- Slope =  $-\frac{E_A}{R} = -5816.2$
- Intersep =  $\ln A = 14.287$

Bila harga  $R = 8.314 \text{ J/grmol K}$ , maka harga  $E_a$  dan  $A$  adalah sebagai berikut:

**Tabel 4.11** Tabel A dan  $E_a$

A	$E_A(\text{J/grmol})$
$1.6024 \times 10^6$	$4.8355 \times 10^4$

Dari Tabel 4.11 diatas menunjukkan energi minimum yang diperlukan untuk berlangsung sebuah reaksi. Apabila diketahui reaksi adalah SJO menjadi biosolar, maka pada suhu reaksi 325 s/d 375°C (598 s/d 648 K) energi yang diperlukan untuk mengkonversi SJO menjadi biosolar sebesar  $4.8355 \times 10^4 \text{ J/grmol}$ .



#### 4.5. Perbandingan antara SJO, Biosolar dan Solar Komersial.

Dari penelitian kali ini didapatkan data antara SJO, Biosolar dan solar komersial sebagai berikut:

**Tabel 4.12.** Karakteristik SJO, Biosolar dan Solar Komersial

Parameter	SJO	Biosolar <sub>(350 °C)</sub>	Solar
Densitas (gr/cm <sup>3</sup> ,24°C)	0.917	0.9038 - 0.9162	0.815-0.87(15°C)
Viskositas (cSt,24°C)	73.3253	50.944 - 56.846	2-5(40°C)
Bil. Iodin (grIod/100grsampel)Wijs	44.96	32.73 - 40.70	
Angka Setana	38.4626	26.58 - 40.00	48
Senyawa Penyusun	C <sub>12:0</sub> - C <sub>24:6</sub>	C <sub>5:0</sub> - C <sub>24:0</sub>	C <sub>8</sub> - C <sub>23</sub>
Komposisi Senyawa			
C8:0	0	0	0.38
C9:0	0	0-0.3	0.72
C10:0	0	0-0.24	1.73
C11:0	0	0	3.06
C12:0	4.99	0-3.13	7.06
C13:0	0	0	4.34
C14:0	0	0	4.5
C15:0	0	0	8.09
C16:0	8.66	4.12-15.18	11.41
C18:0	21.3	28.54-76.05	4.41
C18:1	46.26	3.34-31.71	0
C18:2	0.65	0	0
C19:0	0	0	3.99
C20:0	0	0-0.68	4.21
C21:0	0	0	4.61
C22:0	0	0	3.13
C23:0	0	0	3.8
C24:0	0	0-0.28	5.07
C24:6	0.65	0	0

C25:0	0	0	0.29
C26:0	0	0-0.18	0.93
C27:0	0	0	0.61
C28:0	0	0	0.42
C29:0	0	0	0.26

Tabel 4.12 menunjukkan beberapa perubahan baik densitas, viskositas, bilangan iodin, angka setana dan komposisi senyawa penyusunnya dari SJO, biosolar pada suhu operasi 350°C dan solar komersial. Dari Tabel 4.12 dapat diambil kesimpulan sebagai berikut:

- Densitas dan viskositas SJO setelah reaksi *thermal cracking* yang menghasilkan biosolar telah mengalami penurunan, namun penurunannya masih belum standar dengan densitas dan viskositas solar, hal ini dikarenakan hasil *thermal cracking* masih banyak yang berupa hidrokarbon tak jenuh, sedangkan bila dibandingkan dengan solar komersial, senyawa penyusunnya banyak lebih berupa parafin (hidrokarbon jenuh).
- Angka setana mengalami kenaikan dari 38.4626 menjadi 40.00 pada suhu operasi 350°C dengan waktu reaksi 10 menit.
- Bilangan iodine mengalami penurunan, hal ini dikarenakan berkurangnya senyawa hidrokarbon tak jenuh, karena dari pembentukan senyawa aromatis dan siklik yang melepaskan -H, sehingga terjadi reaksi adisi oleh senyawa tak jenuh tersebut.

#### 4.6. Pemanfaatan Biosolar dalam mesin diesel (ADO)

Pada penelitian ini karakteristik biosolar diukur pula pada suhu 15°C untuk densitas dan pada suhu 40°C untuk viskositas. Pengukuran dilakukan untuk mengetahui seberapa besar perbedaan karakteristik densitas dan viskositas antara biosolar dengan solar komersial. Dari penelitian didapatkan hasil sebagai berikut: (Perhitungan lihat lampiran 5)

**Tabel 4.13.** Densitas Solar, SJO dan Biosolar pada suhu 15°C

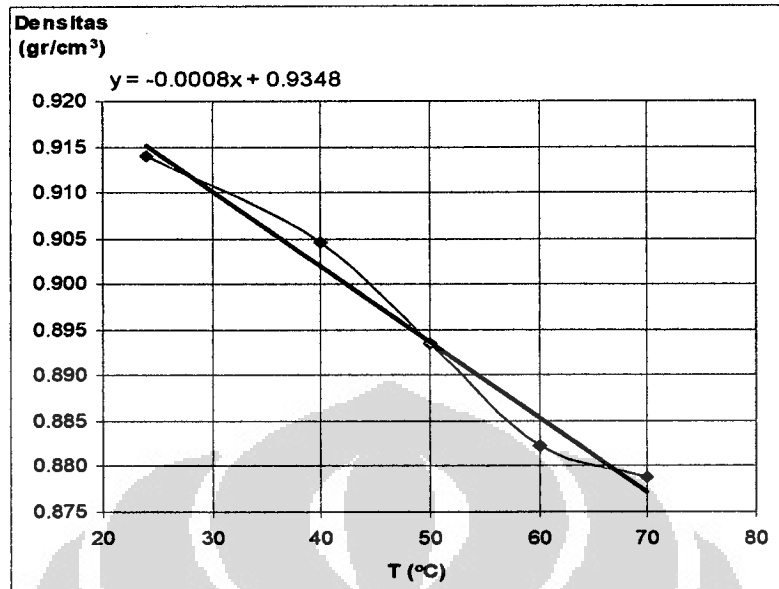
t (menit)	Densitas (gr/cm <sup>3</sup> )		
	Temperature Operasi (°C)		
	325	350	375
Solar	0.815-0.87		
SJO	0.9257		
5	0.9253	0.9254	0.9250
10	0.9252	0.9246	0.9235
15	0.9246	0.9217	0.9241
30	0.9245	0.9212	0.9248

**Tabel 4.14.** Viskositas Solar, SJO dan Biosolar pada suhu 40°C

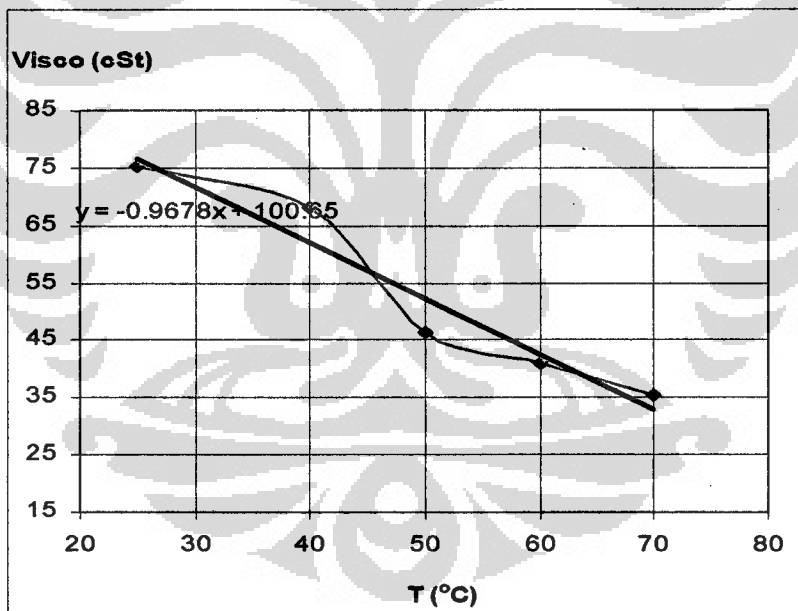
t (menit)	Temperature Operasi (°C)		
	Viscositas kinematik (cSt)		
	325	350	375
Solar	2-5		
SJO	66.0270		
5	53.8978	51.1936	100.0717
10	53.8267	45.8817	98.4855
15	53.4709	49.0610	114.4344
30	57.8118	49.1013	119.0428

Dari tabel 4.13 dan 4.14 menunjukkan biosolar yang didapatkan dari rekayasa SJO melalui reaksi thermal cracking masih belum standart dengan solar komersial.

Namun perlu diketahui apabila suatu bahan bakar dimasukkan kedalam mesin diesel (ADO), akan mengalami penurunan densitas dan viskositas. Mesin apabila dijalankan akan mengalami kenaikan suhu hingga diatas 100°C, maka dalam penelitian ini dibuat grafik hubungan antara viskositas vs suhu operasi.



Gambar 4.29. Densitas biosolar vs suhu



Gambar 2.30. Viskositas biosolar vs suhu

Gambar 4.29 dan 4.30 menunjukkan apabila biosolar keluar dari mesin, misalkan suhu didalam mesin adalah 100°C, maka akan mempunyai karakteristik densitas sebesar 0.8548 gr/cm<sup>3</sup> dan viskositas sebesar 3.77 cSt. Hal ini menunjukkan biosolar yang dihasilkan apabila diplikasikan pada mesin *automotive diesel* sudah menyetarai solar komersial.

## BAB.V

### KESIMPULAN

1. *Straight jatropha oil (SJO)* dapat di rekayasa dengan reaksi *thermal cracking*, pada fasa cair, untuk menghasilkan senyawa dengan rantai hidrokarbon yang lebih pendek.
2. *Thermal Cracking* pada *SJO* menyebabkan terjadinya perubahan menjadi biosolar, dengan spesifikasi:
  - Densitas mengalami penurunan dari 0.971 (gr/cm<sup>3</sup>,24°C) menjadi 0.9038 s/d 0.9162 (gr/cm<sup>3</sup>,24°C)
  - Viskositas mengalami penurunan dari 73.3253(cSt,24°C) menjadi 50.944 s/d 64.198 untuk suhu 325 dan 350°C, dan mengalami kenaikan menjadi 109.58 s/d 132.22 (cSt,24°C) pada suhu 375 °C.
  - Bilangan iodine mengalami penurunan dari 44.96 (mgIod/gr)Wijs menjadi 17.15 s/d 44.66 (mgIod/gr)Wijs.
  - Angka setana mengalami penurunan dari 38.4626 menjadi 26.47 s/d 38.48, kecuali pada suhu operasi 350° C dengan waktu reaksi 5 dan 10 menit, angka setana mngalami kenaikan menjadi 39.3899 dan 40.0082.
3. Kondisi operasi optimum untuk mendapatkan biosolar dengan karakteristik densitas dan viskositas mengalami penurunan serta angka setana mengalami kenaikan didapatkan dari reaksi *thermal cracking* dengan kondisi operasi pada suhu 350°C dan waktu reaksi 10 menit.
4. Reaksi *thermal cracking* *SJO* menjadi biosolar merupakan reaksi dengan orde reaksi 1 s/d 2.1, besarnya konstanta laju reaksi antara 3.9x10<sup>-03</sup> s/d 2.0x10<sup>-01</sup> min<sup>-1</sup>.
5. Energi minimum yang diperlukan untuk reaksi *thermal cracking* *SJO* menjadi biosolar, pada suhu reaksi 325 s/d 375°C sebesar 4.8355x10<sup>4</sup> J/grmol
6. Karakteristik biosolar menunjukkan terjadinya reaksi *Thermal Cracking* pada *SJO*, apabila biosolar diplikasikan pada mesin *automotive diesel* sudah dapat digunakan dan karakteristiknya identik atau setara dengan solar komersial

## Daftar Pustaka

1. Tomy, H., 2006, "Pemanfaatan Minyak Dari Tumbuhan Untuk Pembuatan Biodiesel", Laporan penelitian, UGM, Yogyakarta
2. Martini, R., 2006, "Teknologi Proses Produksi Biodiesel", BPPT, Jakarta
3. Tatang, S., 18 September 2005, "Biodiesel dari tanaman jarak", Republika, Jakarta.
4. "KCM", 19 Februari 2005, "ITB Buat bahan bakar dari Minyak jarak", Kompas, Jakarta.
5. Lambok., H, 2006, "Membahas Kendala Pada Konverter", National Geographic Indonesia.
6. Didin, W., 2005, "Kelayakan Usaha dan Pola Kemitraan Kebun Industri Jarak Pagar", PT.Permodalan Nasional Madani (BUMN Keuangan, Modal Ventura dan Syari'ah), Jakarta
7. Adebowel, KO., Andedire, C.O., 2006, "Chemical composition and insecticidal properties of the underutilized jaropha curcas seed oil", AJOB vol 5, hsl.901-906.
8. <http://www.panther-mania.com>, 2005, "Tanya lagi tentang buah jarak"
9. <http://www.jarakpagar.com>
10. Billaut, F., Dominguez, V., Broutin, P., Busson, C., 1995, "Production of Hydrocarbons by pyrolysis metal ester from rapeseed oil", JAOCS 72, 1149-1154.
11. Fangrui Ma et al, 1999, "Biodiesel Production: a review 1", Bioresource Technology vol 70, Lincoln, USA.
12. <http://yahoo.com/wikipedia/Trigliserida.html>
13. Cut., F., Z., 2005, "Penyulingan, Pemrosesan dan Pemanfaatan Minyak Bumi", Fakultas MIPA, Universitas Sumatra Utara
14. Elizabeth, T., 2006, "Laporan Kerja Praktek di PT. Chandra Asri Petrochemical", Untirta, Cilegon
15. Tatang A., S., 2005, "Energi Alternatif-Biodiesel (Bagian I)", Subbid. Promosi Karya Ilmiah LIPI, Jakarta

16. "Resume Presentasi dan Makalah pembicara dalam diskusi kebutuhan Energi, Pengembangan Energi Alternatif dan Potensi Energi dari Minyak Jarak", IKA ITS, Surabaya.
17. <http://yahoo.com/wikipedia/cracking.html>
18. <http://yahoo.com/wikipedia/Pyrolysis.html>
19. <http://www.Chemguide.co.uk/organicprops/alkenes/cracking.html>
20. Permadi., Bambang, 2001, " Minyak kelapa sawit sebagai pengganti solar yang dapat diperbaharui (Renewable) dan ramah lingkungan", Skripsi Universitas Indonesia.
21. <http://yahoo.com/wikipedia/density.html>
22. <http://yahoo.com/wikipedia/viscosity.html>
23. Knothe, G., et al., 2002, "Cetane Number of Branched and Straight Chain Fatty Ester Determine in An Ignition Quality Tester"
24. Knothe, G., et al., 2003, "Bioiesel: The Use of Vegetable Oils and Their Derivative as Alternative Fiesel Fuels", Am.Che.Soc.Symp.Series 666:172-208
25. Fessenden, F., 1999, "Kimia Organik jilid 2", Erlangga, Jakarta
26. <http://tasikmalaya.go.id>
27. <http://www.pertamina.go.id>
28. George.,W.,O and Mc.Intire.,P., 1986, "Infrared Spectroscopy", New York, Wiley
29. <http://www.epichem.com/Gas> Chromatrography Mass Spectroscopy in CVD Pprecursor Analysis.
30. Scott Fogler.,H, 1992, "Elementary of Chemical Reaction Engineering", 2ed, Prentice Hall.,Inc.,New Jersey.



**LAMPIRAN I**  
**FORM PERSYARATAN TESIS**



**JURNAL KONSULTASI SKRIPSI/TESIS**

Nama : Elfi Nur R.

Nomor Pokok Mhs : 060604092

Judul dalam Bhs. Indonesia : Rekayasa Minyak Jarak (Jathropa Oil) menjadi bahan bakar setara solar melalui proses Thermal Cracking.

Judul dalam Bhs. Inggris : .....

Pembimbing I : Prof. Dr. Ir. M. Nasikin, M.Eng.

Pembimbing II : .....

No.	Tangga:	Pokok Bahasan Materi	Paraf/Tanda Tangan Pembimbing
01.	20/2	Permasalahan Reaktor, design, kendala	<i>[Signature]</i>
02.	5/3	Hasil/produk thermal cracking, awal, awal	<i>[Signature]</i>
03.	16/3	Pembahasan tekanan awal Rx	<i>[Signature]</i>
04.	23/4	Hasil Rx Thermal cracking, karakteristik Bio	<i>[Signature]</i>
05.	28/5	Analisa Proses yg terjadi	<i>[Signature]</i>
06.	10/6	Abstrak, bab. I dan II	<i>[Signature]</i>
07.	18/6	Bab. III dan IV	<i>[Signature]</i>
08.	20/6	Perbaikan / Revisi	<i>[Signature]</i>
09.	3/7	Perbaikan bab. IV, Pembahasan	<i>[Signature]</i>
10.		Perbaikan kesimpulan	<i>[Signature]</i>

Depok, .....  
Pembimbing Skripsi/ Tesis,

*[Signature]*  
(Prof. Dr. Ir. M. Nasikin, M.Eng)

**Catatan :**

- Diserahkan sebelum Ujian Skripsi/Tesis
- Wajib menunjukkan buku log-book ke masing-masing Pembimbingnya dan minimal 10 x konsultasi.

## PERBAIKAN LAPORAN TESIS

Nama Mahasiswa : Elfi Nur Rohmah  
 No. Pokok. Mhs : 0606004092  
 Pembimbing Tesis : Prof. Dr. Ir. M. Nasikin, M.Eng  
 Hari/Tgl. Ujian Tesis :  
 Judul Tesis : Rekayasa Minyak Jarak (*Jatropha oil*) menjadi bahan bakar setara Solar melalui proses thermal cracking

Sebagai syarat penilaian Tesis, beberapa perbaikan di bawah ini harus dilakukan oleh mahasiswa tersebut :

No.	Materi yang harus diperbaiki
1.	- penulisan ang menggunakan B.Indonesia yg baik - konversi untuk densitas & viscositas unit aplikasi biodiesel di mesin diesel - => grafik hubungan T vs densitas / viscositas
2.	- lampiran - daftar pustaka - jumlah (+) diperbanyak - satuan Ea - penggunaan B.Indonesia & Inggris jangan disatukan
3.	
4.	

Mengetahui dan menyetujui perbaikan Tesis di atas.

Persetujuan perbaikan:

1. Prof. Dr. Ir. M. Nasikin, M.Eng  
 2. Dr. Ir. Slamet NT  
 3. Ir. Sukirno, M.Eng

1.....  
 2.....  
 3.....

Tanda tangan:

1.   
 2.   
 3. 

Depok, ..... Juli 2008.....

Catatan:

- Form perbaikan dibagikan kepada mahasiswa setelah ujian Tesis selesai.
- Koreksi Tesis dapat langsung dituliskan di buku Tesis mahasiswa dan diberitahukan pada mahasiswa saat ujian Tesis.
- Mahasiswa diminta mengambil lagi buku Tesisnya usai ujian untuk proses perbaikan.
- Form perbaikan diserahkan bersama buku Tesis ke Perpustakaan Departemen Teknik Kimia

**KETERANGAN BEBAS PINJAM PERALATAN  
(S1 Reguler, S1 Ekstensi, S2 dan S3)**

Yang bertanda tangan di bawah ini menerangkan bahwa mahasiswa:

Nama : Elfi Nur R NPM. 0606004092

Judul Penelitian :

Dalam Bhs. Indonesia

Rekayasa Minyak garak (gatropha Oil) menjadi Bahan Bakar  
Setara Solar dengan proses thermal Cracking

Dalam Bhs. Inggris

telah mengembalikan semua peralatan dan menyelesaikan persyaratan administrasi laboratorium/bengkel yang digunakan di Departemen Teknik Kimia FTUI.

No.	Tanggal	Laboratorium Yang digunakan	Kepala Laboratorium Laboran (nama jelas)	Tanda Tangan
01.		Lab. Rekayasa Reaksi Kimia dan Konversi Gas Alam	Prof. Dr. Ir. M. Nasikin, M.Eng Jajat Sudrajat	
02.		Lab. Termodinamika Energi dan Lingkungan	Dr. Ir. Asep H.S., M.Eng	
03.		Lab. Dasar proses dan Operasi	Ir. Sukirno., M.Eng Wanizal	
04.		Lab. Dasar Proses Kimia	Ir. Rita Arbianti, M.Si Eko Anjang Budi	
05.		Lab. Separasi	Dr. Ir. Setyo Bismo., DEA	
06.		Lab. Sistem Proses Kimia	Bambang Heru., ST Taufik	
07.		Lab. Bioproses	Ir. Dianursanti., MT Fita Septiana	

Demikian keterangan ini dibuat untuk dipergunakan sebagaimana sebagaimana mestinya:

Depok, .....  
Mahasiswa yang bersangkutan,

(Elfi Nur Rohmah)

**Catatan :**

1. Diselesaikan paling lambat sebelum ujian
2. Dikonfirmasi dengan Pembimbing status kepemilikan Bahan & peralatan (lingkari Nomor daftar diatas)

Tanda Tangan Pembimbing I

Prof. Dr. Ir. M. Nasikin, M.Eng

Tanda Tangan Pembimbing II

.....



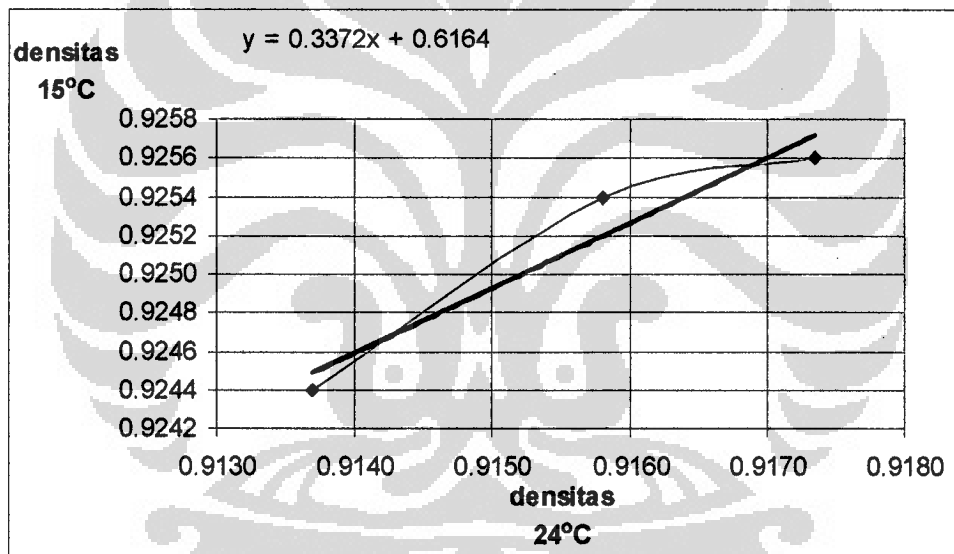
**LAMPIRAN II**  
**PERHITUNGAN DAN DATA PENELITIAN**

**Lampiran 2.1. Perhitungan densitas pada suhu 15°C**

**Tabel L.2.1.1. Densitas bisolar**

$\rho_{24^{\circ}\text{C}}$	$\rho_{15^{\circ}\text{C}}$
0.9174	0.9256
0.9158	0.9254
0.9137	0.9244

Dari tabel L.2.1.1 dapat dibuat grafik hubungan antara densitas pada suhu 24°C vs 15°C. Akan didapatkan sebuah persamaan yang menghubungkan kedua kondisi tersebut, sehingga dari persamaan akan dapat diketahui densitas biosolar pada suhu 15°C.



**Gambar L.1.1. Hubungan antara densitas biosolar pada suhu 15°C vs suhu 24°C**

Didapatkan Persamaan  $Y = 0.3372X + 0.6164$

**Tabel L.2.1.2. Densitas biosolar pada suhu 15°C**

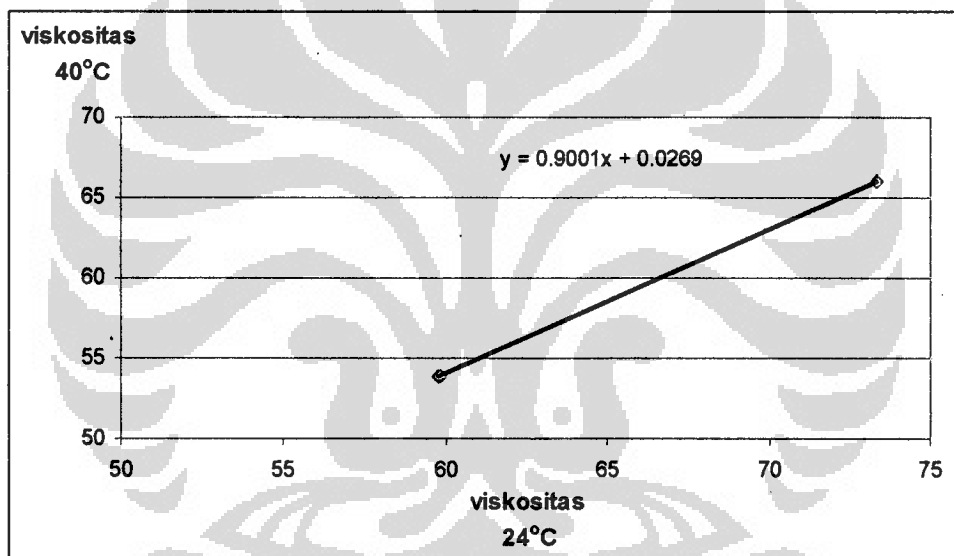
t (menit)	Densitas ( $\text{gr}/\text{cm}^3$ )		
	Temperature Operasi ( $^{\circ}\text{C}$ )		
	325	350	375
0	0.9257	0.9257	0.9257
5	0.9253	0.9254	0.9250
10	0.9252	0.9246	0.9235
15	0.9246	0.9217	0.9241
30	0.9245	0.9212	0.9248

## Lampiran 2.2. Perhitungan Viskositas pada suhu 40°C

Tabel L.2.2.1. Viskositas biosolar

$\mu_{24^{\circ}\text{C}}$	$\mu_{40^{\circ}\text{C}}$
73.3253	66.02374
59.8499	53.90018
59.7709	53.81905

Dari tabel L.2.2.1 dapat dibuat grafik hubungan antara viskositas pada suhu 24°C vs 40°C. Akan didapatkan sebuah persamaan yang menghubungkan kedua kondisi tersebut, sehingga dari persamaan akan dapat diketahui densitas biosolar pada suhu 40°C.



Gambar L.2.2. Viskositas biosolar vs suhu

Didapatkan persamaan  $Y=0.9001 X +0.0269$

Tabel L.2.2.2. Viskositas biosolar pada suhu 40°C

t (menit)	Temperature Operasi (°C)		
	Viskositas kinematik (cSt)		
	325	350	375
0	66.0270	66.0270	66.0270
5	53.8978	51.1936	100.0717
10	53.8267	45.8817	98.4855
15	53.4709	49.0610	114.4344
30	57.8118	49.1013	119.0428

## DATA PENELITIAN

### I. Analisa Densitas

$m_0$  = massa Picnometer (gr)

$m_1$  = massa Picnometer+minyak (gr)

$\rho$  = densitas (gr/cm<sup>3</sup>)

t (menit)	Suhu Operasi (°C)								
	325			350			375		
	$m_0$	$m_1$	$\rho$	$m_0$	$m_1$	$\rho$	$m_0$	$m_1$	$\rho$
5	15.4184	24.5804	0.9162	15.4184	24.5807	0.9162	15.4184	24.5710	0.9153
10	15.4184	24.5764	0.9158	15.4184	24.5582	0.9140	15.4184	24.5267	0.9108
15	15.4184	24.5584	0.9140	15.4184	24.4727	0.9054	15.4184	24.5425	0.9124
30	15.4184	24.5554	0.9137	15.4184	24.4564	0.9038	15.4184	24.5644	0.9146

#### Penurunan Densitas

Densitas minyak jarak = 0.91735 (gr/cm<sup>3</sup>)

$m_0$  = 15.4184

$m_1$  = 24.5919

$\rho_0$  = densitas minyak jarak sebelum di cracking

$\rho_1$  = densitas minyak jarak setelah di cracking

t (menit)	Suhu Operasi (°C)								
	325			350			375		
	$\rho_0$	$\rho_1$	% Penurunan	$\rho_0$	$\rho_1$	% Penurunan	$\rho_0$	$\rho_1$	% Penurunan
5	0.91735	0.9162	0.125361	0.91735	0.91623	0.12209	0.91735	0.91526	0.22783
10	0.91735	0.9158	0.168965	0.91735	0.91398	0.36736	0.91735	0.91083	0.71074
15	0.91735	0.9140	0.365182	0.91735	0.90543	1.29939	0.91735	0.91241	0.53851
30	0.91735	0.9137	0.397885	0.91735	0.9038	1.47708	0.91735	0.91460	0.29978

## II. Analisa Viskositas

$t_i$  = waktu yang diperlukan fluida untuk mencapai garis batas dalam viskometer

$\mu_{kinematik}$  = Centi Stoke

t (menit)	Suhu Operasi (°C)								
	325			350			375		
	t1	t2	t3	t1	t2	t3	t1	t2	t3
5	2.48	2.56	2.53	2.50	2.35	2.34	5.33	5.06	4.97
10	2.44	2.40	2.72	2.40	2.25	2.40	5.11	5.00	5.08
15	2.62	2.30	2.59	2.77	2.44	2.40	6.15	5.83	5.64
30	2.61	2.79	2.72	2.78	2.40	2.45	6.24	5.95	6.10

t (menit)	Temperature Operasi (°C)					
	325		350		375	
	$t_{rata-rata}$	$\mu_{kinematik}$	$t_{rata-rata}$	$\mu_{kinematik}$	$t_{rata-rata}$	$\mu_{kinematik}$
5	2.5233	59.8499	2.3967	56.8456	5.1200	121.4392
10	2.5200	59.7709	2.3500	50.9441	5.0633	120.0952
15	2.5033	59.3756	2.5367	54.4763	5.8733	139.3072
30	2.7067	64.1983	2.5433	54.5211	6.0967	144.6044

### Penurunan Viscositas

Viscositas Minyak Jarak (25°C) = 73.32533 cSt

$\mu_0$  = Viscositas minyak jarak mula-mula

$\mu_1$  = Viscositas minyak jarak setelah di cracking

t (menit)	Suhu Operasi (°C)								
	325			350			375		
	$\mu_0$	$\mu_1$	% Penurunan	$\mu_0$	$\mu_1$	% Penurunan	$\mu_0$	$\mu_1$	% Kenaikan
5	73.3253	59.8499	18.3776	73.3253	56.8456	22.4748	73.3253	111.1485	-51.5827
10	73.3253	59.7709	18.4853	73.3253	50.9441	30.5232	73.3253	109.3863	-49.1794
15	73.3253	59.3756	19.0244	73.3253	54.4763	25.7060	73.3253	127.1053	-73.3443
30	73.3253	64.1983	12.4473	73.3253	54.5211	25.6449	73.3253	132.2252	-80.3268



### III. Analisa Bilangan Iodine

t (menit)	Temperature Operasi (°C)		
	Bil. Iodine (mg Iod/gr sampel)		
	325	350	375
0	44.960	44.960	44.960
5	42.040	40.700	33.820
10	41.250	36.700	38.480
15	39.510	38.670	29.950
30	44.660	32.730	17.150

### IV. Analisa Angka setana

$$CN = CI - 2 \dots\dots\dots (1)$$

$$CI = 0.49083 + (1.06577X) - (0.001052X^2) \dots\dots\dots (2)$$

$$X = 97.833(\log TT_{50})^2 + (2.2088 G \lg TT_{50}) + 0.0127 G^2 - (423.51 \lg TT_{50}) - 4.78008 G + 419.59 \dots\dots\dots (3)$$

Dengan:

CN = *cetane number* (angka setana)

CI = indeks setana atau prediksi dari bilangan setana

G = API gravity

TT<sub>50</sub> = suhu distilasi dalam derajat fahrenheit untuk 50% distilat yang terbentuk

$$API = \frac{141.5}{SG_{15^\circ C}} - 131.5$$

Data titik didih

t (menit)	Titik didih(°C)		
	Suhu Operasi (°C)		
	325	350	375
0	270	270	270
5	140	175	150
10	138	185	148
15	137	160	146
30	137	138	148

Data TT<sub>50</sub>

t (menit)	TT50(°C)		
	Suhu Operasi (°C)		
	325	350	375
0	330	330	330
5	280	335	296
10	278	339	294
15	276	280	292
30	276	280	295

t (menit)	TT <sub>50</sub> (F)		
	Suhu Operasi (°C)		
	325	350	375
0	651.6	651.6	651.6
5	561.6	660.6	590.4
10	558.0	667.8	586.8
15	554.4	561.6	583.2
30	554.4	561.6	588.6

t (menit)	X		
	Suhu Operasi (°C)		
	325	350	375
0	39.0118	39.0118	39.0118
5	28.0751	39.95574	31.55251
10	27.59255	40.5861	30.74942
15	26.99709	27.21328	30.43882
30	26.97316	27.0838	31.27855

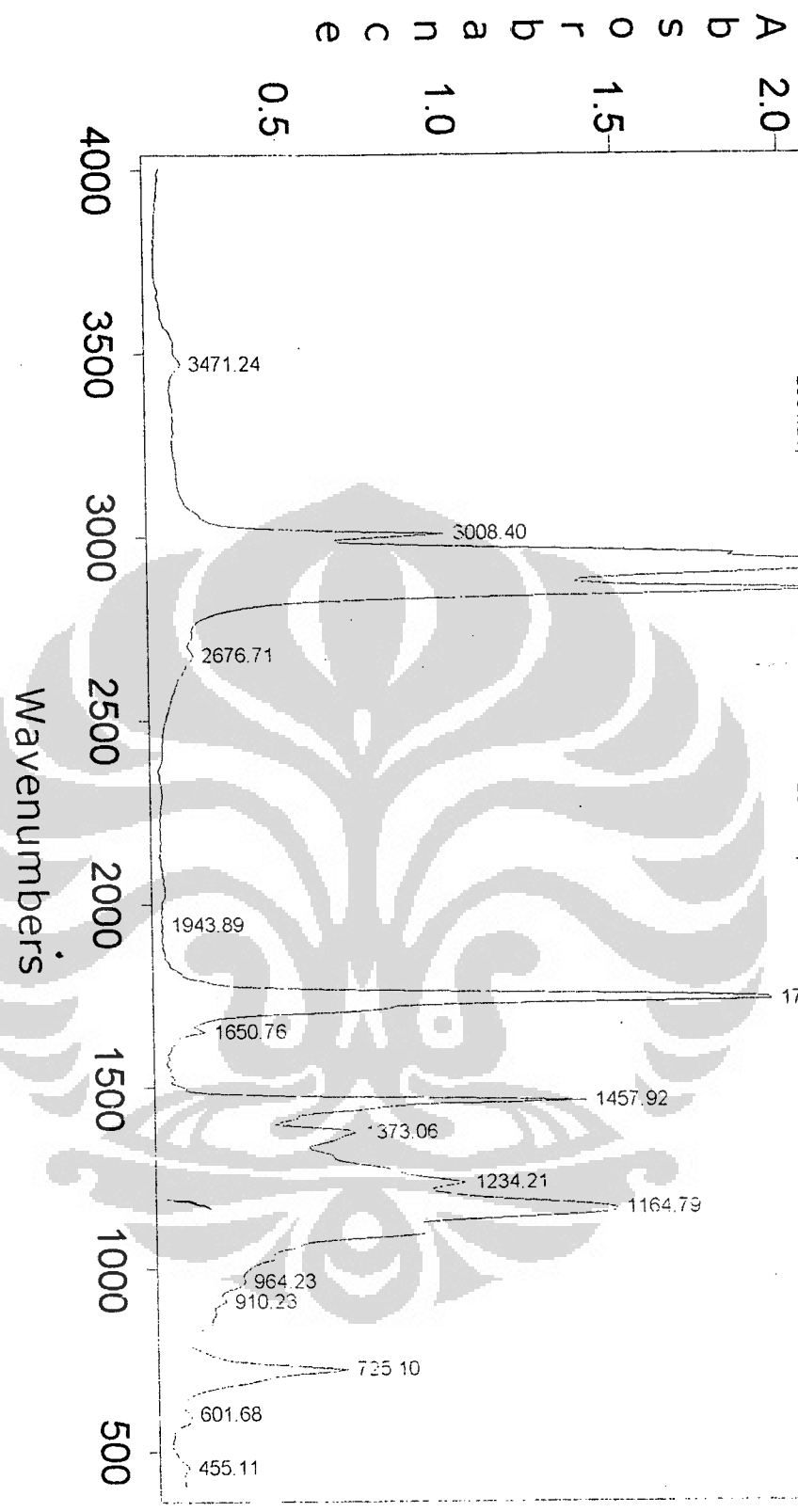
t (menit)	CI		
	Suhu Operasi (°C)		
	325	350	375
0	40.46256	40.46256	40.46256
5	29.58077	41.38993	33.06809
10	29.09483	42.00818	32.26498
15	28.49450	28.71255	31.95401
30	28.47036	28.58197	32.79428

t (menit)	CN		
	Suhu Operasi (°C)		
	325	350	375
0	38.4626	38.4626	38.4626
5	27.5808	39.3899	31.0681
10	27.0948	40.0082	30.2650
15	26.4945	26.7126	29.9540
30	26.4704	26.5820	30.7943

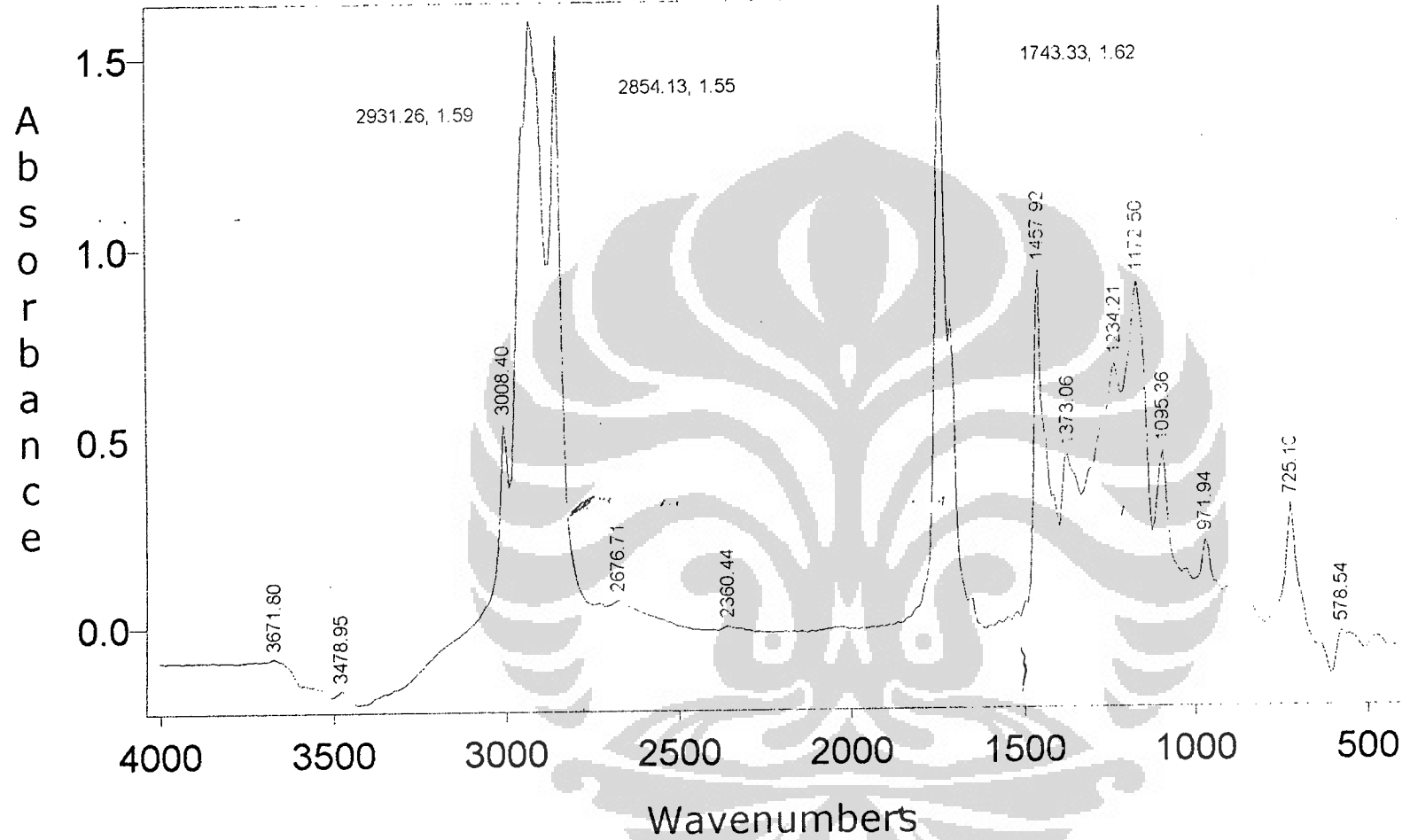


**LAMPIRAN III**  
**RECORD ANALISA FTIR**

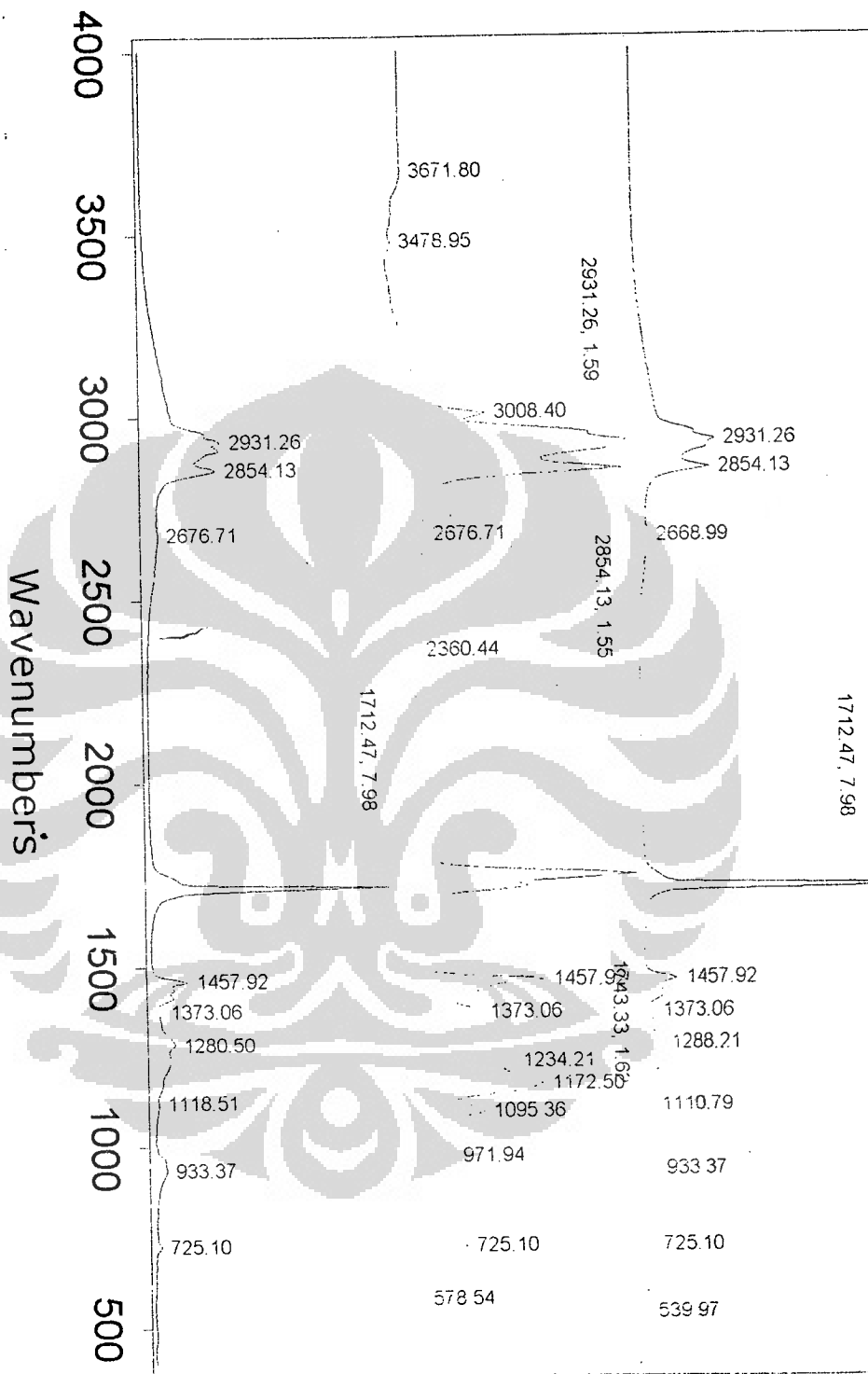
c:\minyak jarak abs Fri Apr 18 14:57:57:26 2008



c:\C4 Jarak 325.abs Fri Jun 20 14:39:03:41 2008



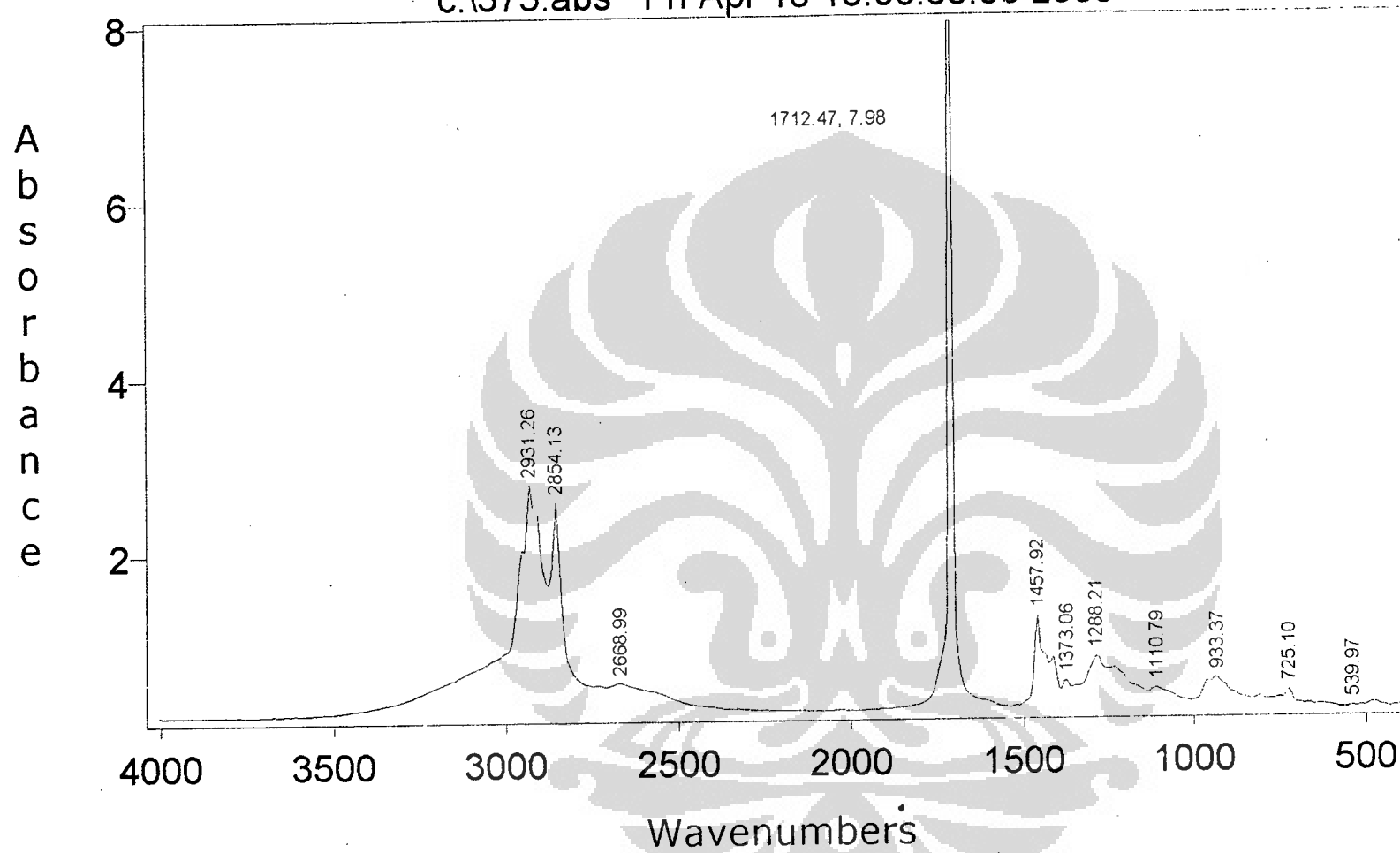
A b s o r b a n c e



c:\T= 350abs Fri Apr 18 15:01:29:92 2008

1712.47, 7.98

c:\375.abs Fri Apr 18 15:06:58:00 2008





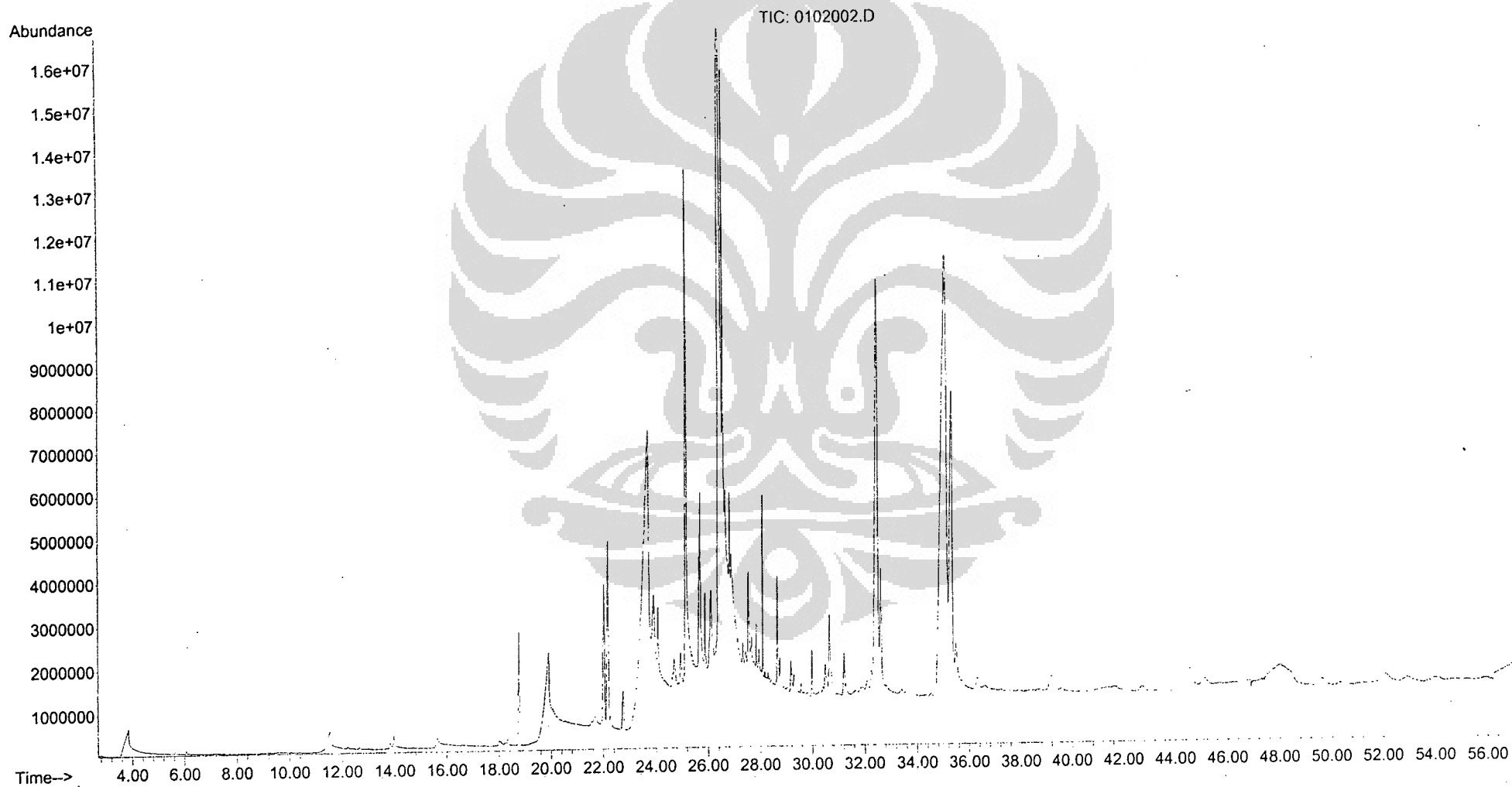
**LAMPIRAN IV**  
**RECORD ANALISA GC – MS**



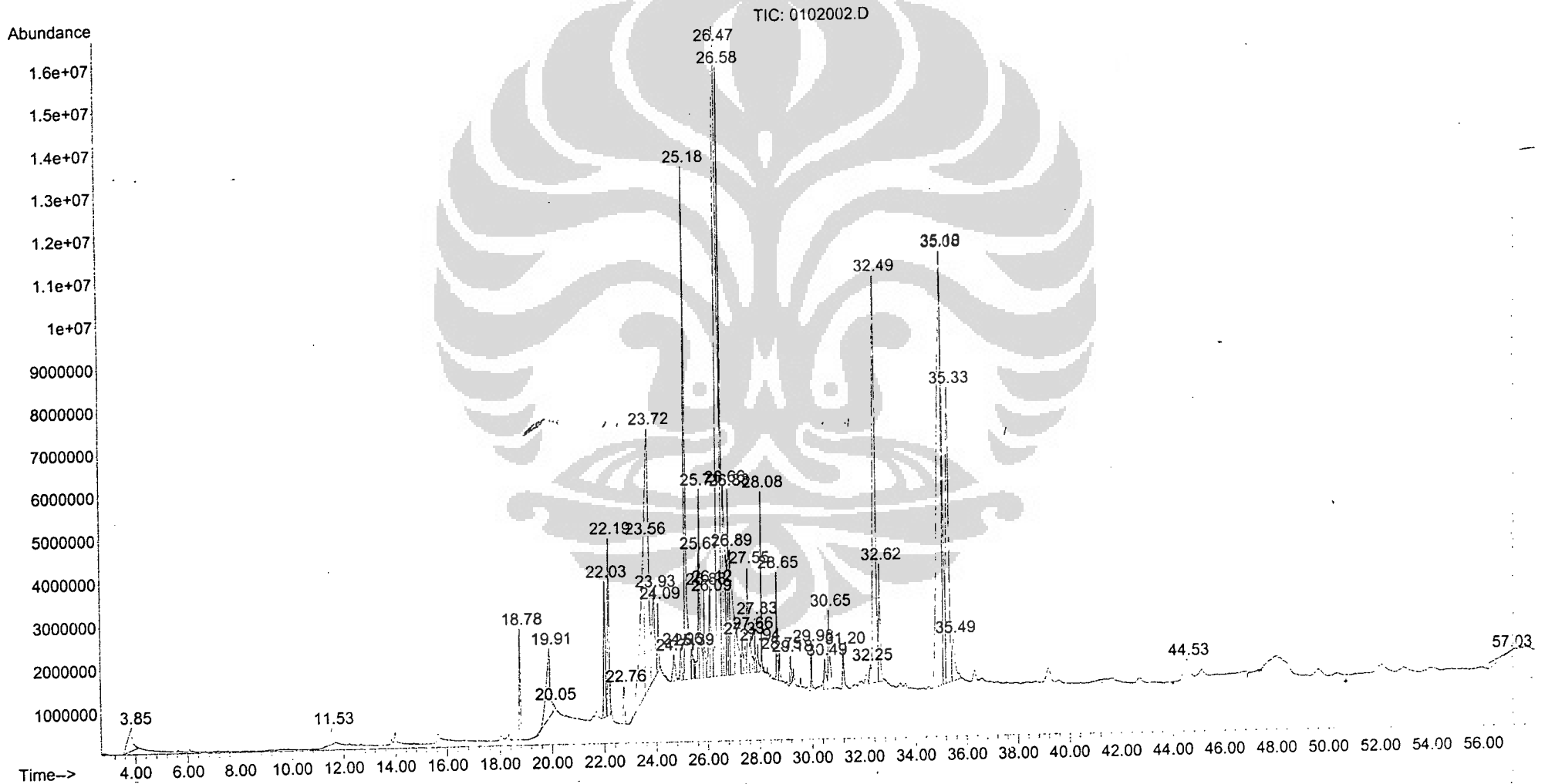
## KETERANGAN SIMBUL PADA ANALISA GC-MS

<b>T (°C)</b>	<b>t (menit)</b>	<b>Simbul</b>
<b>325</b>	<b>5</b>	<b>C1</b>
	<b>10</b>	<b>C2</b>
	<b>15</b>	<b>C3</b>
	<b>30</b>	<b>C4</b>
<b>350</b>	<b>5</b>	<b>A1</b>
	<b>10</b>	<b>A2</b>
	<b>15</b>	<b>A3</b>
	<b>30</b>	<b>A4</b>
<b>375</b>	<b>5</b>	<b>B1</b>
	<b>10</b>	<b>B2</b>
	<b>15</b>	<b>B3</b>
	<b>30</b>	<b>B4</b>

File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080604-B\0102002.D  
Operator : ern  
Acquired : 4 Jun 2008 12:35 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: M.Jarak  
Misc Info :  
Vial Number: 1



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080604-B\0102002.D  
Operator : ern  
Acquired : 4 Jun 2008 12:35 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: M.Jarak  
Misc Info :  
Vial Number: 1



Information from Data File:

File: C:\MSDCHEM\1\DATA\080604-B\0102002.D  
 Operator: em  
 Date Acquired: 4 Jun 2008 12:35  
 Method File: MJARAK  
 Sample Name: M.Jarak  
 Misc Info:  
 Vial Number: 1

Search Libraries: C:\Database\WILEY275.L Minimum Quality: 100

Unknown Spectrum: Apex  
 Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

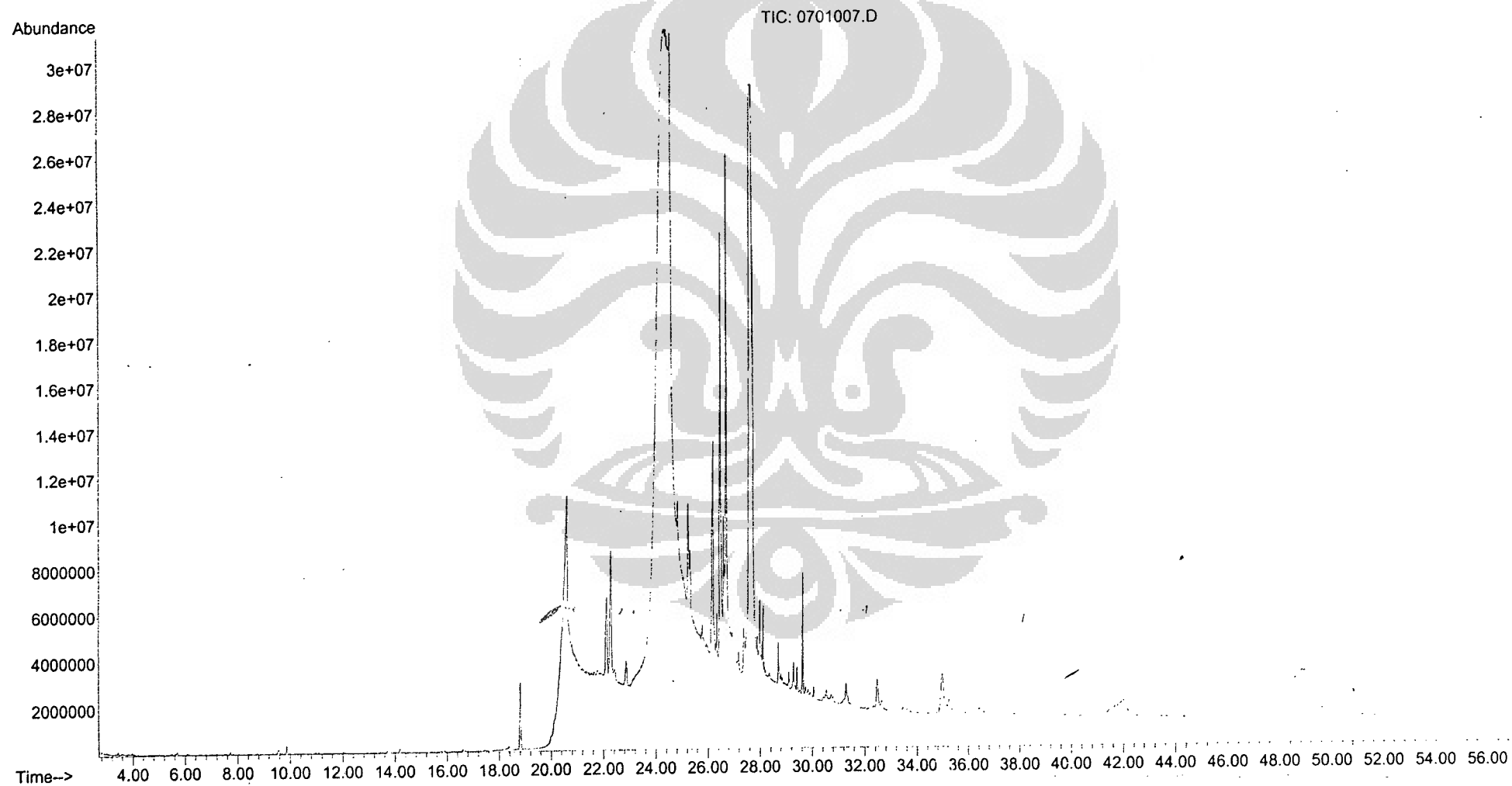
Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	3.35	0.83	C:\Database\WILEY275.L			
			Benzoic acid (CAS) \$\$ Retardex ...	15531	000065-85-0	97
			Benzoic acid (CAS) \$\$ Retardex ...	15538	000065-85-0	96
			Benzoic acid (CAS) \$\$ Retardex ...	15527	000065-85-0	94
2	11.53	0.37	C:\Database\WILEY275.L			
			Dodecanoic acid (CAS) \$\$ Lauric...	85061	000143-07-7	99
			dodecanoic acid \$\$ Lauric acid	85154	000143-07-7	97
			Dodecanoic acid (CAS) \$\$ Lauric...	85057	000143-07-7	97
3	18.78	0.86	C:\Database\WILEY275.L			
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153610	000112-39-0	99
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153629	000112-39-0	99
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153611	000112-39-0	98
4	19.90	1.92	C:\Database\WILEY275.L			
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141005	000057-10-3	99
5	20.05	0.08	C:\Database\WILEY275.L			
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141005	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	99
6	22.03	1.44	C:\Database\WILEY275.L			
			8,11-Octadecadienoic acid, meth...	173619	056599-58-7	99
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	173650	000112-63-0	99
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	173652	000112-63-0	99
7	22.19	1.78	C:\Database\WILEY275.L			
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175223	000112-62-9	99
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175233	000112-62-9	99
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175230	000112-62-9	99
8	22.75	0.38	C:\Database\WILEY275.L			
			Octadecanoic acid, methyl ester...	176789	000112-61-8	99
			Octadecanoic acid, methyl ester...	176794	000112-61-8	99
			Heptadecanoic acid, 16-methyl-,...	176821	005129-61-3	98
9	23.56	4.35	C:\Database\WILEY275.L			
			Linoleic acid	162063	000060-33-3	99
			9-Eicosyne (CAS)	160625	071899-38-2	98
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162047	000060-33-3	98
10	23.72	7.02	C:\Database\WILEY275.L			
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	98
			HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163698	000000-00-0	98
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163702	000112-80-1	96

11	23.93	1.97	C:\Database\WILEY275.L Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165444 000057-11-4 99 Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165441 000057-11-4 99 Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165442 000057-11-4 98
12	24.09	0.49	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanamide (CAS) \$\$ Amide 1... 139963 000629-54-9 86 Dodecanamide (CAS) \$\$ 41 \$\$ Ami... 84016 001120-16-7 64 9-Octadecenamide, (Z)- (CAS) \$\$... 162712 000301-02-0 59
13	24.71	0.42	C:\Database\WILEY275.L Cyclopropaneoctanal, 2-octyl- (... 162189 056196-06-6 90 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163701 000112-80-1 83 HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) 163698 000000-00-0 81
14	24.96	0.33	C:\Database\WILEY275.L Cyclopropaneoctanal, 2-octyl- (... 162189 056196-06-6 93 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)... 148348 056554-35-9 92 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 162047 000060-33-3 90
15	25.18	5.80	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm... 141011 000057-10-3 35 o-Xylene-d10 8730 000000-00-0 30 Undecanedioic acid (CAS) \$\$ 1,9... 101095 001852-04-6 27
16	25.39	0.37	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163703 000112-80-1 91 1-Eicosene (CAS) \$\$ Cetyl ethyl... 162216 003452-07-1 60 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163701 000112-80-1 47
17	25.66	1.09	C:\Database\WILEY275.L 2-Chloroethyl linoleate 207011 025525-76-2 93 2-Chloroethyl linoleate 207012 025525-76-2 93 ETHYL LINOLEATE 184552 000544-35-4 84
18	25.71	1.57	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenamide, (Z)- (CAS) \$\$... 162710 000301-02-0 99 9-Octadecenamide, (Z)- (CAS) \$\$... 162714 000301-02-0 53 Hexadecanamide (CAS) \$\$ Amide 1... 139963 000629-54-9 43
19	25.88	0.72	C:\Database\WILEY275.L Octadecanamide (CAS) \$\$ Stearam... 164472 000124-26-5 90 9-Octadecenamide, (Z)- (CAS) \$\$... 162712 000301-02-0 80 Hexadecanamide (CAS) \$\$ Amide 1... 139963 000629-54-9 74
20	26.09	0.83	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadienoyl chloride, ... 176696 007459-33-8 64 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 213820 002277-28-3 52 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 213822 003443-82-1 50
21	26.12	0.96	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI... 150204 002423-10-1 91 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd... 214838 003443-84-3 78 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2,3-d... 214835 000111-03-5 60
22	26.47	14.94	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$... 150215 001577-52-2 95 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)... 148348 056554-35-9 90 3-Phenyl-1,4(E)-dodecadiene 122441 000000-00-0 87
23	26.58	4.62	C:\Database\WILEY275.L Dodecanoic acid (CAS) \$\$ Lauric... 85063 000143-07-7 38 Cyclobutanone, 2-tetradecyl- (C... 150216 035493-47-1 30 Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm... 141011 000057-10-3 25

1	26.66	2.33	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI...	150204	002423-10-1	53
			9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	40
			12-cyano-15-hexadecanolide \$\$ O...	161021	106943-69-5	40
5	26.83	1.45	C:\Database\WILEY275.L diisooctyl-phthalate	231019	000000-00-0	52
			1,2-Benzenedicarboxylic acid, b...	230981	000117-81-7	50
			1,2-Benzenedicarboxylic acid, b...	230984	000117-81-7	50
6	26.89	2.42	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI...	150204	002423-10-1	86
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	214838	003443-84-3	84
			9,12-Octadecadienoyl chloride, ...	176696	007459-33-8	64
7	27.33	0.37	C:\Database\WILEY275.L 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	90
			9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI...	150204	002423-10-1	56
			9,12-Octadecadienal (CAS)	148347	026537-70-2	53
28	27.55	1.11	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	214838	003443-84-3	38
			Benzene, 1,3,5-trimethyl- (CAS)...	15005	000108-67-8	22
			Benzene; 1,3,5-trimethyl- (CAS)...	15002	000108-67-8	18
29	27.66	0.45	C:\Database\WILEY275.L Benzene, 1,2,3-trimethyl- (CAS)...	14982	000526-73-8	38
			(S)-(+)-DIMETHYL(METHYL(1-PHENY...	79542	000000-00-0	38
			Benzoic acid, 2-ethoxy- \$\$ Benz...	50714	000134-11-2	38
30	27.83	0.29	C:\Database\WILEY275.L Tricarbonyl(1-4-.eta.-6-cyanocy...	141363	116852-14-3	40
			tricarbonyl[1.beta.-cyano-1.alp...	165831	094570-59-9	40
			2-Methyl-5-methylthio-4-nitroim...	57903	090521-98-5	30
31	27.94	0.27	C:\Database\WILEY275.L (R)-(-)-14-Methyl-8-hexadecyn-1-ol	137566	064566-18-3	90
			9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	90
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2,3-d...	214835	000111-03-5	64
32	28.08	0.65	C:\Database\WILEY275.L 2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaen...	238657	007683-64-9	98
			2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaen...	238659	000111-02-4	96
			2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaen...	238654	007683-64-9	95
33	28.66	0.69	C:\Database\WILEY275.L Hexadecadienoic acid, methyl es...	150034	029961-54-4	58
			(Z,Z)-3,13-octadecadien-1-ol	150220	000000-00-0	48
			9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$...	150215	001577-52-2	43
34	28.75	0.21	C:\Database\WILEY275.L 6-Formyl-2,3-dimethylindole	58160	000000-00-0	30
			1,3,3,5-TETRAMETHYL-1-(2,2-DIME...	129944	000000-00-0	22
			1,8-Naphthyridin-2-amine, 5,7-d...	58126	039565-07-6	22
35	29.17	0.21	C:\Database\WILEY275.L Cyclotriacontane (CAS)	242287	000297-35-8	59
			9,12-Hexadecadienoic acid, meth...	150032	002462-80-8	44
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 9-hex...	260227	022393-99-3	42
36	29.98	0.32	C:\Database\WILEY275.L 4-[.beta.-[p'-(Di-n-butylamino)...	238572	090134-08-0	90
			Rotenalone \$\$ [1]Benzopyrano[3,...	238357	000509-96-6	83
			4,4',5,5',9,9',10,10'-Octahydro...	238676	034911-42-7	80

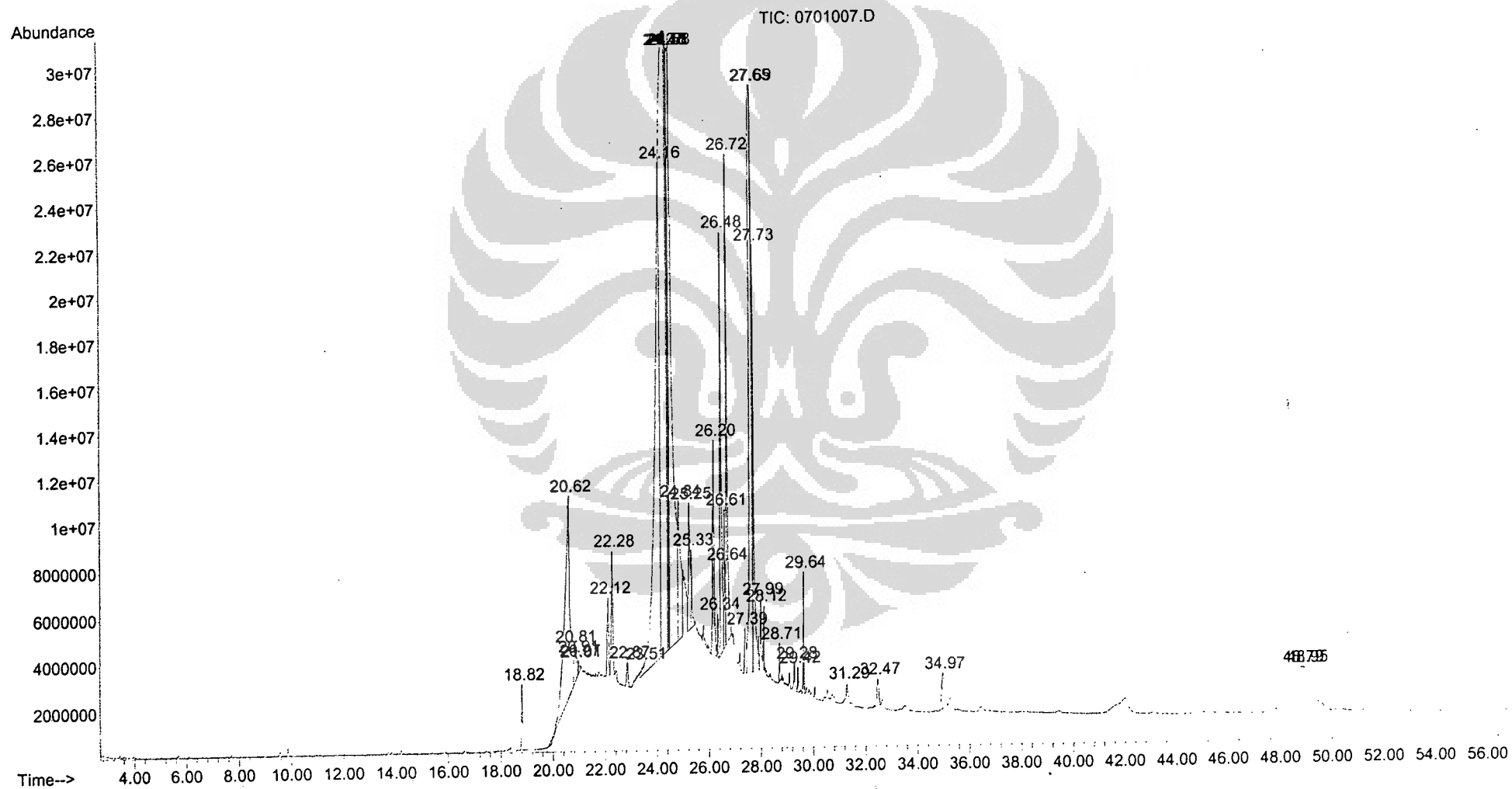
37	30.49	0.41	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 162049 000060-33-3 59 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 172651 000112-63-0 53 10,13-Octadecadienoic acid, met... 173628 056554-62-2 56
38	30.65	0.91	C:\Database\WILEY275.L 1-Mercapto-2-heptadecanone 167042 076078-79-0 50 1-Mercapto-2-heptadecanone 167041 076078-79-0 50 5-Hydroxy-6-methoxy-2-methyl-3-... 139125 078134-83-5 50
39	31.20	0.48	C:\Database\WILEY275.L Stigmast-5-en-3-ol, (3.beta.)- ... 240204 000083-46-5 99 Stigmast-5-en-3-ol, (3.beta.,24... 240207 000083-47-6 99 (23S)-ethylcholest-5-en-3.beta.... 240252 113845-28-6 99
40	32.25	0.21	C:\Database\WILEY275.L OLEIC ACID, PROPYL ESTER 195830 000000-00-0 90 p-Menth-8(10)-en-9-ol, cis- (CA... 40318 015714-13-3 55 Z,Z-6,24-Tritriacontadien-2-one 255536 000000-00-0 53
41	32.49	7.71	C:\Database\WILEY275.L 8,11-dimethyl-9,10-diphenyldicy... 194657 102860-09-3 59 Methyl 8-Nitro-4,5,7-trimethoxy... 193504 077729-58-9 59 5,6,10-Trimethoxy-7H-dibenzo(de... 193636 088741-68-8-45
42	32.62	1.31	C:\Database\WILEY275.L 4H-3-(p-methylanilino)1-benzoth... 164246 116884-81-2 78 2AR*,3R*,8BS*-2A,8B-DIHYDROXY-3... 150705 090732-18-6 49 Octadecanoic acid, ethenyl este... 185933 000111-63-7 49
43	35.08	13.21	C:\Database\WILEY275.L rel-(1R,4aR,8aR,5S)-1,4-dimethy... 148818 133116-13-9 55 7-13C-METHYLENE-CYCLOHEXANE 5297 033717-96-3 47 Oxonin, 4,5,6,7-tetrahydro-, (Z... 16755 017123-56-7 47
44	35.11	3.85	C:\Database\WILEY275.L rel-(1R,4aR,8aR,5S)-1,4-dimethy... 148818 133116-13-9 83 (1r*,2r*,1'r*)-2-(2'-oxocyclohe... 111230 108444-92-4 32 7-13C-METHYLENE-CYCLOHEXANE 5297 033717-96-3 27
45	35.34	5.90	C:\Database\WILEY275.L 5,6-dihydro-7,8-dimethoxy-5-met... 211010 006880-91-7 42 1,1-bis(4-tert-butylphenyl)-2-d... 210750 109927-97-1 38 3-phenyl-3-aza-9,10:11,12-diben... 211081 117776-45-1 22
46	35.49	0.92	C:\Database\WILEY275.L 4H-3-(p-methylanilino)1-benzoth... 164246 116884-81-2 64 13H-DIBENZO(A,I)CARBAZOLE \$\$ Di... 150820 042226-53-9 49 13H-Dibenzo[a,i]carbazole \$\$ 1,... 150817 000239-64-5 49
47	44.53	0.77	C:\Database\WILEY275.L 6,9,10-trimethoxy-12H-[1]benzox... 194869 003395-21-9 43 7,10-dihydro-6,11-dihydroxy-3-m... 195511 078045-06-4 40 5,5-diphenyl-4-(methylthio)-2-(... 194902 118514-99-1 37
48	57.03	0.41	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid, 2-[(1-oxotet... 274183 056599-89-4 30 Octadecanoic acid, 3-[(1-oxohex... 274500 056554-26-8 25 Octadecanoic acid, 2-[(1-oxohex... 274755 002177-97-1 11

File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0701007.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 18:19 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: C1  
Misc Info :  
Vial Number: 7





File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0701007.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 18:19 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: C1  
Misc Info :  
Vial Number: 7



Information from Data File:

File: C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0701007.D  
 Operator: TAZ  
 Date Acquired: 6 Jun 2008 13:19  
 Method File: MJARAK  
 Sample Name: C1  
 Misc Info:  
 Vial Number: 7

Search Libraries: C:\Database\WILEY275.L Minimum Quality: 100

Unknown Spectrum: Apex  
 Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	18.81	0.43	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid, methyl ester...	153622	000112-39-0	99
			METHYL HEXADECANOATE \$\$ METHYL ...	153678	000000-00-0	99
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153607	000112-39-0	98
2	20.63	6.35	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	99
3	20.80	0.44	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	98
4	20.91	0.15	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	98
5	20.97	0.06	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141005	000057-10-3	98
6	21.00	0.07	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141005	000057-10-3	98
7	22.12	0.68	C:\Database\WILEY275.L 8,11-Octadecadienoic acid, meth...	173618	056599-58-7	99
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162047	000060-33-3	99
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	173651	000112-63-0	99
8	22.28	1.12	C:\Database\WILEY275.L 8-Octadecenoic acid, methyl est...	175220	002345-29-1	99
			7-Octadecenoic acid, methyl est...	175219	057396-98-2	99
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175237	000112-62-9	99
9	22.87	0.22	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	95
			PALMITIC ACID \$\$ HEXADECANOIC ACID	141082	000000-00-0	92
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141008	000057-10-3	92
10	23.51	0.16	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141008	000057-10-3	98
			PALMITIC ACID \$\$ HEXADECANOIC ACID	141082	000000-00-0	97

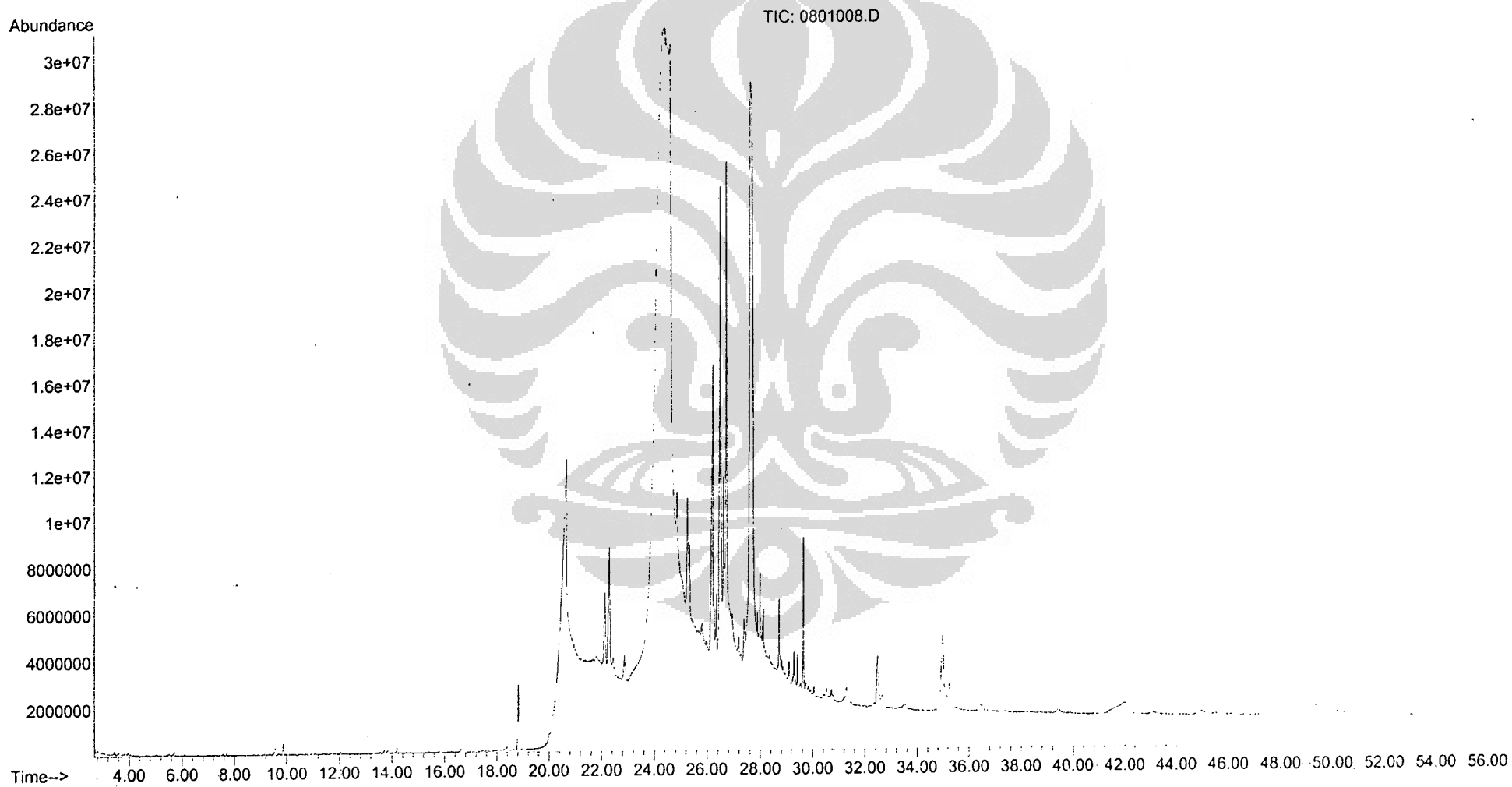
1	24.16	14.30	C:\Database\WILEY275.L Linoleic acid	162063	000060-33-3	98
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162047	000060-33-3	98
			9-Eicosyne (CAS)	160625	071899-38-2	95
12	24.37	20.69	C:\Database\WILEY275.L Linoleic acid	162063	000060-33-3	97
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162047	000060-33-3	95
			9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	95
13	24.45	3.73	C:\Database\WILEY275.L Linoleic acid	162063	000060-33-3	98
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162047	000060-33-3	95
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162049	000060-33-3	94
14	24.48	3.20	C:\Database\WILEY275.L Linoleic acid	162063	000060-33-3	98
			9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	96
			Linoleic acid	162061	000060-33-3	94
15	24.51	5.23	C:\Database\WILEY275.L 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	97
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	95
			Linoleic acid	162063	000060-33-3	93
16	24.58	7.95	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	98
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163706	000112-80-1	97
			HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163698	000000-00-0	97
17	24.84	2.29	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163704	000112-80-1	97
			9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	95
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	93
18	25.25	1.23	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163704	000112-80-1	92
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	91
			1-Eicosene (CAS) \$\$ Cetyl ethyl...	162216	003452-07-1	60
19	25.33	0.51	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163704	000112-80-1	95
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	93
			HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163698	000000-00-0	89
20	26.20	1.75	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI...	150204	002423-10-1	84
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	214838	003443-84-3	81
			Oleic acid, 3-hydroxypropyl est...	205978	000821-17-0	68
21	26.34	0.15	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163704	000112-80-1	94
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	64
			9-Octadecenoic acid, methyl est...	175241	001937-62-8	62
22	26.48	3.33	C:\Database\WILEY275.L 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	92
			9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI...	150204	002423-10-1	91
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162049	000060-33-3	59
23	26.61	0.65	C:\Database\WILEY275.L HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163698	000000-00-0	40
			2-(METHYL-D3)-CYCLODECANONE	53727	032454-56-1	30
			(E)-6-METHOXY-2-(2'-AMINO BENZYL)...	150636	077764-94-4	25

24	26.64	0.33	C:\Database\WILEY275.L 14-Octadecenoic acid, methyl es... 9-Octadecenoic acid (Z)-, methy... 2,4-DIPHENYL GLUTARONITRILE	175253 175232 131545	056554-48-4 000112-62-9 000000-00-0	44 44 38
25	26.72	3.40	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1-... Hexadecanoic acid, 2,3-dihydrox... methyl 1-anthraquinonesulfenate...	199572 199569 153101	023470-00-0 000542-44-9 002831-71-2	91 72 53
26	27.39	0.43	C:\Database\WILEY275.L CINNAMYL CINNAMATE 1-Butene, 4,4-dichlorohexafluor... 2-Oxazolidinethione, 4,4-dimeth...	148305 117154 21348	000000-00-0 000357-24-4 054013-55-7	47 47 38
27	27.55	9.08	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$... 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	150215 213822 214838	001577-52-2 003443-82-1 003443-84-3	97 92 89
28	27.69	2.55	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$... 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd... 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	150215 214838 213822	001577-52-2 003443-84-3 003443-82-1	96 95 90
29	27.73	2.29	C:\Database\WILEY275.L Octadecanoic acid, 2-hydroxy-1-... Octadecanoic acid, 2-hydroxy-1-... 2-Thiabicyclo[3.2.0]hept-3-ene-...	215875 215876 127334	000621-61-4 000621-61-4 034002-20-5	91 68 30
30	28.00	0.44	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$... 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	150215 162049 214838	001577-52-2 000060-33-3 003443-84-3	59 55 50
31	28.12	0.19	C:\Database\WILEY275.L 2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaen... 2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaen... 2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaen...	238657 238659 238654	007683-64-9 000111-02-4 007683-64-9	95 93 86
32	28.71	0.18	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... Linoleic acid	162047 162049 162062	000060-33-3 000060-33-3 000060-33-3	78 64 55
33	29.28	0.20	C:\Database\WILEY275.L 5,5'-bis(acetyl)-3,3'-biisoxazo... 1-(4'-pentenyl)-1,2-epoxycyclop... 3,8-Dioxatricyclo[5.1.0.0(2,4)]...	104839 38055 26281	111080-82-1 119681-08-2 053966-43-1	11 10 10
34	29.41	0.12	C:\Database\WILEY275.L 1,4,4a,8b-tetrahydro-1-methyl-2... 2-acetyl-8-isopropyl-peri-xanth... 2,8-diisopropyl-peri-xanthenoxa...	243416 233200 233230	107319-68-6 133376-93-9 133376-91-7	90 72 72
35	29.64	0.54	C:\Database\WILEY275.L 1,4,4a,8b-tetrahydro-1-methyl-2... 2,8-diisopropyl-peri-xanthenoxa... 25-EPIAPLYSTERYLACETATE-2	243416 233230 251787	107319-68-6 133376-91-7 000000-00-0	90 90 87
36	31.29	0.25	C:\Database\WILEY275.L Stigmast-5-en-3-ol, (3.beta.,24... 24.XI.-ETHYLCHOLEST-5-EN-3.BETA... Stigmast-5-en-3-ol, (3.beta.,24...	240207 240218 240208	000083-47-6 019044-06-5 000083-47-6	98 91 49

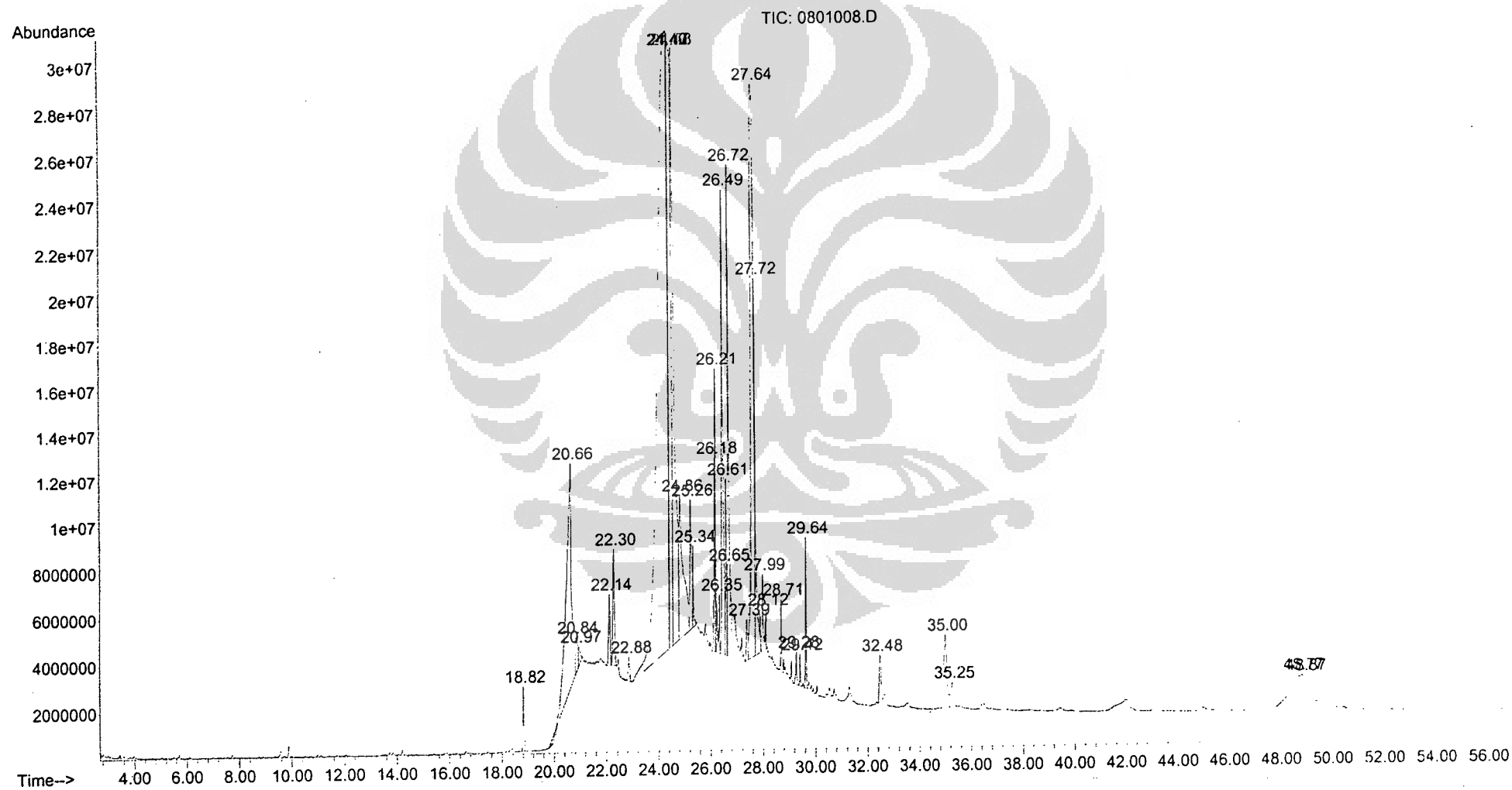
7	32.47	0.29	C:\Database\WILEY275.L				
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162049	000060-33-3	95	
			9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$...	150215	001577-52-2	93	
			CYCLODOCOSANE, ETHYL-	203769	000000-00-0	92	
8	34.96	0.59	C:\Database\WILEY275.L				
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162049	000060-33-3	83	
			HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163698	000000-00-0	64	
			1,2-Epoxy-1-vinylcyclododecene	93984	053601-11-9	64	
9	48.79	2.99	C:\Database\WILEY275.L				
			2,5-diphenyl-3-(2-furoyl)pyrrol...	188048	132058-96-9	53	
			(+)-dihydronalafine \$\$ ((+)-...	188012	122577-05-3	53	
			3-hexyl-8-phenyl-1,6,8-triazabi...	187941	000000-00-0	46	
0	48.96	1.42	C:\Database\WILEY275.L				
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	214838	003443-84-3	91	
			(+)-Cephalotaxinone \$\$ Cephalo...	187921	038848-26-9	50	
			Methamino, imide derivative of 4...	187861	041634-21-3	50	



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0801008.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 19:20 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: C2  
Misc Info :  
Vial Number: 8



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0801008.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 19:20 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: C2  
Misc Info :  
Vial Number: 8



Information from Data File:

File: C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0801008.D  
 Operator: TAZ  
 Date Acquired: 6 Jun 2008 19:20  
 Method File: MJARAK  
 Sample Name: C2  
 Misc Info:  
 Vial Number: 8

Search Libraries: C:\Database\WILEY275.L Minimum Quality: 50  
 C:\Database\IOC1.L Minimum Quality: 50  
 C:\Database\PMW\_TOX2.L

Unknown Spectrum: Apex  
 Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

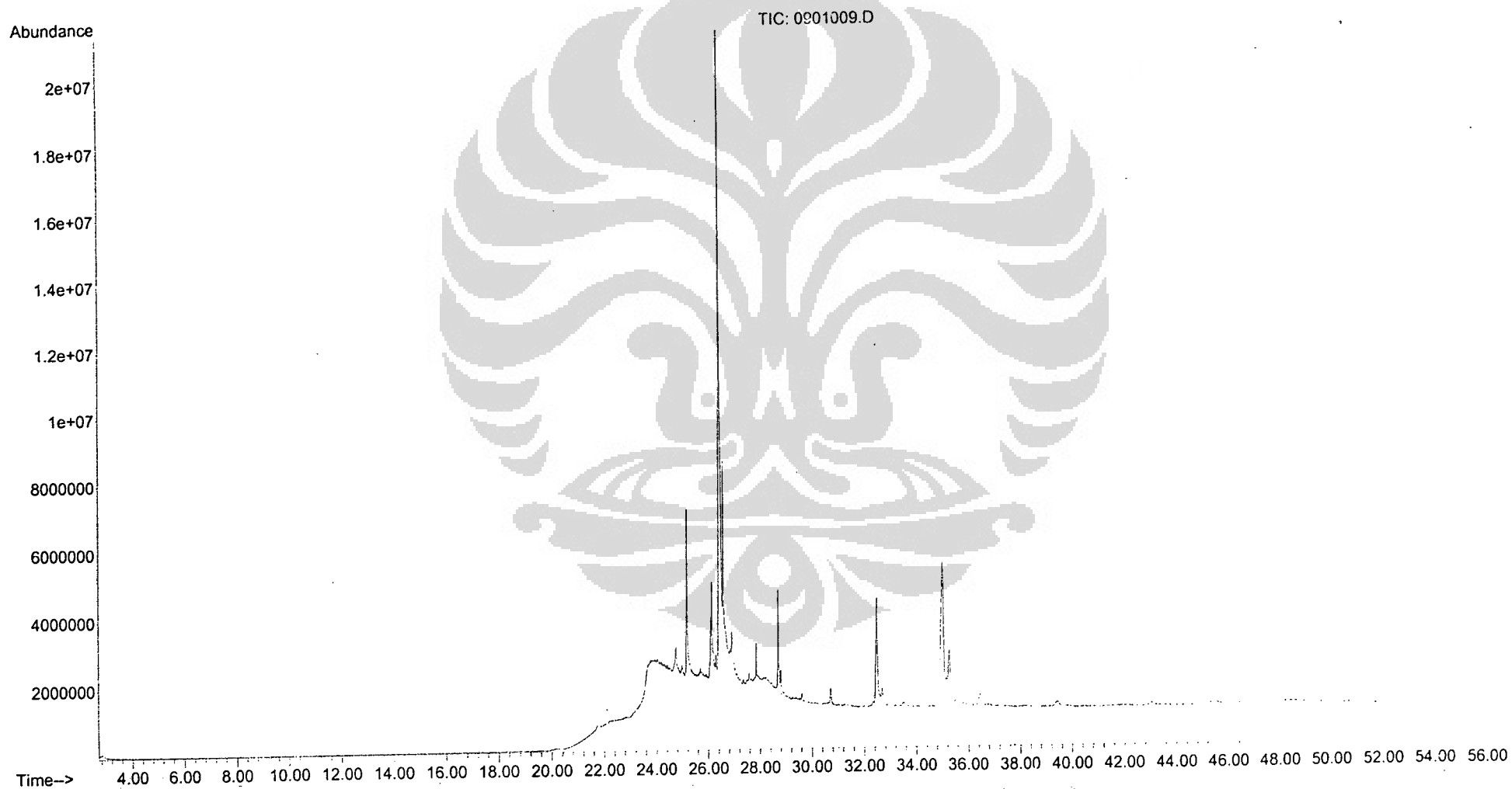
#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	18.82	0.41	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid, methyl ester...	153629	000112-39-0	98
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153610	000112-39-0	98
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153607	000112-39-0	98
2	20.66	7.18	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	99
3	20.84	0.46	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141005	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	98
4	20.97	0.17	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	98
5	22.13	0.58	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162047	000060-33-3	99
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	173650	000112-63-0	99
			10,13-Octadecadienoic acid, met...	173628	056554-62-2	99
6	22.30	1.09	C:\Database\WILEY275.L 8-Octadecenoic acid, methyl est...	175222	026528-50-7	99
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175233	000112-62-9	99
			6-Octadecenoic acid, methyl est...	175213	002777-58-4	98
7	22.87	0.21	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	96
			Octadecanoic acid, methyl ester...	176789	000112-61-8	90
			Octadecanoic acid, methyl ester...	176802	000112-61-8	89
8	24.40	34.96	C:\Database\WILEY275.L Linoleic acid	162063	000060-33-3	98
			9-Eicosyne (CAS)	160625	071899-38-2	96
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162047	000060-33-3	95
9	24.43	2.73	C:\Database\WILEY275.L Linoleic acid	162063	000060-33-3	97
			9-Eicosyne (CAS)	160625	071899-38-2	96
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162047	000060-33-3	95



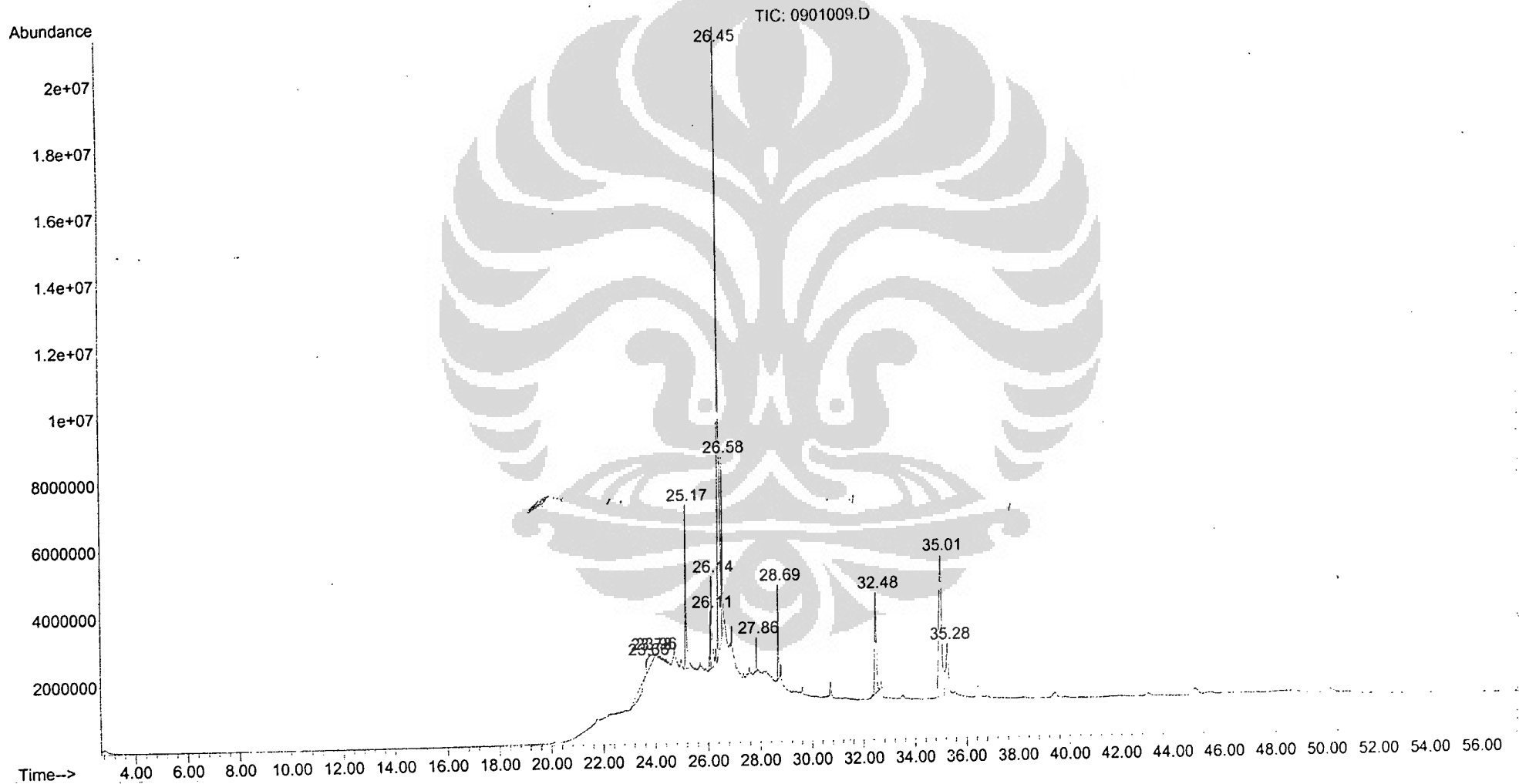
10	24.46	9.13	C:\Database\WILEY275.L Linoleic acid	162063	000060-33-3	98
			Linoleic acid	162061	000060-33-3	94
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162049	000060-33-3	93
11	24.58	8.95	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	95
			Linoleic acid	162063	000060-33-3	95
			HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163698	000000-00-0	93
12	24.86	3.60	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163704	000112-80-1	97
			HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163698	000000-00-0	87
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	86
13	25.26	1.32	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	91
			1-Eicosene (CAS); \$\$ Cetyl ethyl...	162216	003452-07-1	60
			HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163698	000000-00-0	58
14	25.35	0.42	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163704	000112-80-1	95
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	93
			HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163698	000000-00-0	66
15	26.18	1.09	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162047	000060-33-3	90
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	213822	003443-82-1	87
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	213820	002277-28-3	87
16	26.21	1.17	C:\Database\WILEY275.L Oleic acid, 3-hydroxypropyl est...	205978	000821-17-0	90
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	214838	003443-84-3	90
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2,3-d...	214835	000111-03-5	86
17	26.35	0.22	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163704	000112-80-1	95
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	74
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175235	000112-62-9	66
18	26.49	4.08	C:\Database\WILEY275.L 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	92
			9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI...	150204	002423-10-1	91
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162049	000060-33-3	59
19	26.61	0.91	C:\Database\PMW_TOX2.L Cyclotetradecane	...	2354	000295-17-0 41
			Thioridazine-M (sulfoxide)	...	2200	000000-00-0 10
			Cyclohexanone	...	3610	000108-94-1 10
20	26.65	0.30	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162049	000060-33-3	59
			OLEIC ACID, PROPYL ESTER	195830	000000-00-0	42
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2,3-d...	214835	000111-03-5	25
21	26.72	3.52	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1-...	199572	023470-00-0	90
			methyl 1-anthraquinonesulfenate...	153101	002831-71-2	53
			Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1-...	199573	023470-00-0	27
22	27.39	0.35	C:\Database\WILEY275.L DI-(9-OCTADECENOYL)-GLYCEROL	269900	000000-00-0	91
			Cinnamyl cinnamate \$\$ 2-Propeno...	148313	000122-69-0	38
			CINNAMYL CINNAMATE	148305	000000-00-0	35

3	27.64	10.24	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd... 214838 003443-84-3 95 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 213822 003443-82-1 92 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 213820 002277-28-3 64
4	27.72	1.99	C:\Database\WILEY275.L Octadecanoic acid, 2-hydroxy-1-... 215875 000621-61-4 86 Octadecanoic acid, 2-hydroxy-1-... 215876 000621-61-4 64 2,3-dicarbomethoxybenzoselenophene 176065 114221-63-5 43
5	27.99	0.44	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd... 214838 003443-84-3 58 N-ACETYL-4-(2',3'-DIHYDROXYPROP... 150473 000000-00-0 30 N-Acetyl-4-(2',3'-dihydroxyprop... 150482 000000-00-0 30
6	28.12	0.12	C:\Database\WILEY275.L FARNESOL ISOMER B 108576 000000-00-0 78 FARNESOL ISOMER A 108575 000000-00-0 60 2,6,10-Dodecatrien-1-ol, 3,7,11... 148212 004128-17-0 60
7	28.71	0.38	C:\Database\PMW_TOX2.L Fluvoxamine artifact-1 ... 1816 000000-00-0 10
8	29.28	0.21	C:\Database\PMW_TOX2.L No matches found
9	29.41	0.14	C:\Database\WILEY275.L 1,4,4a,8b-tetrahydro-1-methyl-2... 243416 107319-68-6 83 2,8-diisopropyl-peri-xanthenoxa... 233230 133376-91-7 72 ERGOSTA-4,6,22-TRIEN-3BETA-OL \$... 233340 034026-93-2 50
10	29.64	0.71	C:\Database\WILEY275.L 2,8-diisopropyl-peri-xanthenoxa... 233230 133376-91-7 90 1,4,4a,8b-tetrahydro-1-methyl-2... 243416 107319-68-6 83 25-EPIAPLYSTERYLACETATE-2 251787 000000-00-0 76
11	32.48	0.48	C:\Database\PMW_TOX2.L No matches found
12	34.99	1.33	C:\Database\WILEY275.L 4.alpha.,23,24-Trimethyl-5.alph... 259682 000000-00-0 91 DI-(9-OCTADECENOYL)-GLYCEROL 269900 000000-00-0 43 OLEIC ACID, PROPYL ESTER 195830 000000-00-0 40
13	35.25	0.42	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)-, 9-hex... 260226 022393-99-3 60 9-Octadecenoic acid (Z)-, 9-oct... 263533 003687-45-4 35 9-Octadecenoic acid (Z)-, 9-hex... 260227 022393-99-3 35
14	48.77	0.58	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd... 214838 003443-84-3 91 (+)-dihydranulafine \$\$ ((+)-... 188012 122577-05-3 53 2,5-diphenyl-3-(2-furoyl)pyrrol... 188048 132058-96-9 53
15	48.87	0.10	C:\Database\WILEY275.L (+)-dihydranulafine \$\$ ((+)-... 188012 122577-05-3 72 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2,3-d... 214835 000111-03-5 55 1-Ethyl-5,10-dihydroxy-4-oxo-6,... 187843 000000-00-0 47

File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0901009.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 20:22 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: C3  
Misc Info :  
Vial Number: 9



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0901009.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 20:22 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: C3  
Misc Info :  
Vial Number: 9



Information from Data File:

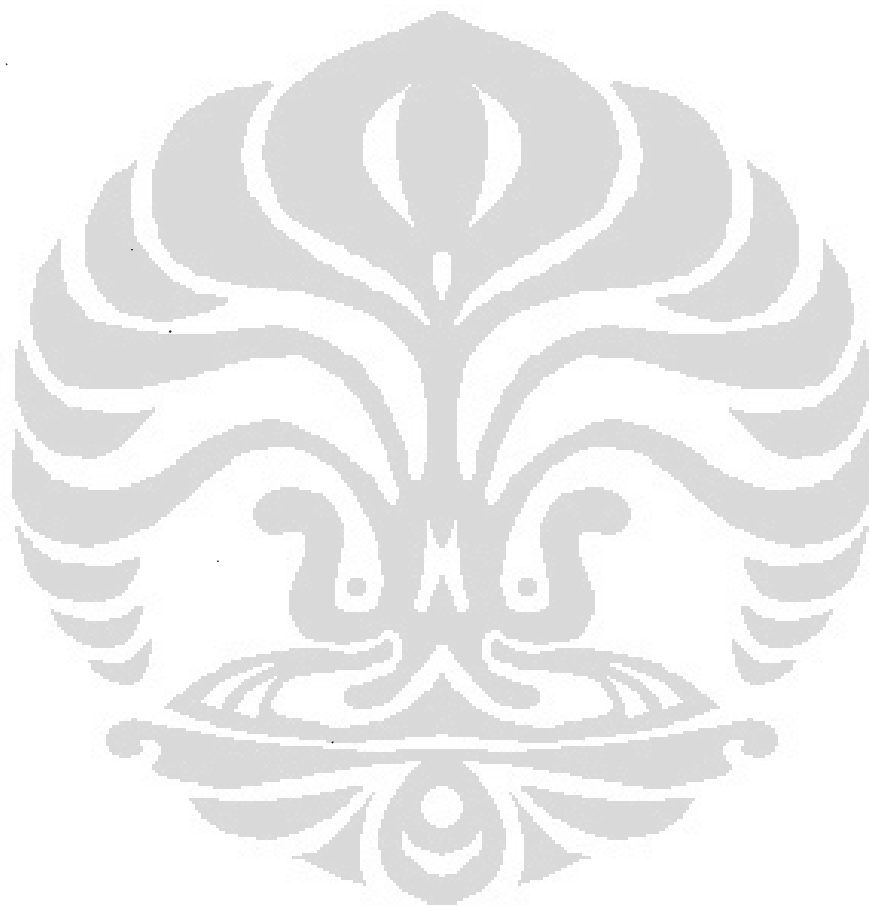
File: C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0901009.D  
 Operator: TAZ  
 Date Acquired: 6 Jun 2008 20:22  
 Method File: MJARAK  
 Sample Name: C3  
 Misc Info:  
 Vial Number: 9

Search Libraries: C:\Database\WILEY275.L Minimum Quality: 50  
 C:\Database\IOC1.L Minimum Quality: 50  
 C:\Database\PMW\_TOX2.L

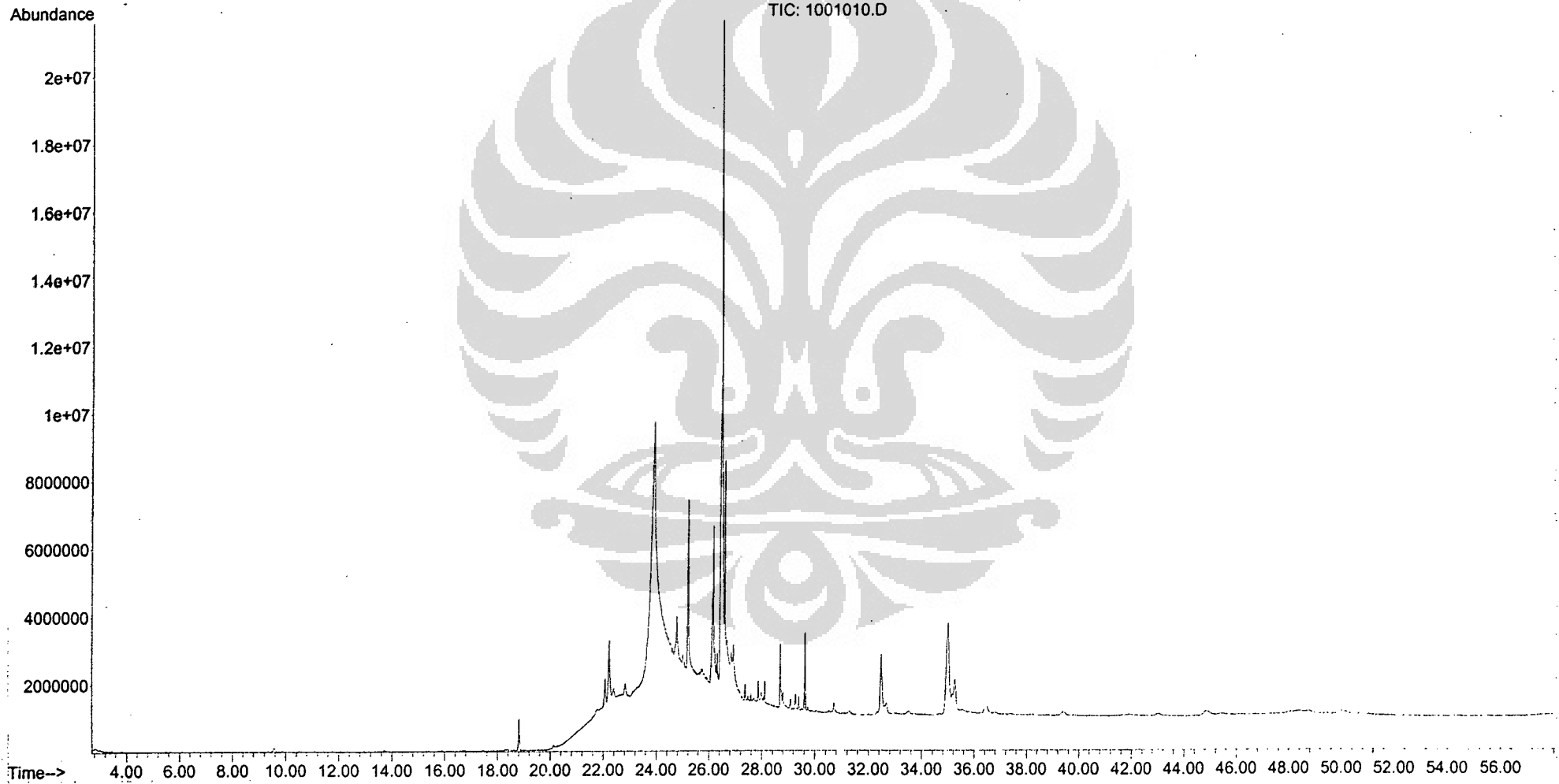
Unknown Spectrum: Apex  
 Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual	
1	23.66	-2.09	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703 163698 163701	000112-80-1 000000-00-0 000112-80-1	99 95 95	
2	23.78	1.59	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) Linoleic acid	163703 163698 162063	000112-80-1 000000-00-0 000060-33-3	99 95 94	
3	23.96	1.40	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... Linoleic acid 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703 162063 163700	000112-80-1 000060-33-3 000112-80-1	99 94 93	
4	25.18	8.66	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	163704 163703 141011	000112-80-1 000112-80-1 000057-10-3	53 43 41	
5	26.11	2.24	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... LINOLEIC ACID, BUTYL ESTER 9,12-Octadecadienoyl chloride, ...	162049 203722 176696	000060-33-3 000000-00-0 007459-33-8	87 70 52	
6	26.14	4.31	C:\Database\WILEY275.L 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)... 9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI... 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	148348 150204 162049	056554-35-9 002423-10-1 000060-33-3	97 87 86	
7	26.45	39.17	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI... 9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$... 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	150204 150215 148348	002423-10-1 001577-52-2 056554-35-9	93 93 86	
8	26.58	5.84	C:\Database\PMW_TOX2.L Stearyl alcohol Cyclotetradecane Monoisooctyladipate	... ... ...	2356 2354 2360	000112-92-5 000295-17-0 004337-65-9	15 15 10
9	27.86	0.85	C:\Database\PMW_TOX2.L Fluvoxamine artifact-1 Paracetamol-M Cl-artifact AC	... ...	1816 2994	000000-00-0 000000-00-0	7 2

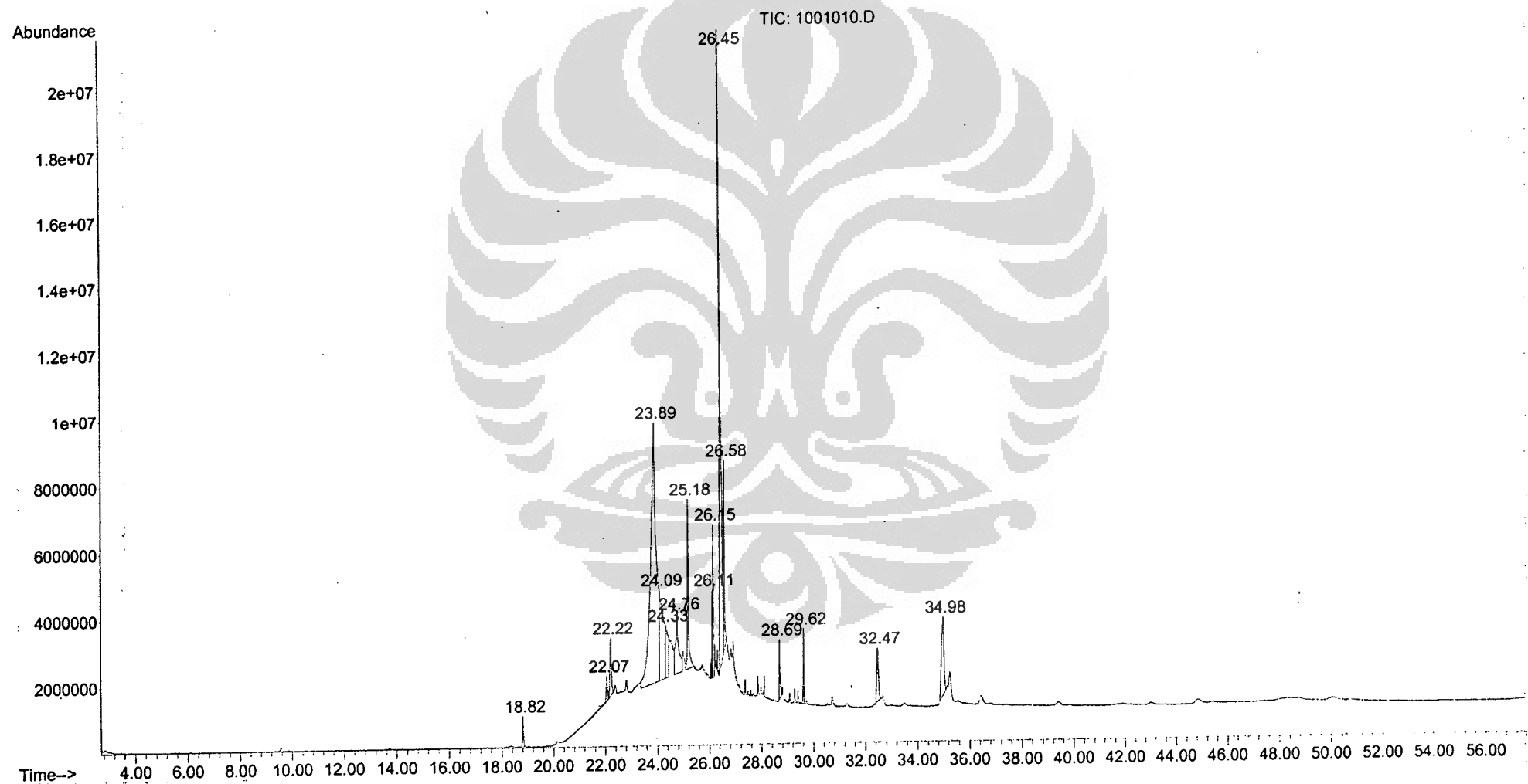
0	28.69	3.71	C:\Database\PMW_TOX2.L					
			Chlorfenvinphos-M/artifact	...	3170	000000-00-0	9	
			Oleic acid ME	...	2667	000112-62-9	2	
			Propiconazole artifact	...	3489	002234-16-4	1	
1	32.48	7.69	C:\Database\WILEY275.L					
			8,11-Eicosadienoic acid, methyl...		194550	056599-56-5	55	
			8,11-dimethyl-9,10-diphenyldicy...		194657	102860-09-3	50	
			10,13-Eicosadienoic acid, methy...		194549	030223-50-8	50	
12	35.01	20.49	C:\Database\PMW_TOX2.L					
			Oleic acid ME	...	2667	000112-62-9	9	
13	35.23	6.16	C:\Database\PMW_TOX2.L					
			No matches found					



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\1001010.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 21:24 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: C4  
Misc Info :  
Vial Number: 10



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\1001010.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 21:24 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: C4  
Misc Info :  
Vial Number: 10





Information from Data File:

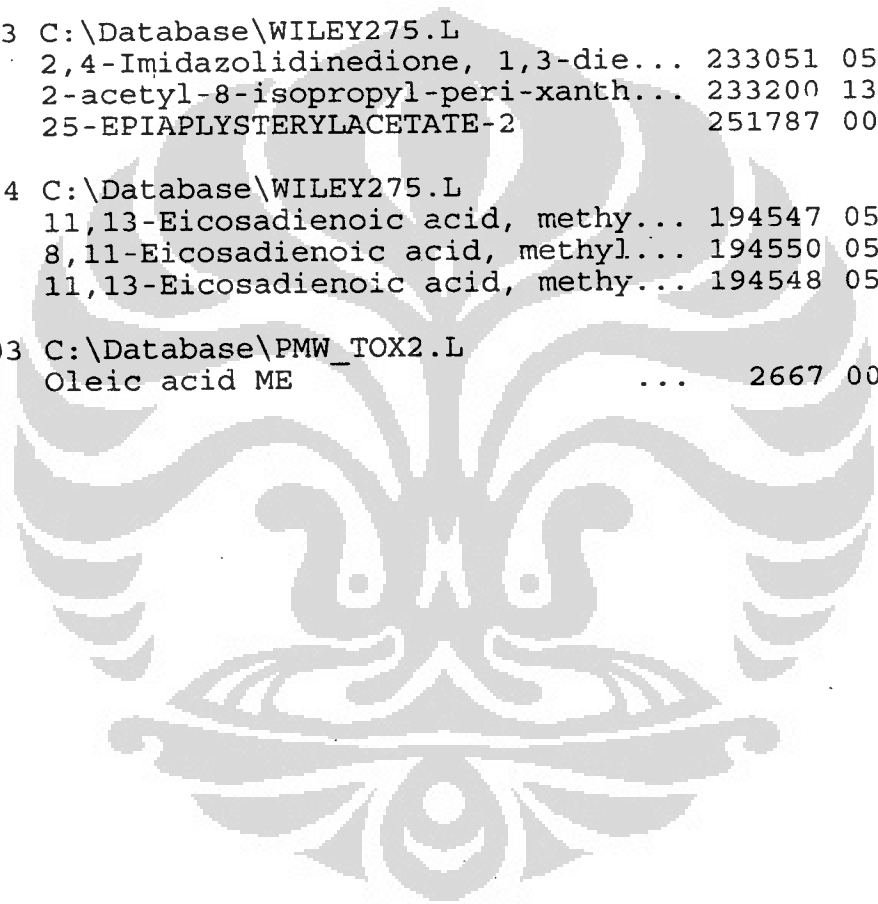
File: C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\1001010.D  
 Operator: TAZ  
 Date Acquired: 6 Jun 2008 21:24  
 Method File: MJARAK  
 Sample Name: C4  
 Misc Info:  
 Vial Number: 10

Search Libraries: C:\Database\WILEY275.L Minimum Quality: 50  
 C:\Database\IOC1.L Minimum Quality: 50  
 C:\Database\PMW\_TOX2.L

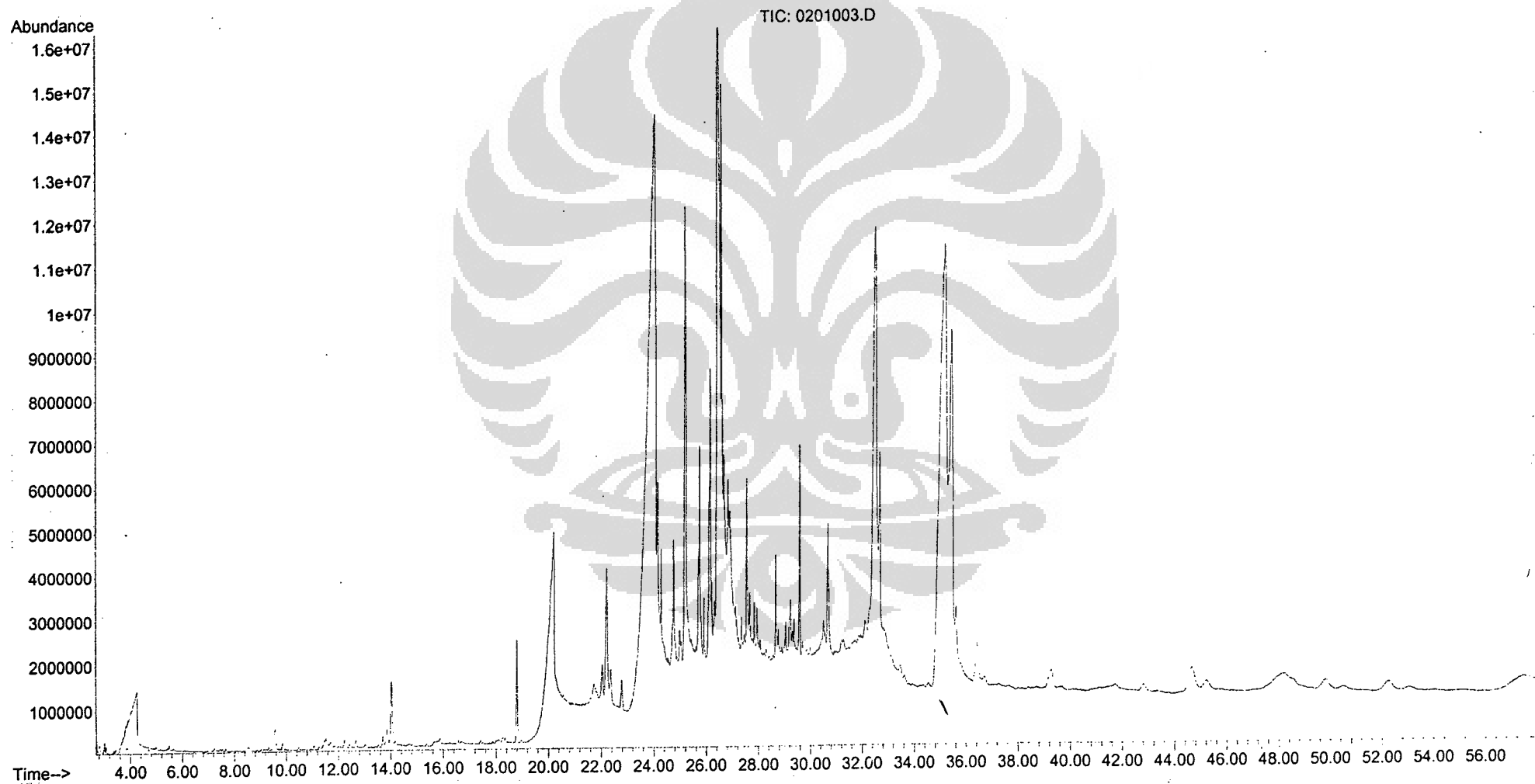
Unknown Spectrum: Apex  
 Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

Peak#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	18.82	0.78	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid, methyl ester...	153629	000112-39-0	98
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153624	000112-39-0	97
			METHYL HEXADECANOATE \$\$ METHYL ...	153678	000000-00-0	97
2	22.07	0.86	C:\Database\WILEY275.L 10,13-Octadecadienoic acid, met...	173628	056554-62-2	97
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	173650	000112-63-0	97
			11,14-Octadecadienoic acid, met...	173630	056554-61-1	96
3	22.22	2.13	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175233	000112-62-9	98
			METHYL 9-OCTADECENOATE \$\$ METHY...	175277	000000-00-0	98
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175230	000112-62-9	98
4	23.89	35.92	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	98
			HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163698	000000-00-0	97
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163702	000112-80-1	97
5	24.08	9.41	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163701	000112-80-1	97
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	97
			HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163698	000000-00-0	96
6	24.33	3.04	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163701	000112-80-1	97
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	97
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162047	000060-33-3	96
7	24.76	4.82	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163704	000112-80-1	98
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	95
			Cyclopropaneoctanal, 2-octyl- (...)	162189	056196-06-6	95
8	25.18	5.19	C:\Database\PMW_TOX2.L Stearyl alcohol	2356	000112-92-5	18
			Cyclotetradecane	2354	000295-17-0	14
			Sulpiride ME	3211	000000-00-0	11
9	26.11	1.54	C:\Database\WILEY275.L 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	95
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	214838	003443-84-3	93
			Hexadecadienoic acid, methyl es...	150034	029961-54-4	86

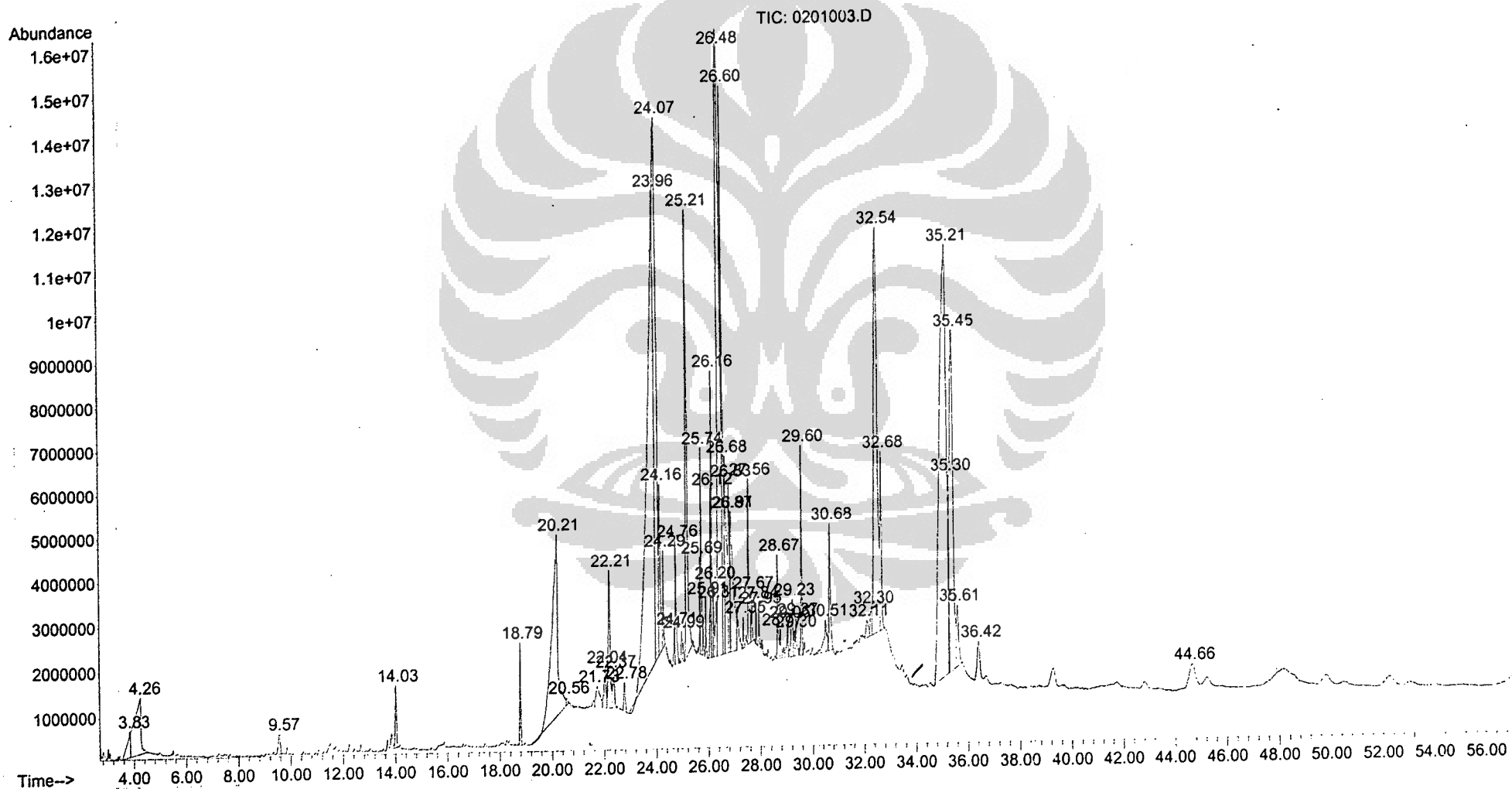
10	26.15	2.73	C:\Database\WILEY275.L 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	96
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	214828	003413-24-3	94
			Bicyclo[4.3.1]decan-10-one (CAS)	38437	020440-21-5	84
11	26.45	20.70	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI...	150204	002423-10-1	93
			9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	93
			9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$...	150215	001577-52-2	91
12	26.58	3.07	C:\Database\PMW_TOX2.L Stearyl alcohol	...	2356	000112-92-5 15
			Cyclotetradecane	...	2354	000295-17-0 15
			Mepivacaine-M (HO-) AC	...	1087	000000-00-0 10
13	28.69	1.22	C:\Database\PMW_TOX2.L Chlorfenvinphos-M/artifact	...	3170	000000-00-0 9
			Propiconazole artifact	...	3489	002234-16-4 2
14	29.62	1.43	C:\Database\WILEY275.L 2,4-Imidazolidinedione, 1,3-die...	233051	057326-25-7	94
			2-acetyl-8-isopropyl-peri-xanth...	233200	133376-93-9	90
			25-EPIAPLYSTERYLACETATE-2	251787	000000-00-0	81
15	32.46	2.14	C:\Database\WILEY275.L 11,13-Eicosadienoic acid, methy...	194547	056599-57-6	83
			8,11-Eicosadienoic acid, methyl...	194550	056599-56-5	53
			11,13-Eicosadienoic acid, methy...	194548	056599-57-6	53
16	34.99	5.03	C:\Database\PMW_TOX2.L Oleic acid ME	...	2667	000112-62-9 12



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080604-B\0201003.D  
Operator : ern  
Acquired : 4 Jun 2008 13:37 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: A1 (M.Jarak)  
Misc Info :  
Vial Number: 2



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080604-B\0201003.D  
 Operator : ern  
 Acquired : 4 Jun 2008 13:37 using AcqMethod MJARAK  
 Instrument : GC MS E  
 Sample Name: A1 (M.Jarak)  
 Misc Info :  
 Vial Number: 2



Information from Data File:

File: C:\MSDCHEM\1\DATA\080604-B\0201003.D  
 Operator: err.  
 Date Acquired: 4 Jun 2008 13:37  
 Method File: MJARAK  
 Sample Name: A1 (M.Jarak)  
 Misc Info:  
 Vial Number: 2

Search Libraries: C:\Database\WILEY275.L Minimum Quality: 100

Unknown Spectrum: Apex  
 Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	3.83	0.42	C:\Database\WILEY275.L Benzoic acid (CAS) \$\$ Retardex ...	15531	000065-85-0	97
			Benzoic acid (CAS) \$\$ Retardex ...	15538	000065-85-0	96
			Benzoic acid (CAS) \$\$ Retardex ...	15530	000065-85-0	91
2	4.25	1.92	C:\Database\WILEY275.L Benzoic acid (CAS) \$\$ Retardex ...	15531	000065-85-0	97
			Benzoic acid (CAS) \$\$ Retardex ...	15538	000065-85-0	96
			Benzoic acid (CAS) \$\$ Retardex ...	15527	000065-85-0	94
3	9.57	0.19	C:\Database\WILEY275.L 1-ETHYL-2-METHYL CYCLODODECANE ...	96268	022681-52-3	91
			1-Tridecene (CAS) \$\$ n-Tridec-1...	67376	002437-56-1	89
			7-Heptadecane, 1-chloro- (CAS) ...	155213	056554-78-0	68
4	14.02	0.41	C:\Database\WILEY275.L 4A,5,8,8A.BETA.-TETRAHYDRO-2,4,...	88787	063780-09-6	87
			2-methyl-3-(p-methoxyphenyl)-2-...	60952	013399-33-2	43
			(Z)-(2-Hydroxyethyliden-1-yl)-7...	88611	125131-10-4	43
5	18.79	0.54	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid, methyl ester...	153629	000112-39-0	99
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153610	000112-39-0	98
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153611	000112-39-0	97
6	20.21	5.44	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	99
7	20.56	0.04	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	98
			PALMITIC ACID \$\$ HEXADECANOIC ACID	141082	000000-00-0	98
8	21.73	0.44	C:\Database\WILEY275.L Thiosulfuric acid (H2S2O3), S-(...	42909	002937-53-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141008	000057-10-3	95
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	95
9	22.04	0.41	C:\Database\WILEY275.L 8,11-Octadecadienoic acid, meth...	173618	056599-58-7	97
			10,13-Octadecadienoic acid, met...	173628	056554-62-2	97
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	173651	000112-63-0	97
10	22.21	1.34	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175223	000112-62-9	99
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175230	000112-62-9	99
			METHYL 9-OCTADECENOATE \$\$ METHY...	175277	000000-00-0	99

11	22.36	0.32	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 10,13-Octadecadienoic acid, met...	173650 173652 173628	000112-63-0 000112-63-0 056554-62-2	99 99 99
12	22.79	0.20	C:\Database\WILEY275.L Octadecanoic acid, methyl ester... Octadecanoic acid, methyl ester... Octadecanoic acid, methyl ester...	176801 176789 176794	000112-61-8 000112-61-8 000112-61-8	96 95 95
13	23.97	15.01	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)... 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	162047 148348 163703	000060-33-3 056554-35-9 000112-80-1	97 96 95
14	24.07	6.70	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163703 163706 163698	000112-80-1 000112-80-1 000000-00-0	97 96 95
15	24.16	1.29	C:\Database\WILEY275.L Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea...	165444 165441 165445	000057-11-4 000057-11-4 000057-11-4	99 98 97
16	24.29	0.37	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanamide (CAS) \$\$ Amide 1... 9-Octadecenamide, (Z)- (CAS) \$\$... 9-Octadecenamide, (Z)- (CAS) \$\$...	139963 162712 162711	000629-54-9 000301-02-0 000301-02-0	93 86 78
17	24.71	0.17	C:\Database\WILEY275.L Linoleic acid 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 12-Octadecenoic acid, methyl es...	162061 162049 175250	000060-33-3 000060-33-3 056554-46-2	92 92 55
18	24.76	0.68	C:\Database\WILEY275.L CYCLOEICOSANE 10-UNDECENYL CHLORIDE 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	162226 86675 163705	000000-00-0 000000-00-0 000112-80-1	46 41 38
19	24.98	0.15	C:\Database\WILEY275.L Cyclopentadecanone, 2-hydroxy- Cyclopropanoethanal, 2-octyl- (... 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	126229 162189 148348	004727-18-8 056196-06-6 056554-35-9	96 93 92
20	25.21	3.61	C:\Database\WILEY275.L 2-(METHYL-D3)-CYCLONONANONE \$\$ ... Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm... Undecanedioic acid (CAS) \$\$ 1,9...	40835 141011 101095	032454-54-9 000057-10-3 001852-04-6	38 35 27
21	25.69	0.37	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... ETHYL LINOLEATE 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	162047 184552 148348	000060-33-3 000544-35-4 056554-35-9	90 87 83
22	25.74	0.87	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenamide, (Z)- (CAS) \$\$... 9-Octadecenamide, (Z)- (CAS) \$\$... Cyclopentadecanone, 2-methyl- (...	162710 162714 124491	000301-02-0 000301-02-0 052914-66-6	99 50 50
23	25.91	0.20	C:\Database\WILEY275.L Octadecanamide (CAS) \$\$ Stearam... 9-Octadecenamide, (Z)- (CAS) \$\$... 9-Octadecenamide, (Z)- (CAS) \$\$...	164472 162712 162711	000124-26-5 000301-02-0 000301-02-0	89 86 86

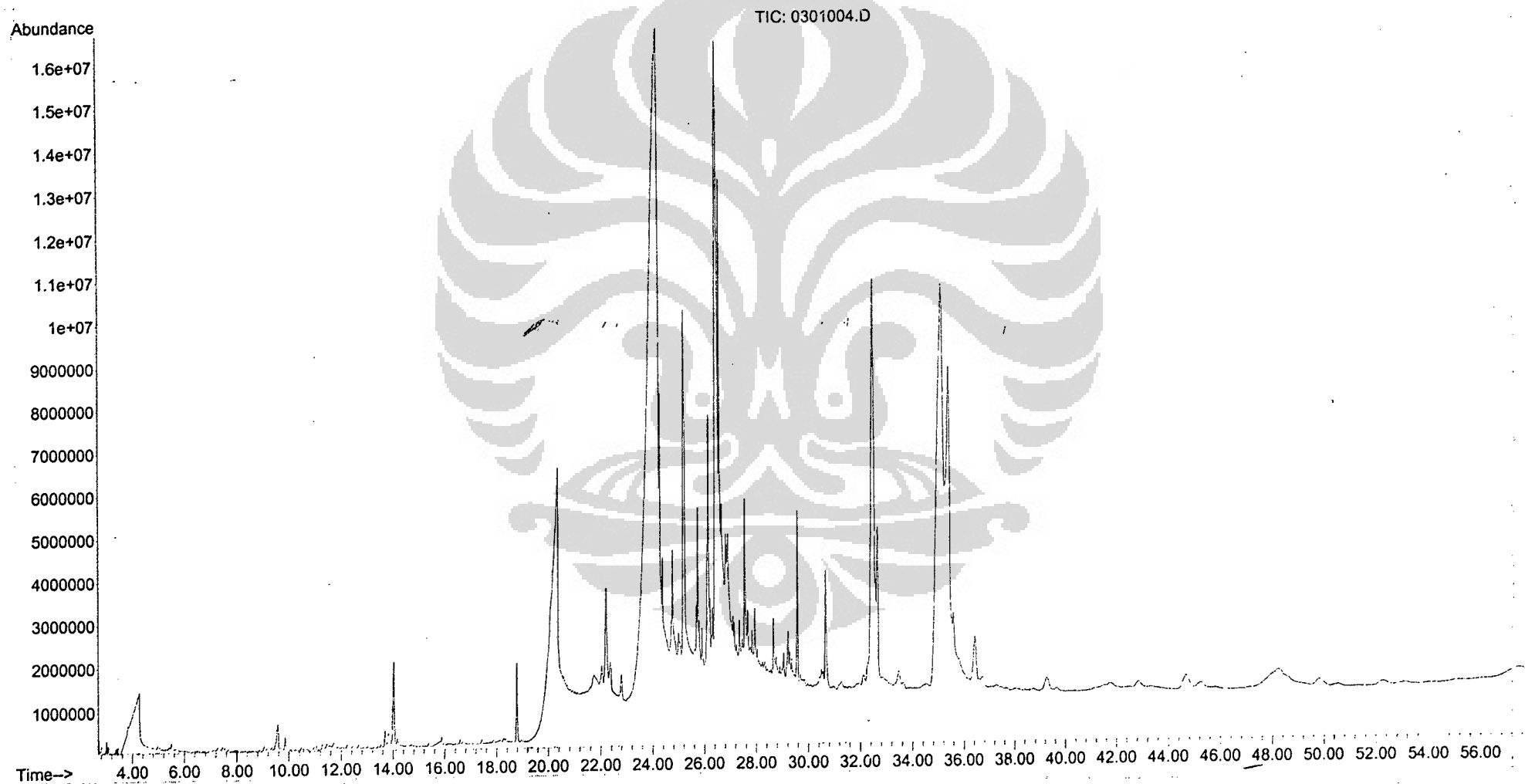
24	26.11	0.80	C:\Database\WILEY275.L				
			8-Octadecenoic acid, methyl est...	175221	026528-50-7	87	
			8-Octadecenoic acid, methyl est...	175222	026528-50-7	33	
			Hexadecadienoic acid, methyl es...	150034	029961-54-4	78	
25	26.16	1.24	C:\Database\WILEY275.L				
			9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$...	150215	001577-52-2	96	
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	214838	003443-84-3	90	
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	197040	004500-01-0	81	
26	26.20	0.30	C:\Database\WILEY275.L				
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	214838	003443-84-3	93	
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	213822	003443-82-1	86	
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	213820	002277-28-3	70	
27	26.31	0.45	C:\Database\WILEY275.L				
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163704	000112-80-1	90	
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	62	
			Cyclopentadecanone, 2-hydroxy-	126229	004727-18-8	56	
28	26.48	9.84	C:\Database\WILEY275.L				
			9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI...	150204	002423-10-1	93	
			9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$...	150215	001577-52-2	91	
			9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	84	
29	26.60	3.13	C:\Database\WILEY275.L				
			Dodecanoic acid (CAS) \$\$ Lauric...	85063	000143-07-7	38	
			1,2-Cyclohexanediol (CAS) \$\$ Br...	13227	000931-17-9	35	
			D-GULOPYRANOSIDE, 2,3:4,6-DI-O-...	152789	000000-00-0	25	
30	26.68	2.01	C:\Database\WILEY275.L				
			9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI...	150204	002423-10-1	93	
			Cyclopentadecanone, 2-hydroxy-	126229	004727-18-8	90	
			9-Oxabicyclo[6.1.0]nonane (CAS)...	18090	000286-62-4	55	
31	26.83	1.08	C:\Database\WILEY275.L				
			13-Hexacosyne (CAS) \$\$ HEXACOSY...	218292	034291-68-4	86	
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162047	000060-33-3	86	
			1,13-Tetradecadiene (CAS)	78993	021964-49-8	64	
32	26.86	0.43	C:\Database\WILEY275.L				
			9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$...	150215	001577-52-2	99	
			9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	98	
			Linoleic acid	162061	000060-33-3	95	
33	26.91	1.84	C:\Database\WILEY275.L				
			LINOLEIC ACID, BUTYL ESTER	203722	000000-00-0	76	
			9,12-Octadecadienoyl chloride, ...	176696	007459-33-8	62	
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162049	000060-33-3	60	
34	27.35	0.12	C:\Database\WILEY275.L				
			(R)-(-)-14-Methyl-8-hexadecyn-1-ol	137566	064566-18-3	90	
			9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	90	
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162049	000060-33-3	56	
35	27.56	0.91	C:\Database\WILEY275.L				
			Benzene, 1,3,5-trimethyl- (CAS)...	14998	000108-67-8	35	
			Benzene, 1,3,5-trimethyl- (CAS)...	15004	000108-67-8	35	
			Benzene, 1,3,5-trimethyl- (CAS)...	15002	000108-67-8	35	
36	27.67	0.21	C:\Database\WILEY275.L				
			Octadecanophenone \$\$ 1-Octadeca...	208433	006786-36-3	50	
			3-ETHYLTOLUENE	15081	000000-00-0	46	
			Benzene, 1-ethyl-3-methyl- (CAS)...	14956	000620-14-4	46	

37	27.84	0.10	C:\Database\WILEY275.L tricarbonyl[1.beta.-cyano-1.alp... Tricarbonyl(1-4-.eta.-6-cyanoocy... 2-Methyl-5-methylthio-4-nitroim...	165831 141363 57903	094570-59-9 116852-14-3 090521-98-5	50 40 30
38	27.95	0.15	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI... 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd... Oleic acid, 3-hydroxypropyl est...	150204 214838 205978	002423-10-1 003443-84-3 000821-17-0	56 52 50
39	28.67	0.48	C:\Database\WILEY275.L 2,4-dimethyl-6-(2-furyl)pyridine 1,8-Naphthyridin-2-amine, 5,7-d... 1H-Pyrrole-2,5-dione, 1-phenyl-...	58186 58126 58115	000000-00-0 039565-07-6 000941-69-5	30 30 27
40	28.77	0.18	C:\Database\WILEY275.L 5,5'-bis(acetyl)-3,3'-biisoxazo... 1-Propanesulfonic acid, methyl ... 5,6-DIHYDRO-6-METHYL-2H-PYRAN-2...	104839 25826 10500	111080-82-1 002697-50-9 000108-54-3	11 10 9
41	29.05	0.25	C:\Database\WILEY275.L Bikaverin \$\$ 6,11-Dihydroxy-3,8... Bikaverin \$\$ 6,11-Dihydroxy-3,8... Octadecanoic acid, 3-[(1-oxohex...	227057 227056 274500	033390-21-5 033390-21-5 056554-26-8	60 60 22
42	29.24	0.48	C:\Database\WILEY275.L Stigmasta-5,22-dien-3-ol, aceta... BRUCINE Strychnidin-10-one, 2,3-dimetho...	251255 232424 232417	054482-54-1 000000-00-0 000357-57-3	89 49 43
43	29.30	0.15	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecene, 1-[3-(octadecylox... 9-Octadecenoic acid, 2-(octadec... Octadecanoic acid, 3-[(1-oxohex...	267374 267368 274500	017367-39-4 056599-42-9 056554-26-8	30 30 18
44	29.37	0.23	C:\Database\WILEY275.L ERGOSTA-4,6,22-TRIEN-3ALPHA-OL ... ERGOSTA-4,6,22-TRIEN-3BETA-OL \$... (24R,25S)-APLYSTERYLACETATE	233337 233340 251789	096790-32-8 034026-93-2 000000-00-0	47 35 35
45	29.59	0.89	C:\Database\WILEY275.L 25-EPIAPLYSTERYLACETATE-2 (24R,25S)-APLYSTERYLACETATE 25-EPIAPLYSTERYLACETATE-1	251787 251789 251788	000000-00-0 000000-00-0 000000-00-0	81 81 81
46	30.51	0.38	C:\Database\WILEY275.L Octadecanoic acid, 3-[(1-oxohex... Octadecanoic acid, 2-[(1-oxohex... Hexadecanoic acid, 2-[(1-oxotet...	274500 274754 274183	056554-26-8 002177-97-1 056599-89-4	35 30 30
47	30.68	0.88	C:\Database\WILEY275.L 2-(2-NITROPHENYL) BENZIMIDAZOLE ... Heptamethyl-3-phenyl-1,4-cycloh... Perliton Pink 3B \$\$ 9,10-Anthra...	124877 139472 124955	002208-58-4 000000-00-0 000116-85-8	46 46 43
48	32.12	0.22	C:\Database\WILEY275.L Octadecanoic acid, 2-[(1-oxodod... Octadecanoic acid, 1-[[[(1-oxohe... Octadecanoic acid, 2-[(1-oxohex...	274499 274914 274755	056183-45-0 002177-99-3 002177-97-1	16 10 10
49	32.30	0.22	C:\Database\WILEY275.L Octadecanoic acid, 2-[(1-oxodod... Octadecanoic acid, 1-[[[(1-oxohe... Octadecanoic acid, 2-[(1-oxohex...	274499 274914 274755	056183-45-0 002177-99-3 002177-97-1	14 10 10

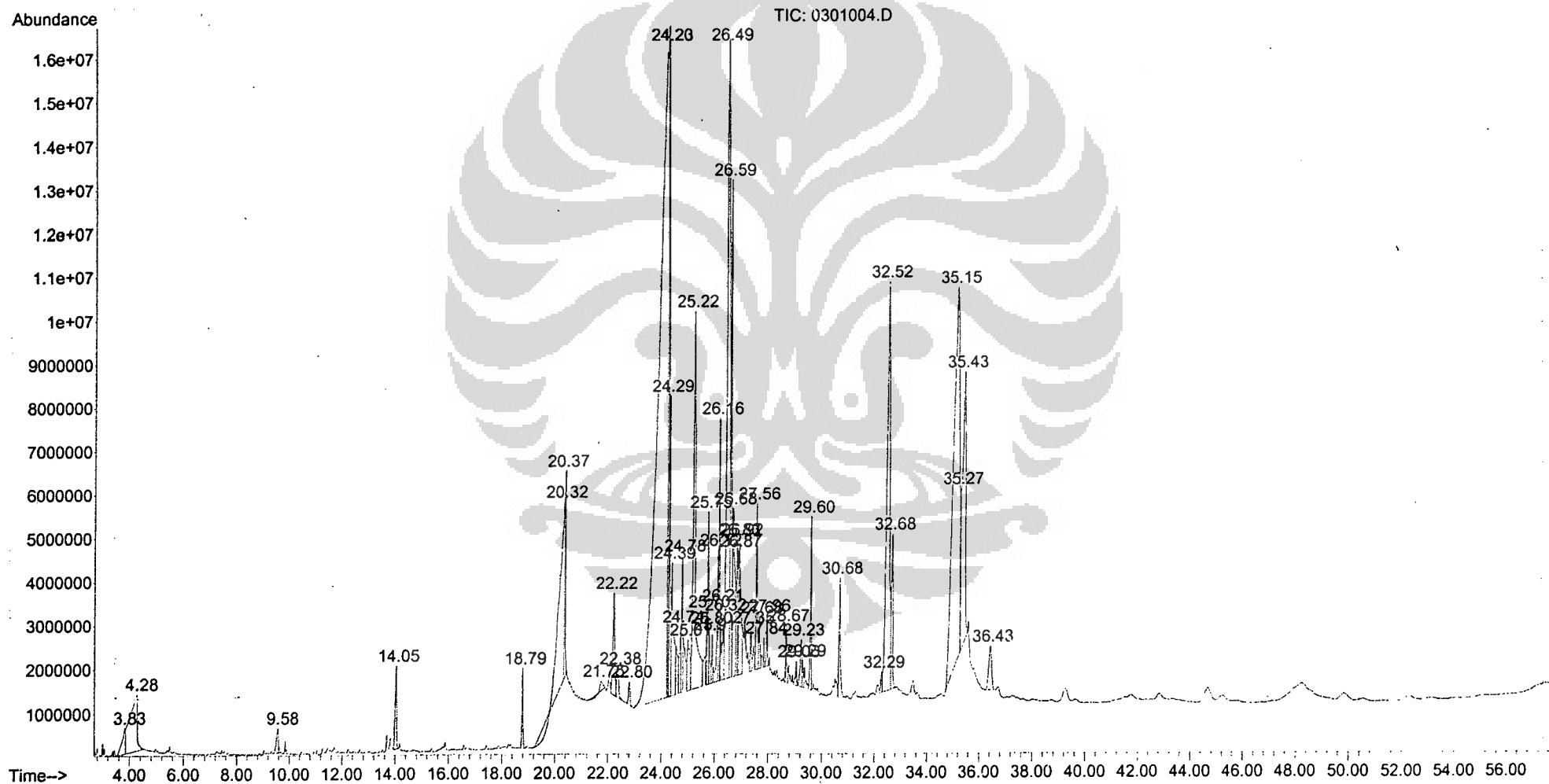


0	32.53	7.14	C:\Database\WILEY275.L (t-butyl) (isityl) di [phosphino] s... 213577 134133-17-8 64 8,11-dimethyl-9,10-diphenyldicy... 194657 102350-09-3 53 Methyl 8-Nitro-4,5,7-trimethoxy... 193504 077729-58-9 53
1	32.68	1.26	C:\Database\WILEY275.L Octadecanoic acid, ethenyl este... 185933 000111-63-7 62 4H-3-(p-methylanilino)1-benzoth... 164246 116884-81-2 53 13H-Dibenzo[a,i]carbazole \$\$ 1, ... 150816 000239-64-5 42
2	35.21	15.00	C:\Database\WILEY275.L rel-(1R,4aR,8aR,5S)-1,4-dimethy... 148818 133116-13-9 60 Oxonin, 4,5,6,7-tetrahydro-, (Z... 16755 017123-56-7 27 Z,Z-6,26-Pentatriacontadien-2-one 259960 000000-00-0 25
3	35.30	0.75	C:\Database\WILEY275.L rel-(1R,4aR,8aR,5S)-1,4-dimethy... 148818 133116-13-9 78 Oxonin, 4,5,6,7-tetrahydro-, (Z... 16755 017123-56-7 50 Z,Z-6,26-Pentatriacontadien-2-one 259960 000000-00-0 35
4	35.46	5.97	C:\Database\WILEY275.L 5,6-dihydro-7,8-dimethoxy-5-met... 211010 006880-91-7 42 5,6-Dihydro-10,11-dimethoxy-1H, ... 210977 064938-98-3 27 4'-Cyano-4-heptyl-2',3',5',6'-t... 210981 131894-89-8 16
5	35.61	0.65	C:\Database\WILEY275.L 4H-3-(p-methylanilino)1-benzoth... 164246 116884-81-2 72 Ether, bis(p-tert-butylphenyl) ... 163855 024085-65-2 49 13H-Dibenzo[a,i]carbazole \$\$ 1, ... 150816 000239-64-5 49
6	36.42	0.50	C:\Database\WILEY275.L 1-(4'-pentenyl)-1,2-epoxycyclop... 38055 119681-08-2 72 Oxonin, 4,5,6,7-tetrahydro-, (Z... 16755 017123-56-7 53 12-Nitro-15-hexadecanolide \$\$ O... 177374 095404-80-1 46
7	44.66	0.68	C:\Database\WILEY275.L ELAIDINIC ACID, ISOPROPYLESTER 195829 000000-00-0 70 20-CARBONITRILE-3-METHOXY-19-NO... 195006 062623-54-5 50 7,10-dihydro-6,11-dihydroxy-3-m... 195511 078045-06-4 45

File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080604-B\0301004.D  
Operator : ern  
Acquired : 4 Jun 2008 14:38 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: A2 (M.Jarak)  
Misc Info :  
Vial Number: 3



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080604-B\0301004.D  
Operator : ern  
Acquired : 4 Jun 2008 14:38 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: A2 (M.Jarak)  
Misc Info :  
Vial Number: 3



Information from Data File:

File: C:\MSDCHEM\1\DATA\080604-B\0301004.D  
 Operator: ern  
 Date Acquired: 4 Jun 2008 14:38  
 Method File: MJARAK  
 Sample Name: A2 (M.Jarak)  
 Misc Info:  
 Vial Number: 3

Search Libraries: C:\Database\WILEY275.L Minimum Quality: 100

Unknown Spectrum: Apex

Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

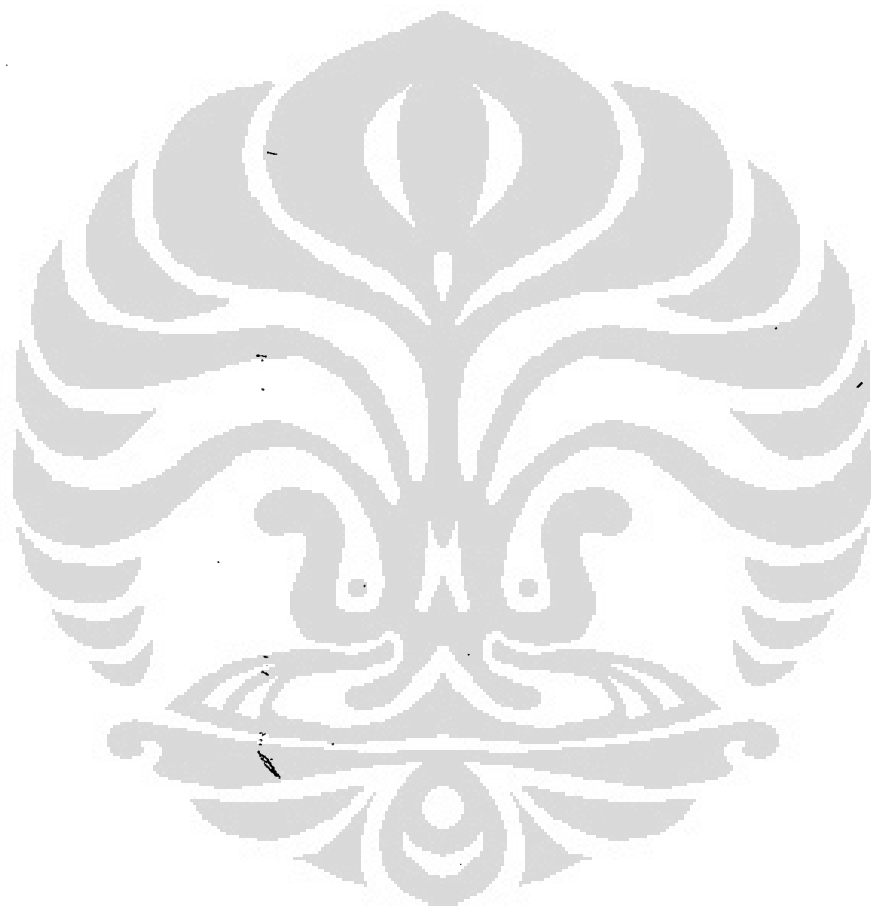
k#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	3.82	0.40	C:\Database\WILEY275.L Benzoic acid (CAS) \$\$ Retardex ...	15531	000065-85-0	95
			Benzoic acid (CAS) \$\$ Retardex ...	15538	000065-85-0	94
			Benzoic acid (CAS) \$\$ Retardex ...	15536	000065-85-0	90
2	4.28	2.00	C:\Database\WILEY275.L Benzoic acid (CAS) \$\$ Retardex ...	15538	000065-85-0	96
			Benzoic acid (CAS) \$\$ Retardex ...	15531	000065-85-0	95
			Benzoic acid (CAS) \$\$ Retardex ...	15527	000065-85-0	94
3	9.58	0.22	C:\Database\WILEY275.L Cyclododecane (CAS)	53904	000294-62-2	94
			1-ETHYL-2-METHYL CYCLODODECANE ...	96268	022681-52-3	93
			1-Tridecene (CAS) \$\$ n-Tridec-1...	67375	002437-56-1	92
4	14.04	0.56	C:\Database\WILEY275.L 4A,5,8,8A.BETA.-TETRAHYDRO-2,4,...	88787	063780-09-6	87
			(Z)-(2-Hydroxyethyliden-1-yl)-7...	88611	125131-10-4	45
			2-methyl-3-(p-methoxyphenyl)-2-...	60952	013399-33-2	43
5	18.79	0.41	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid, methyl ester...	153610	000112-39-0	99
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153629	000112-39-0	99
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153622	000112-39-0	98
6	20.32	3.77	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	99
7	20.38	1.13	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
8	21.74	0.09	C:\Database\WILEY275.L Thiosulfuric acid (H2S2O3), S-(...	42909	002937-53-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	96
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	95
9	22.22	0.93	C:\Database\WILEY275.L METHYL 9-OCTADECENOATE \$\$ METHY...	175277	000000-00-0	99
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175230	000112-62-9	99
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175233	000112-62-9	98
10	22.37	0.28	C:\Database\WILEY275.L 10,13-Octadecadienoic acid, met...	173628	056554-62-2	95
			11,14-Octadecadienoic acid, met...	173630	056554-61-1	95
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	93

11	22.80	0.16	C:\Database\WILEY275.L Heptadecanoic acid, 14-methyl-, ... 176819 002490-23-5 94 Octadecanoic acid, methyl ester... 176789 000112-61-3 93 Octadecanoic acid, methyl ester... 176794 000112-61-8 93
12	24.21	29.58	C:\Database\WILEY275.L HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) 163698 000000-00-0 97 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163703 000112-80-1 97 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163706 000112-80-1 96
13	24.23	3.08	C:\Database\WILEY275.L HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) 163698 000000-00-0 97 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163706 000112-80-1 96 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163703 000112-80-1 96
14	24.29	1.82	C:\Database\WILEY275.L Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165444 000057-11-4 99 Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165441 000057-11-4 98 Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165442 000057-11-4 98
15	24.39	1.32	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163701 000112-80-1 90 9-Octadecenamamide, (Z)- (CAS) \$\$... 162713 000301-02-0 64 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163705 000112-80-1 53
16	24.73	0.45	C:\Database\WILEY275.L Linoleic acid 162061 000060-33-3 94 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z) ... 162049 000060-33-3 93 HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) 163698 000000-00-0 64
17	24.78	0.74	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-1-... 199572 023470-00-0 43 HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) 163698 000000-00-0 40 Oleic Acid 163725 000112-80-1 38
18	25.01	0.66	C:\Database\WILEY275.L 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS) ... 148348 056554-35-9 95 Cyclopentadecanone, 2-hydroxy- 126229 004727-18-8 95 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z) ... 162047 000060-33-3 90
19	25.22	4.42	C:\Database\WILEY275.L 2-(METHYL-D3)-CYCLONONANONE \$\$ ... 40835 032454-54-9 41 Undecanedioic acid (CAS) \$\$ 1... 101095 001852-04-6 27 Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm... 141011 000057-10-3 18
20	25.70	0.29	C:\Database\WILEY275.L 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS) ... 148348 056554-35-9 95 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z) ... 162047 000060-33-3 95 9-Oxabicyclo[6.1.0]nonane (CAS) ... 18091 000286-62-4 87
21	25.75	0.68	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenamamide, (Z)- (CAS) \$\$... 162710 000301-02-0 99 9-Octadecenamamide, (Z)- (CAS) \$\$... 162714 000301-02-0 50 Cyclopentadecanone, 2-methyl- (... 124491 052914-66-6 46
22	25.80	0.32	C:\Database\WILEY275.L Cyclopropanoic acid, 2-octyl- (... 162189 056196-06-6 99 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163700 000112-80-1 96 HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) 163698 000000-00-0 95
23	25.91	0.21	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenamamide, (Z)- (CAS) \$\$... 162713 000301-02-0 70 Octadecanamamide (CAS) \$\$ Stearam... 164472 000124-26-5 58 Heptanamamide, 4-ethyl-5-methyl- ... 56382 054789-40-1 50

24	25.12	0.68	C:\Database\WILEY275.L 8-Octadecenoic acid, methyl est... 175222 026528-50-7 89 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 162049 000060-33-3 87 8-Octadecenoic acid, methyl est... 175221 026528-50-7 78
25	25.17	1.18	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$... 150215 001577-52-2 96 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd... 214838 003443-84-3 90 3-Phenyl-1,4(E)-dodecadiene 122441 000000-00-0 84
26	25.21	0.31	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd... 214838 003443-84-3 97 9,12-Octadecadienoyl chloride, ... 176696 007459-33-8 87 13-Tetradecenal 96177 085896-31-7 86
27	25.32	0.51	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163704 000112-80-1 93 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163703 000112-80-1 74 Cyclopentadecanone, 2-hydroxy- 126229 004727-18-8 53
28	26.48	8.21	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI... 150204 002423-10-1 93 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)... 148348 056554-35-9 84 13-Tetradecenal 96177 085896-31-7 70
29	26.60	2.56'	C:\Database\WILEY275.L 12-Cyano-15-pentadecanolide \$\$ ... 148822 112405-38-6 27 Dodecanoic acid (CAS) \$\$ Lauric... 85063 000143-07-7 25 D-GULOPYRANOSIDE, 2,3:4,6-DI-O-... 152789 000000-00-0 25
30	26.68	1.76	C:\Database\WILEY275.L LINOLEIC ACID, BUTYL ESTER 203722 000000-00-0 91 9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI... 150204 002423-10-1 56 13-Tetradecenal 96177 085896-31-7 41
31	26.83	0.83	C:\Database\WILEY275.L 11-Hexacosyne (CAS) \$\$ HEXACOSY... 218293 034291-69-5 86 9-Oxabicyclo[6.1.0]nonane (CAS)... 18090 000286-62-4 81 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 162047 000060-33-3 78
32	26.87	0.48	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$... 150215 001577-52-2 97 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)... 148348 056554-35-9 96 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 162049 000060-33-3 95
33	26.91	1.27	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 162049 000060-33-3 90 Linoleic acid 162061 000060-33-3 60 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 213820 002277-28-3 58
34	27.35	0.22	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163704 000112-80-1 59 1,2-OXABOROLANE, 2-ETHYL-3,4-DI... 87088 000000-00-0 35 Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro... 32892 001559-81-5 35
35	27.56	0.97	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd... 214838 003443-84-3 93 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd... 197040 004500-01-0 43 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2,3-d... 214835 000111-03-5 20
36	27.67	0.29	C:\Database\WILEY275.L (S) - (+) -DIMETHYL(METHYL(1-PHENY... 79542 000000-00-0 38 Benzoic acid, 2-ethoxy- \$\$ Benz... 50714 000134-11-2 38 Azocine, 2-methoxy- (CAS) \$\$ 1-... 23692 020205-50-9 35

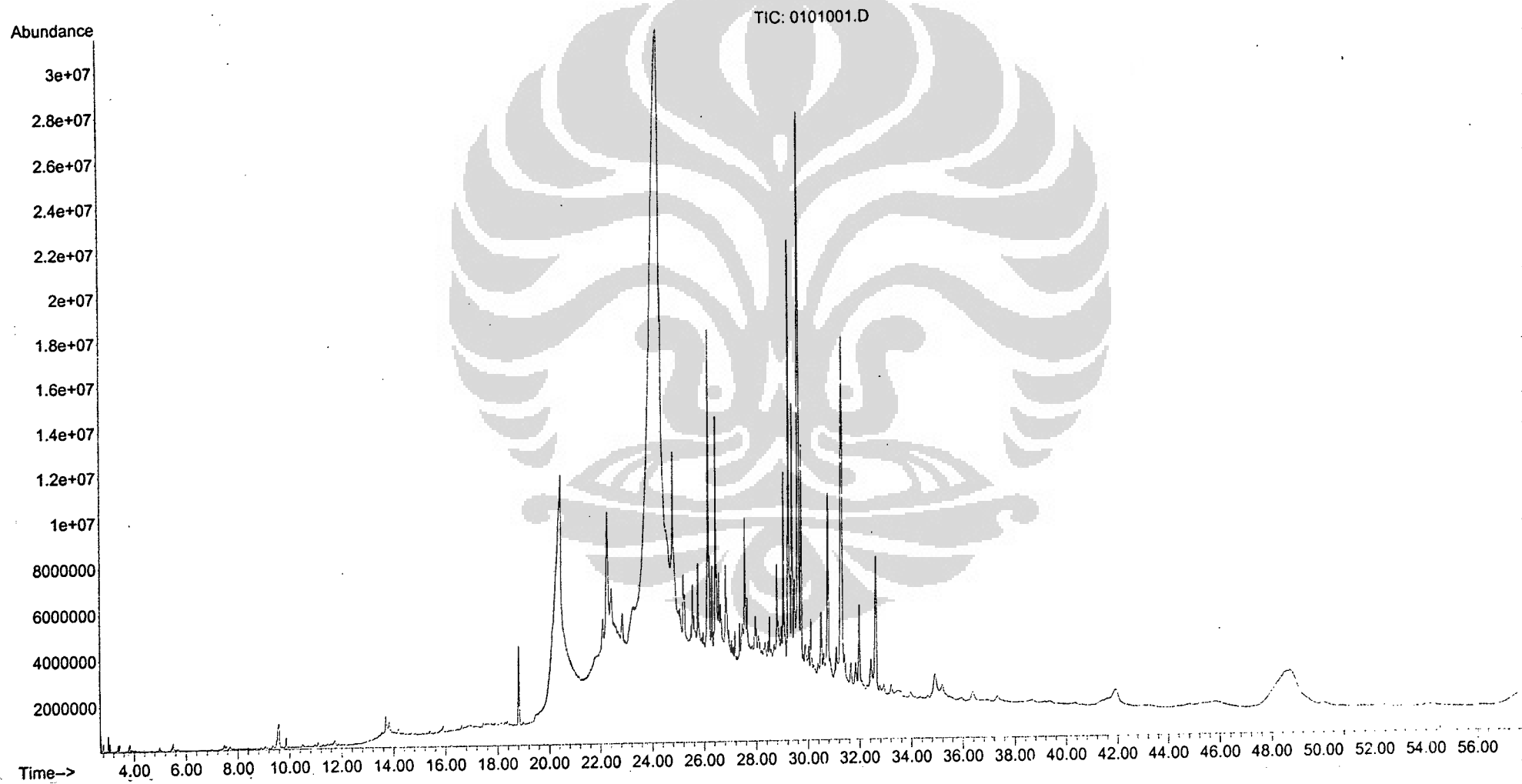
7	27.84	0.10	C:\Database\WILEY275.L tricarbonyl[1.beta.-cyano-1.alp... 2(5H)-Furanone, 5-(phenylimino)... 3-AMINO BENZENE SULFONIC ACID	165831 58084 57936	094570-59-9 019990-26-2 000000-00-0	43 30 18
8	27.95	0.23	C:\Database\WILEY275.L Oleic acid, 3-hydroxypropyl est... 13-Tetradecenal 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2,3-d...	205978 96177 214835	000821-17-0 085896-31-7 000111-03-5	72 53 52
9	28.67	0.28	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd... (Z,Z)-3,13-octadecadien-1-ol 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	214838 150220 197040	003443-84-3 000000-00-0 004500-01-0	50 45 30
10	29.06	0.15	C:\Database\WILEY275.L 9,11-Diphenylcyclopenta[1]phena... cholest-5-en-22-yn-3.beta.-ol \$... Austrobailignan-2 \$\$ Furo[3',4'...	227424 227407 227098	000000-00-0 112468-52-7 055890-20-5	50 47 35
11	29.23	0.34	C:\Database\WILEY275.L 1-(4'-pentenyl)-1,2-epoxycyclop... 5,5'-bis(acetyl)-3,3'-biisoxazo... Bicyclo[5.1.0]octane, 8-(1-meth...	38055 104839 36243	119681-08-2 111080-82-1 054166-47-1	47 38 32
12	29.30	0.15	C:\Database\WILEY275.L HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2,3-d... DI-(9-OCTADECENOYL)-GLYCEROL	163698 214835 269900	000000-00-0 000111-03-5 000000-00-0	56 55 52
13	29.59	0.73	C:\Database\WILEY275.L (24R,25S)-APLYSTERYLACETATE 2,8-diisopropyl-peri-xanthenoxa... 2-acetyl-8-isopropyl-peri-xanth...	251789 233230 233200	000000-00-0 133376-91-7 133376-93-9	90 90 90
14	30.68	0.78	C:\Database\WILEY275.L 1-Mercapto-2-heptadecanone 1-Mercapto-2-heptadecanone Ochratoxin A \$\$ L-Phenylalanine...	167042 167041 235990	076078-79-0 076078-79-0 000303-47-9	50 50 47
15	32.29	0.13	C:\Database\WILEY275.L OLEIC ACID, PROPYL ESTER 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	195830 162049 163698	000000-00-0 000060-33-3 000000-00-0	87 55 51
16	32.52	6.34	C:\Database\WILEY275.L 8,11-dimethyl-9,10-diphenyldicy... Methyl 8-Nitro-4,5,7-trimethoxy... N-propyl-2,5-bis(p-methoxypheny...	194657 193504 193738	102860-09-3 077729-58-9 127839-56-9	59 59 38
17	32.67	1.11	C:\Database\WILEY275.L 4H-3-(p-methylanilino)1-benzoth... Octadecanoic acid, ethenyl este... 18-Pentatriacontanone (CAS) \$\$ ...	164246 185933 260476	116884-81-2 000111-63-7 000504-53-0	78 49 27
18	35.15	11.31	C:\Database\WILEY275.L 1,22-Docosanediol 1-(2'-thienyl)-3-(2'-thienylmet... 9-Octadecenoic acid (Z)-, 9-hex...	207205 209848 260227	022513-81-1 129137-73-1 022393-99-3	35 35 32
19	35.27	0.61	C:\Database\WILEY275.L rel-(1R,4aR,8aR,5S)-1,4-dimethy... Oxonin, 4,5,6,7-tetrahydro-, (Z... 7-13C-METHYLENE-CYCLOHEXANE	148818 16755 5297	133116-13-9 017123-56-7 033717-96-3	53 50 33

35.43 4.32 C:\Database\WILEY275.L  
 5,6-dihydro-7,8-dimethoxy-5-met... 211010 006880-91-7 42  
 Z,Z-6,26-Pentatriacontadien-2-one 259960 000000-00-0 20  
 3-Carboxamido(14H) (E)-nor-eburn... 184976 000000-00-0 15  
 36.43 0.62 C:\Database\WILEY275.L  
 1-(4'-pentenyl)-1,2-epoxycyclop... 38055 119681-08-2 72  
 Oxonin, 4,5,6,7-tetrahydro-, (Z... 16755 017123-56-7 59  
 (1r\*,2r\*,1'r\*)-2-(2'-oxocyclohe... 111230 108444-92-4 40





File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0101001.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 12:07 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: A3  
Misc Info :  
Vial Number: 1





Information from Data File:

File: C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0101001.D  
 Operator: TAZ  
 Date Acquired: 6 Jun 2008 12:07  
 Method File: MJARAK  
 Sample Name: A3  
 Misc Info:  
 Vial Number: 1

Search Libraries: C:\Database\WILEY275.L Minimum Quality: 100

Unknown Spectrum: Apex

Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	9.59	0.24	C:\Database\WILEY275.L 1-Tridecene (CAS) \$\$ n-Tridec-1...	67375	002437-56-1	90
			1-ETHYL-2-METHYL CYCLODODECANE ...	96268	022681-52-3	89
			1-Tetradecanol (CAS) \$\$ Alfol 1...	100051	000112-72-1	87
2	18.82	0.47	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid, methyl ester...	153609	000112-39-0	99
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153629	000112-39-0	98
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153610	000112-39-0	98
3	20.46	7.61	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141005	000057-10-3	99
4	20.56	1.41	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	99
5	20.93	0.06	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	98
6	21.79	0.27	C:\Database\WILEY275.L 2,2-DIDEUTERO OCTADECANAL	151950	056555-07-8	96
			9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	95
			9,12-Octadecadienoic acid, meth...	173624	002566-97-4	94
7	22.10	0.79	C:\Database\WILEY275.L 10,13-Octadecadienoic acid, met...	173628	056554-62-2	99
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	173648	000112-63-0	99
			9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	98
8	22.15	0.09	C:\Database\WILEY275.L 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	97
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	96
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162049	000060-33-3	94
9	22.27	2.16	C:\Database\WILEY275.L METHYL 9-OCTADECENOATE \$\$ METHY...	175277	000000-00-0	98
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175230	000112-62-9	98
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175233	000112-62-9	96
10	22.43	1.22	C:\Database\WILEY275.L 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	97
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	95
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162047	000060-33-3	95

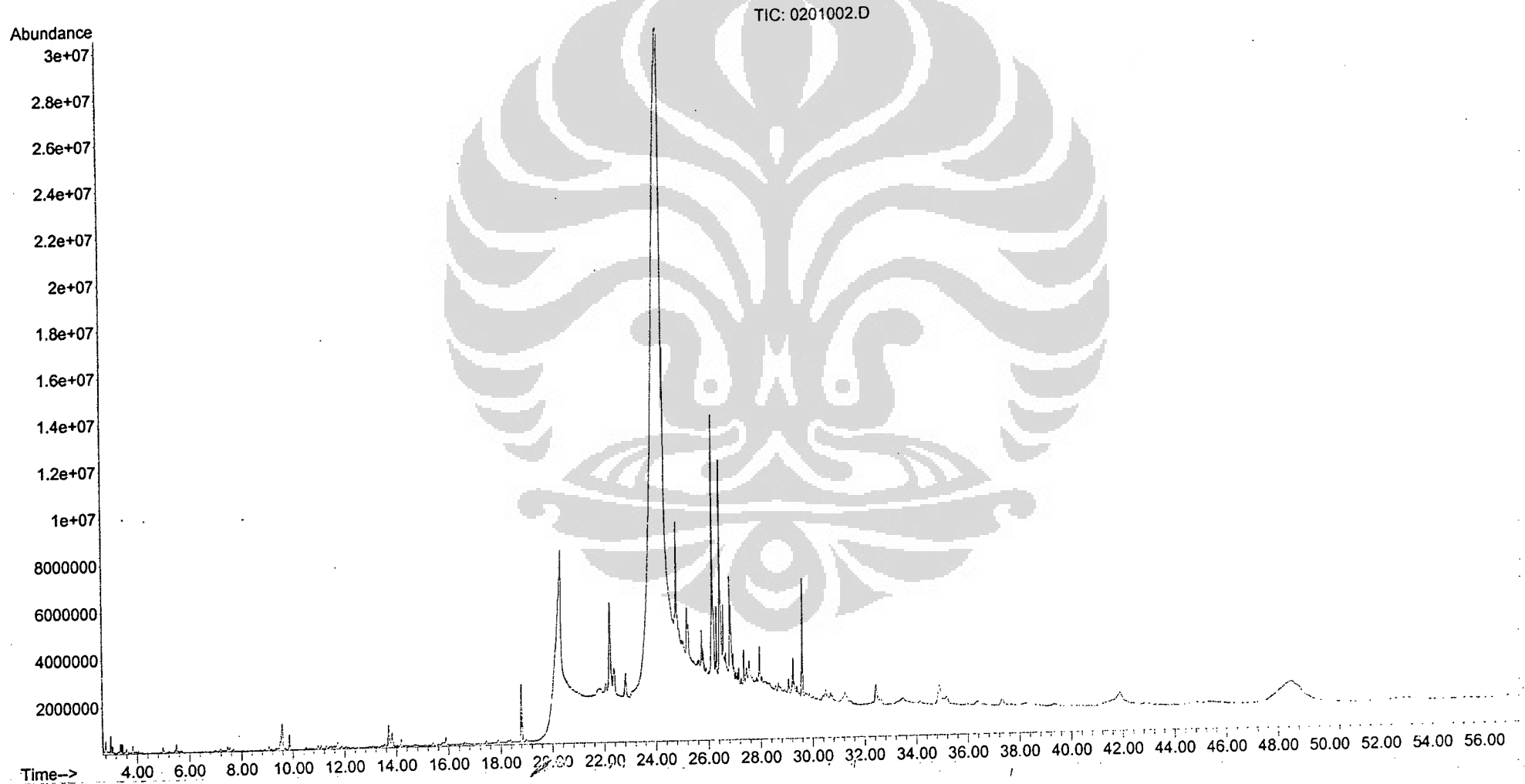
11	22.85	0.71	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163701 000112-80-1 97 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163703 000112-80-1 97 HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) 163698 000000-00-0 95
12	23.26	1.32	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163703 000112-80-1 97 Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165440 000057-11-4 97 Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165437 000057-11-4 95
13	23.31	0.25	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163703 000112-80-1 97 Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165437 000057-11-4 97 Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165440 000057-11-4 97
14	23.34	0.16	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163703 000112-80-1 97 PALMITIC ACID \$\$ HEXADECANOIC ACID 141082 000000-00-0 95 Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm... 141008 000057-10-3 95
15	24.29	36.02	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163703 000112-80-1 99 HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) 163698 000000-00-0 98 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163706 000112-80-1 97
16	24.35	6.82	C:\Database\WILEY275.L Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165444 000057-11-4 96 Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165445 000057-11-4 96 Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165447 000057-11-4 95
17	24.80	2.42	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2,3-d... 214835 000111-03-5 49 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163704 000112-80-1 49 9-Octadecen-1-ol, (Z)- (CAS) \$\$... 151932 000143-28-2 38
18	25.20	0.43	C:\Database\WILEY275.L Cyclopropaneoctanal, 2-octyl- (... 162189 056196-06-6 87 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163700 000112-80-1 86 4,4-DIDEUTERO HEPTADECANAL 139373 056554-50-8 86
19	25.24	0.25	C:\Database\WILEY275.L Cyclopropaneoctanal, 2-octyl- (... 162189 056196-06-6 87 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163704 000112-80-1 84 9-Octadecenal (CAS) \$\$ Octadece... 150205 005090-41-5 78
20	25.56	0.28	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenamide, (Z)- (CAS) \$\$... 162710 000301-02-0 95 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)... 148348 056554-35-9 92 HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) 163698 000000-00-0 90
21	25.62	0.21	C:\Database\WILEY275.L Cyclopentadecanone, 2-hydroxy- 126229 004727-18-8 96 Muskolactone \$\$ Oxacyclohexadec... 126216 000106-02-5 95 HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) 163698 000000-00-0 95
22	25.76	0.37	C:\Database\WILEY275.L Octadecanamide (CAS) \$\$ Stearam... 164472 000124-26-5 86 9-Octadecenamide, (Z)- (CAS) \$\$... 162711 000301-02-0 70 9-Octadecenamide, (Z)- (CAS) \$\$... 162712 000301-02-0 62
23	26.17	1.86	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$... 150215 001577-52-2 96 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd... 197040 004500-01-0 81 (Z,Z)-3,13-octadecadien-1-ol 150220 000000-00-0 70

4	26.22	0.37	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	213820	002277-28-3	95
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	213822	003443-82-1	94
			LINOLEIC ACID, BUTYL ESTER	203722	000000-00-0	74
25	26.31	0.30	C:\Database\WILEY275.L 1-allyl-2,8-dimethoxy-9H-carbaz...	150719	103763-37-7	90
			2-(METHYL-D3)-CYCLONONANONE \$\$ ...	40835	032454-54-9	55
			Hexadecanedioic acid (CAS) \$\$ T...	166845	000505-54-4	46
26	26.45	1.66	C:\Database\WILEY275.L 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	93
			Cyclopentadecanone, 2-hydroxy-	126229	004727-18-8	91
			9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$...	150215	001577-52-2	90
27	26.58	0.43	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163704	000112-80-1	90
			HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163698	000000-00-0	45
			1,3-Dioxane, 2,2,4,5-tetramethy...	238540	056324-82-4	44
28	26.64	0.40	C:\Database\WILEY275.L Docosanoic acid, methyl ester (...	213957	000929-77-1	84
			Docosanoic acid, methyl ester (...	213958	000929-77-1	83
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175227	000112-62-9	81
29	26.83	0.46	C:\Database\WILEY275.L (Z)14-Tricosenyl formate	220118	077899-10-6	99
			Ethanol, 2-(9-octadecenyloxy)-,...	187489	005353-25-3	94
			11-Hexacosyne (CAS) \$\$ HEXACOSY...	218293	034291-69-5	93
30	26.87	0.36	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162049	000060-33-3	98
			Linoleic acid	162061	000060-33-3	97
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162047	000060-33-3	96
31	27.17	0.10	C:\Database\WILEY275.L Tricosanoic acid, methyl ester ...	221037	002433-97-8	94
			Tricosanoic acid, methyl ester ...	221038	002433-97-8	87
			7-Hexadecenoic acid, methyl est...	151775	056875-67-3	70
32	27.37	0.18	C:\Database\WILEY275.L Cinnamyl cinnamate \$\$ 2-Propeno...	148313	000122-69-0	38
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	214838	003443-84-3	30
			7-AZA-.BETA.-METHYLBENZONORBORN...	44841	062094-39-7	27
33	27.46	0.38	C:\Database\WILEY275.L 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	90
			9,11-Octadecadienoic acid, meth...	173620	013038-47-6	53
			13-Tetradecenal	96177	085896-31-7	53
34	27.56	0.95	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	214838	003443-84-3	96
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2,3-d...	214835	000111-03-5	95
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	197040	004500-01-0	64
35	27.65	0.38	C:\Database\WILEY275.L Tetracosanoic acid, methyl este...	227340	002442-49-1	99
			Tetracosanoic acid, methyl este...	227344	002442-49-1	95
			Heneicosanoic acid, 18-propyl-,...	227347	055334-67-3	93
36	27.97	0.37	C:\Database\WILEY275.L p-Menth-8(10)-en-9-ol, cis- (CA...	40318	015714-13-3	46
			5,5'-bis(acetyl)-3,3'-biisoxazo...	104839	111080-82-1	43
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2,3-d...	214835	000111-03-5	41

37	23.52	0.28	C:\Database\WILEY275.L Stigmast-5-en-3-ol, (3.beta.)- ... 5,5'-bis(acetyl)-3,3'-biisoxazo... Stigmasta-4,7,22-trien-3.alpha.-ol	240199 104839 238629	000083-46-5 111080-32-1 000000-00-0	50 11 10
38	22.80	0.52	C:\Database\WILEY275.L 1,4,4a,8b-tetrahydro-1-methyl-2... 25-EPIAPLYSTERYLACETATE-2 25-EPIAPLYSTERYLACETATE-1	243416 251787 251788	107319-68-6 000000-00-0 000000-00-0	74 46 46
39	23.85	0.39	C:\Database\WILEY275.L Ergosta-4,22-diene (1r*,2r*,1'r*)-2-(2'-oxocyclohe... 7,8-dioxabicyclo[4.2.2]dec-9-ene	227420 111230 27846	076866-88-1 108444-92-4 052148-56-8	38 14 10
40	23.97	0.31	C:\Database\WILEY275.L Stigmasta-4,22-diene Ergosta-4,22-dien-3-one (CAS) \$... 25,26,27-TRISNOR-3.BETA.-ACETOX...	233359 233313 252195	076866-92-7 004030-92-6 065352-04-7	56 55 12
41	29.04	1.37	C:\Database\WILEY275.L PETROSTERYLACETATE P-QUINQUEPHENYL \$\$ 1,1':2',1'':... Bikaverin \$\$ 6,11-Dihydroxy-3,8...	251274 227427 227058	000000-00-0 005660-37-7 033390-21-5	46 44 43
42	29.25	3.13	C:\Database\WILEY275.L Stigmasta-5,22-dien-3-ol, aceta... 3.ALPHA.,5-CYCLO-ERGOSTA-7,22-D... Strychnidin-10-one, 2,3-dimetho...	251255 232572 232417	054482-54-1 003037-46-5 000357-57-3	60 58 42
43	29.39	1.52	C:\Database\WILEY275.L 2-acetyl-8-isopropyl-peri-xanth... 2a,2b,6b,6c-tetrahydro-6c-methy... ERGOSTA-4,6,22-TRIEN-3ALPHA-OL ...	233200 233374 233337	133376-93-9 107319-78-8 096790-32-8	72 59 58
44	29.48	0.77	C:\Database\WILEY275.L 3-(2-naphthylvinylene)-8H,12H-6... (1S,2S,4R)-1,2-dibromo-p-menth... Stigmast-5-en-3-ol, (3.beta.)- ...	232520 172790 240199	121717-30-4 050429-63-5 000083-46-5	38 32 27
45	29.65	5.42	C:\Database\WILEY275.L (24R,25S)-APLYSTERYLACETATE 25-EPIAPLYSTERYLACETATE-1 2,8-diisopropyl-peri-xanthenoxa...	251789 251788 233230	000000-00-0 000000-00-0 133376-91-7	90 90 90
46	29.74	1.37	C:\Database\WILEY275.L Vitamin E \$\$ 2H-1-Benzopyran-6-... 1,5-DIMETHOXY-2,4-BIS(3-METHYLP... Dimethyl 2,3-bis(1,3-dimethylin...	245273 245147 245158	000059-02-9 064042-52-0 072206-09-8	83 83 72
47	30.12	0.41	C:\Database\WILEY275.L MANGIFEROLIC ACID \$\$ 9,19-Cyclo... Cycloeucaleenol \$\$ 9,19-Cycloerg... 9,19-Cyclolanost-23-ene-3,25-di...	251724 243913 257294	004184-34-3 000469-39-6 054482-56-3	93 62 53
48	30.51	0.57	C:\Database\WILEY275.L Ergost-5-en-3-ol, (3.beta.)- (C... 23-R-METHYLCHOLESTEROL 23 S-METHYLCHOLESTEROL	235072 235125 235126	004651-51-8 000000-00-0 000000-00-0	99 98 98
49	30.78	1.53	C:\Database\WILEY275.L Stigmasta-5,22-dien-3-ol, (3.be... (E)-23-ethylcholesta-5,22-dien-... Stigmasta-5,22-dien-3-ol, (3.be...	239274 239396 239275	000083-48-7 114174-10-6 000083-48-7	99 96 96

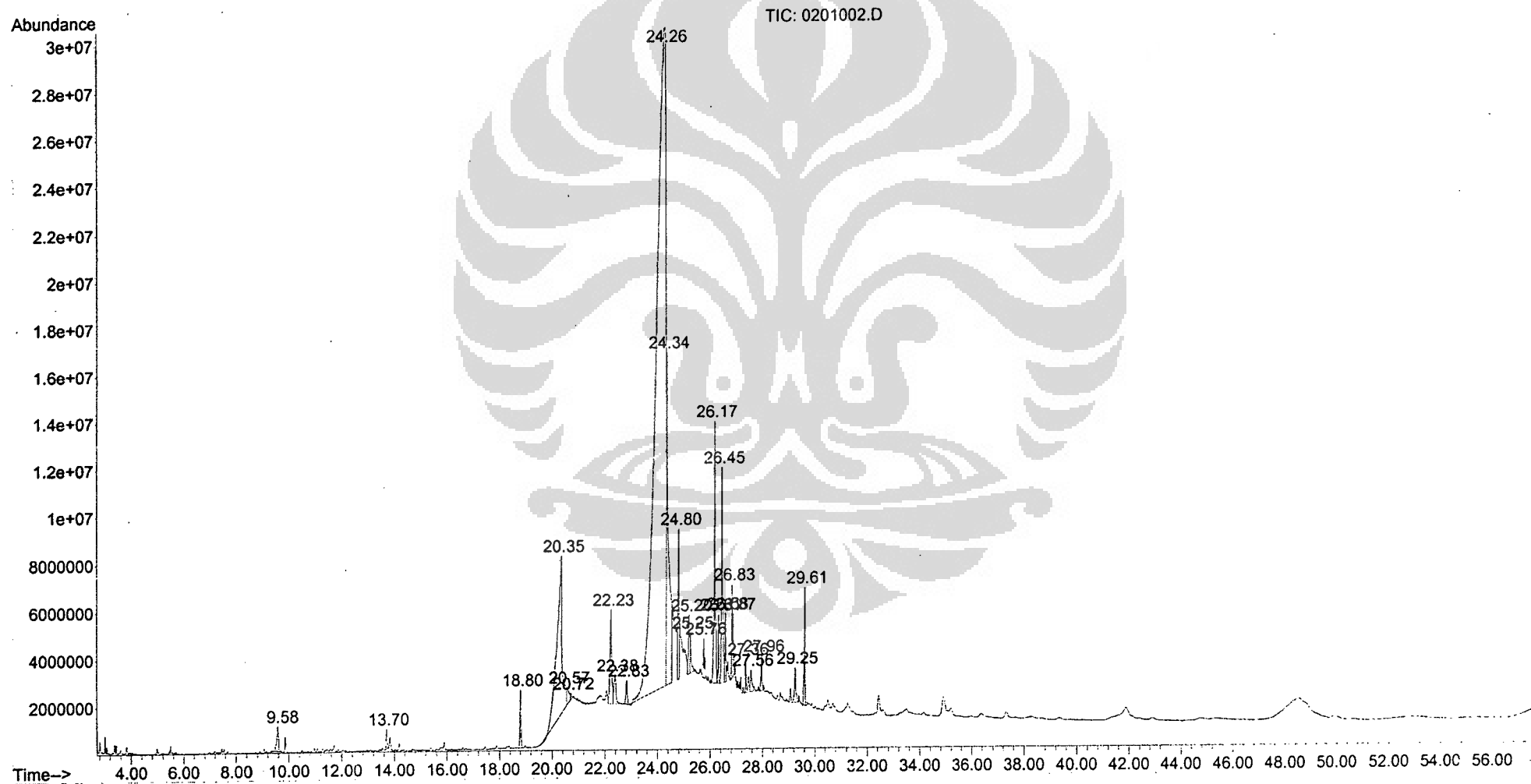
0	31.10	0.41	C:\Database\WILEY275.L Stigmast-5-en-3-ol, (3.beta.,24... 240208 000083-47-6 90 Stigmasta-5,23-dien-3.beta.-ol... 239299 038485-29-9 60 Methyl cyathadonate \$\$ Lupa-1,2... 253912 091897-09-5 59
1	31.32	3.76	C:\Database\WILEY275.L (23S)-ethylcholest-5-en-3.beta.... 240252 113845-28-6 99 Stigmast-5-en-3-ol, (3.beta.,24... 240207 000083-47-6 99 Stigmast-5-en-3-ol, (3.beta.)- ... 240203 000083-46-5 93
2	31.85	0.22	C:\Database\WILEY275.L ERGOSTA-4,6,22-TRIEN-3BETA-OL \$... 233340 034026-93-2 91 1-(p-tolyl)-3-(6-quinolyl)benzo... 233349 000000-00-0 72 2,8-diisopropyl-peri-xanthenoxa... 233230 133376-91-7 72
3	31.99	0.70	C:\Database\WILEY275.L 9,19-Cyclolanost-24-en-3-ol, (3... 243915 000469-38-5 53 Silane, (9,19-cyclo-9.beta.-lan... 259404 017608-55-8 42 24S-Ethylcholesta-4,22E-dien-6-one 238630 000000-00-0 38
4	32.44	0.31	C:\Database\WILEY275.L rel-(1R,4aR,8aR,5S)-1,4-dimethy... 148818 133116-13-9 40 10,13-Eicosadienoic acid, methy... 194549 030223-50-8 25 Hexadecanoic acid, 2-hydroxy-, ... 167049 016742-51-1 25
5	32.64	1.27	C:\Database\WILEY275.L (24R)-4-STIGMASTEN-3-ONE \$\$ Sti... 239285 001058-61-3 94 Stigmast-4-en-3-one (CAS) \$\$ 4-... 239284 001058-61-3 93 10.alpha.-Testosterone \$\$ Andro... 168788 000604-39-7 81
6	34.91	0.33	C:\Database\WILEY275.L CAPNELLANE-5.ALPHA.-OL \$\$ 1H-Cy... 108239 061234-85-3 41 5,5'-bis(acetyl)-3,3'-biisoxazo... 104839 111080-82-1 38 9-Octadecenoic acid (Z)-, 9-oct... 263533 003687-45-4 35
7	48.67	3.58	C:\Database\WILEY275.L Methamino,imide derivative of 4... 187861 041634-21-3 64 6-methoxy-1-indol-2-yl-.beta.-c... 188016 000000-00-0 64 TETRADECYL-O18-OXYMETHYL-2,2-DI... 198427 057346-66-4 53

File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0201002.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 13:09 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: A4  
Misc Info :  
Vial Number: 2





File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0201002.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 13:09 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: A4  
Misc Info :  
Vial Number: 2



Information from Data File:

File: C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0201002.D  
 Operator: TAZ  
 Date Acquired: 6 Jun 2008 13:09  
 Method File: MJARAK  
 Sample Name: A4  
 Misc Info:  
 Vial Number: 2

Search Libraries: C:\Database\WILEY275.L Minimum Quality: 100

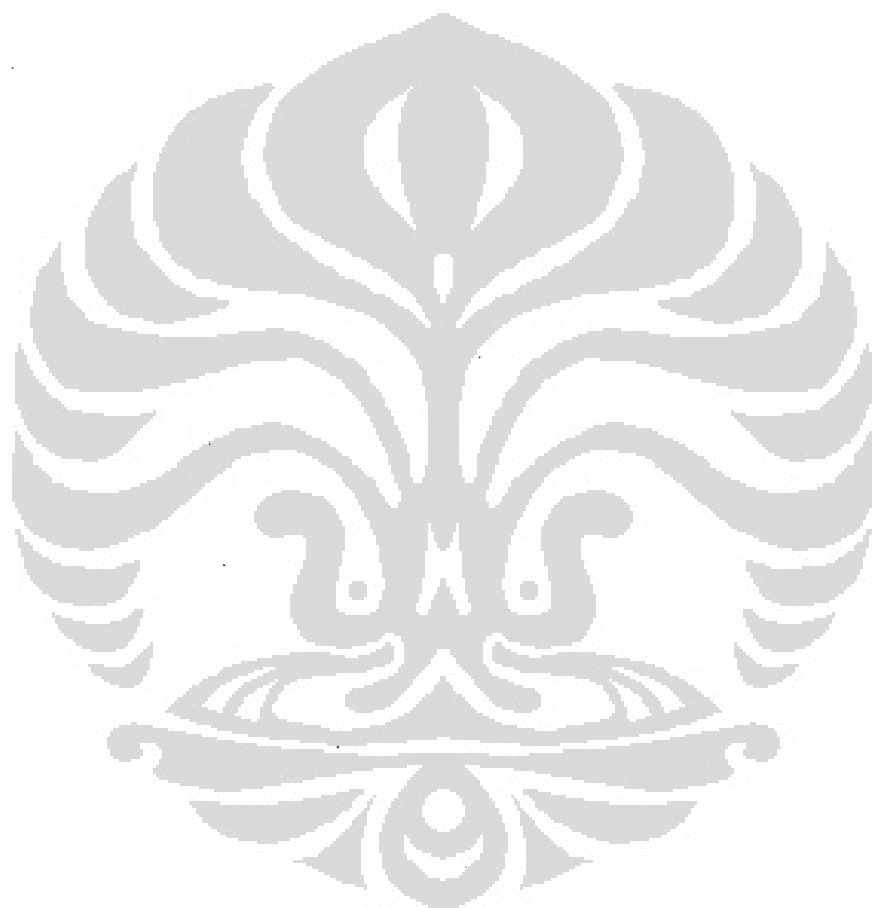
Unknown Spectrum: Apex

Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

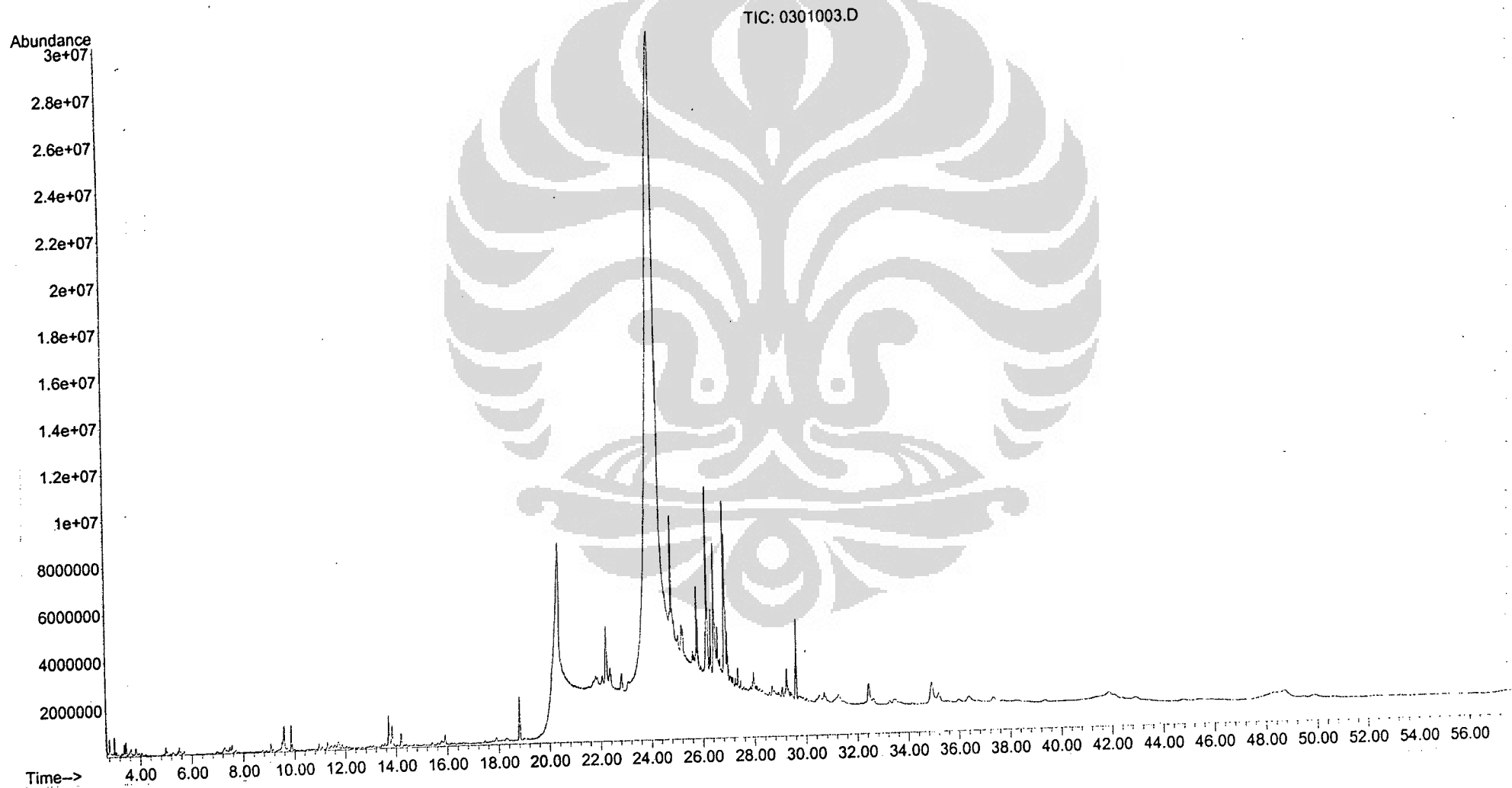
PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	9.58	0.44	C:\Database\WILEY275.L 1-Tridecene (CAS) \$\$ n-Tridec-1...	67375	002437-56-1	91
			1-Hexadecanol (CAS) \$\$ Cetal \$\$...	128160	036653-82-4	91
			1-Tetradecanol (CAS) \$\$ Alfol 1...	100060	000112-72-1	91
2	13.70	0.22	C:\Database\WILEY275.L 8-Heptadecene	124603	002579-04-6	99
			8-Heptadecene	124604	054290-12-9	97
			Heptadec-8-ene	124600	000000-00-0	97
3	18.80	0.66	C:\Database\WILEY275.L METHYL HEXADECANOATE \$\$ METHYL ...	153678	000000-00-0	99
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153607	000112-39-0	98
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153629	000112-39-0	98
4	20.35	8.91	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
5	20.58	0.35	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
6	20.72	0.06	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
7	22.23	1.77	C:\Database\WILEY275.L 8-Octadecenoic acid, methyl est...	175222	026528-50-7	99
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175237	000112-62-9	99
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175233	000112-62-9	99
8	22.39	0.61	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	95
			PALMITIC ACID \$\$ HEXADECANOIC ACID	141082	000000-00-0	95
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141008	000057-10-3	95
9	22.82	0.34	C:\Database\WILEY275.L Octadecanoic acid, methyl ester...	176801	000112-61-8	98
			Octadecanoic acid, methyl ester...	176794	000112-61-8	96
			Octadecanoic acid, methyl ester...	176789	000112-61-8	96
10	24.26	65.83	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163706	000112-80-1	96
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	96
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163702	000112-80-1	95

1	24.35	7.27	C:\Database\WILEY275.L Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165444 000057-11-4 96 Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165445 000057-11-4 95 Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165441 000057-11-4 95
12	24.80	1.65	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163704 000112-80-1 92 Cyclopropanoic acid, 2-octyl- (... 162189 056196-06-6 60 4,4-DIDEUTERO HEPTADECANAL 139373 056554-50-8 56
13	25.20	0.74	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163703 000112-80-1 93 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163700 000112-80-1 86 4,4-DIDEUTERO HEPTADECANAL 139373 056554-50-8 86
14	25.25	0.54	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163704 000112-80-1 94 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163703 000112-80-1 93 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)... 148348 056554-35-9 90
15	25.76	0.35	C:\Database\WILEY275.L 2-Methyl-7-nonadecene 162229 000000-00-0 90 Cyclotetracosane (CAS) 203771 000297-03-0 90 5-Eicosene, (E)- (CAS) 162218 074685-30-6 89
16	26.16	3.01	C:\Database\WILEY275.L 9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$... 150215 001577-52-2 78 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd... 197040 004500-01-0 72 Oleic acid, 3-hydroxypropyl est... 205978 000821-17-0 68
17	26.31	0.41	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163703 000112-80-1 64 CYCLOEICOSANE 162226 000000-00-0 41 2-n-Butylcyclohexanone 40778 000000-00-0 38
18	26.45	2.61	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI... 150204 002423-10-1 93 9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)... 148348 056554-35-9 93 9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$... 150215 001577-52-2 90
19	26.58	0.57	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163704 000112-80-1 90 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163703 000112-80-1 59 4,4-DIDEUTERO HEPTADECANAL 139373 056554-50-8 51
20	26.83	0.65	C:\Database\WILEY275.L (Z)14-Tricosenyl formate 220118 077899-10-6 97 11-Hexacosyne (CAS) \$\$ HEXACOSY... 218293 034291-69-5 93 13-Hexacosyne (CAS) \$\$ HEXACOSY... 218292 034291-68-4 93
21	26.87	0.54	C:\Database\WILEY275.L (Z)14-Tricosenyl formate 220118 077899-10-6 99 11-Hexacosyne (CAS) \$\$ HEXACOSY... 218293 034291-69-5 93 13-Hexacosyne (CAS) \$\$ HEXACOSY... 218292 034291-68-4 86
22	27.36	0.22	C:\Database\WILEY275.L 5.BETA.-PREGNANE-3.ALPHA.,20.BE... 258532 071583-49-8 59 5-hydroxymethyl-4-phenyl-1-amin... 73988 098610-83-4 47 1-Butene, 4,4-dichlorohexafluor... 117154 000357-24-4 43
23	27.55	0.36	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163704 000112-80-1 95 Cyclopentadecanone, 2-hydroxy- 126229 004727-18-8 91 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd... 214838 003443-84-3 83

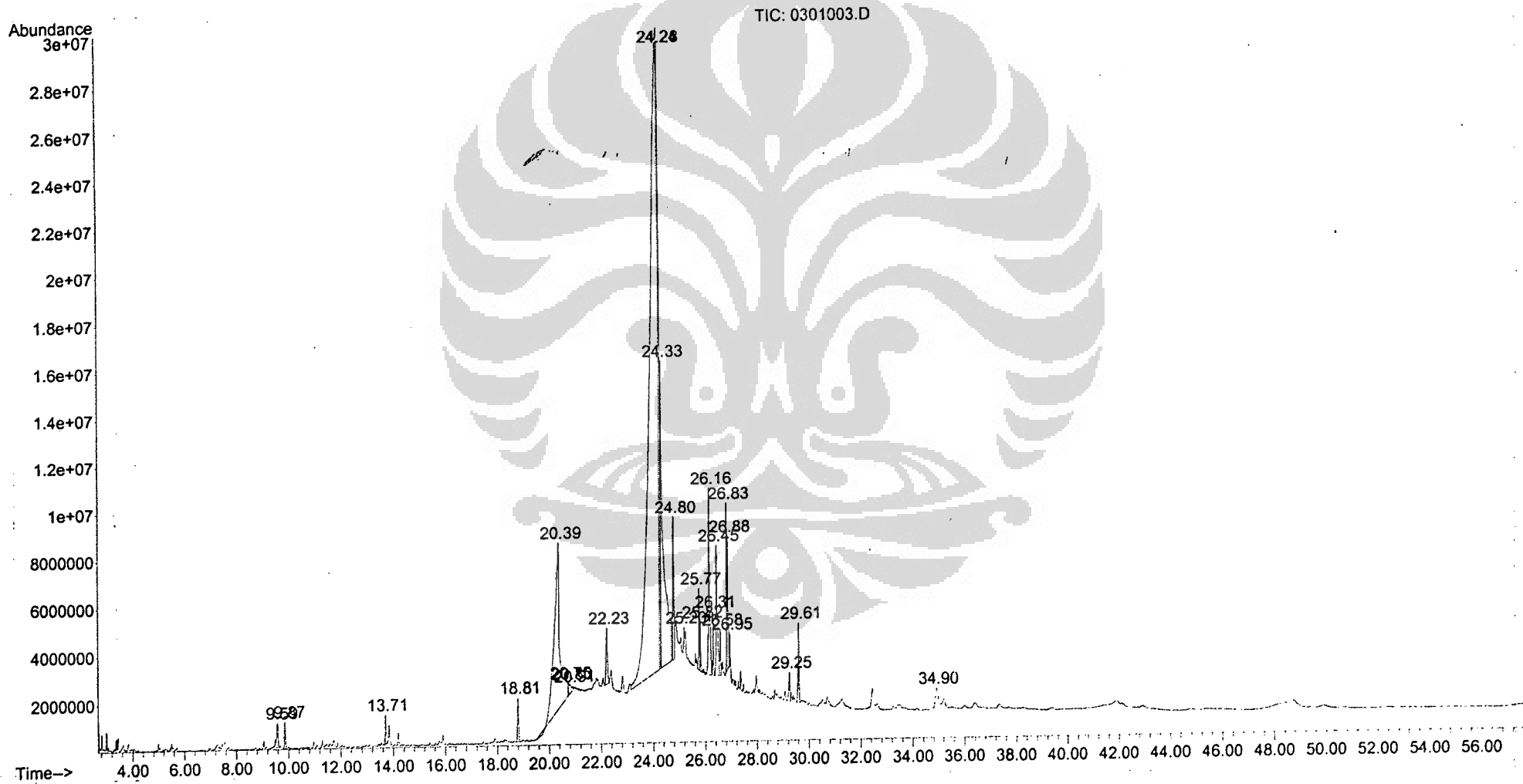
24	27.96	0.33	C:\Database\WILEY275.L				
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162049	000060-33-3	59	
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	214938	003445-34-3	42	
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	213822	003443-82-1	25	
25	29.25	0.52	C:\Database\WILEY275.L				
			23,24-METHANOCHOLEST-5-EN-3B-OL...	234197	000000-00-0	47	
			23,24-METHANOCHOLEST-5-EN-3B-OL...	234199	000000-00-0	42	
			A-Norcholestan-3-one, 5-ethenyl...	234146	019594-90-2	38	
26	29.62	1.05	C:\Database\WILEY275.L				
			2,8-diisopropyl-peri-xanthenoxa...	233230	133376-91-7	90	
			2-acetyl-8-isopropyl-peri-xanth...	233200	133376-93-9	90	
			25-EPIAPLYSTERYLACETATE-1	251788	000000-00-0	81	



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0301003.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 14:10 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: B1  
Misc Info :  
Vial Number: 3



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0301003.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 14:10 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: B1.  
Misc Info :  
Vial Number: 3



Information from Data File:

File: C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0301003.D  
 Operator: TAZ  
 Date Acquired: 6 Jun 2008 14:10  
 Method File: MJARAK  
 Sample Name: B1  
 Misc Info:  
 Vial Number: 3

Search Libraries: C:\Database\WILEY275.L Minimum Quality: 100

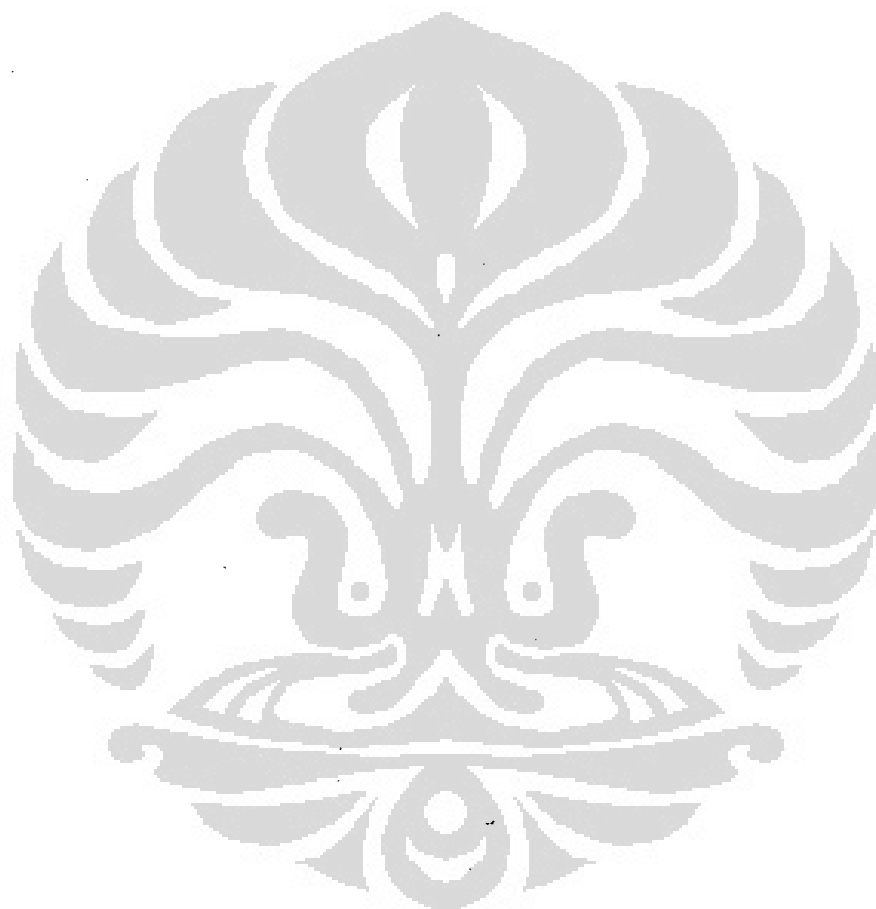
Unknown Spectrum: Apex  
 Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	9.59	0.35	C:\Database\WILEY275.L 1-Tridecene (CAS) \$\$ n-Tridec-1...	67375	002437-56-1	93
			1-Tetradecanol (CAS) \$\$ Alfol 1...	100051	000112-72-1	91
			7-Hexadecene, (Z)- (CAS)	110850	035507-09-6	91
2	9.87	0.27	C:\Database\WILEY275.L Pentadecane (CAS) \$\$ n-Pentadec...	98308	000629-62-9	98
			Pentadecane (CAS) \$\$ n-Pentadec...	98301	000629-62-9	98
			Pentadecane (CAS) \$\$ n-Pentadec...	98312	000629-62-9	98
3	13.71	0.34	C:\Database\WILEY275.L 8-Heptadecene	124603	002579-04-6	99
			8-Heptadecene	124604	054290-12-9	98
			Heptadec-8-ene	124600	000000-60-0	98
4	18.81	0.53	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid, methyl ester...	153609	000112-39-0	98
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153607	000112-39-0	98
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153629	000112-39-0	98
5	20.39	10.76	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141005	000057-10-3	99
6	20.75	0.13	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
7	20.80	0.17	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141005	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
8	20.91	0.06	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	98
9	22.23	0.89	C:\Database\WILEY275.L 8-Octadecenoic acid, methyl est...	175222	026528-50-7	99
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175233	000112-62-9	98
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175237	000112-62-9	98
10	24.24	56.08	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	98
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163706	000112-80-1	96
			9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163702	000112-80-1	95

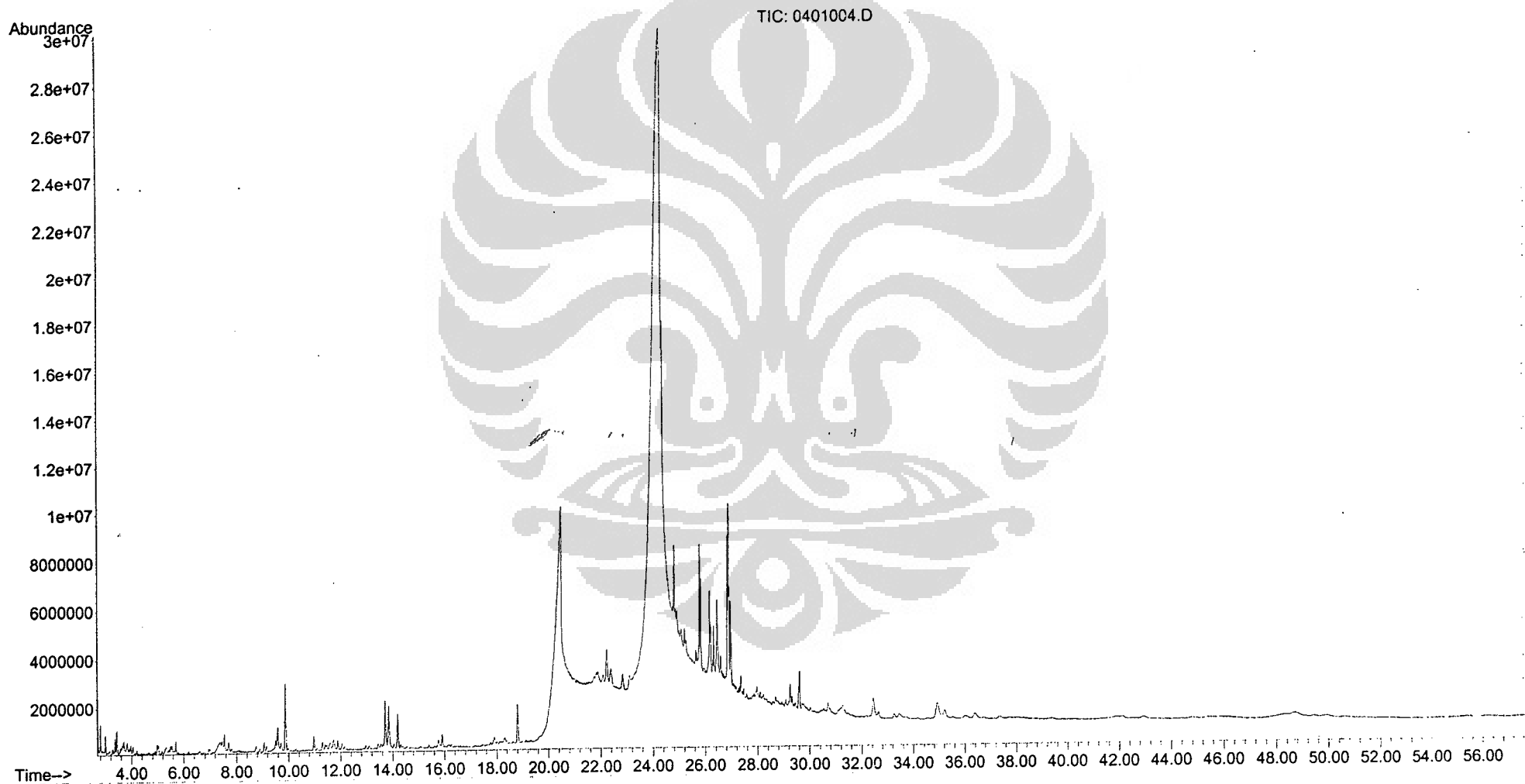
1	24.28	8.61	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ... 163703 000112-80-1 98 9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ... 163706 000112-80-1 97 9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ... 163702 000112-80-1 95
12	24.34	9.71	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ... 163703 000112-80-1 95 9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ... 163706 000112-80-1 91 Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea... 165447 000057-11-4 90
13	24.80	1.61	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ... 163704 000112-80-1 93 9-Octadecenoic acid (Z) -, 2,3-d... 214835 000111-03-5 45 Oleic Acid 163725 000112-80-1 42
14	25.20	0.11	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ... 163704 000112-80-1 96 9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ... 163703 000112-80-1 95 9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ... 163700 000112-80-1 90
15	25.77	0.68	C:\Database\WILEY275.L 1-Docosene (CAS) 184639 001599-67-3 99 Cyclotetracosane (CAS) 203771 000297-03-0 93 1-Octadecanol (CAS) \$\$ Stenol \$... 153792 000112-92-5 90
16	25.82	0.38	C:\Database\WILEY275.L Cyclotetracosane (CAS) 203771 000297-03-0 98 11-Tricosene (CAS) 194627 052078-56-5 96 1-Docosene (CAS) 184639 001599-67-3 96
17	26.16	2.40	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z) -, 2-hyd... 214838 003443-84-3 90 Oleic acid, 3-hydroxypropyl est... 205978 000821-17-0 90 9-Octadecenoic acid (Z) -, 2,3-d... 214835 000111-03-5 86
18	26.32	0.43	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ... 163704 000112-80-1 91 7-Octadecenoic acid, methyl est... 175219 057396-98-2 58 Cyclopropanoic acid, 2-octyl- (... 162189 056196-06-6 50
19	26.44	1.87	C:\Database\WILEY275.L 9,17-Octadecadienal, (Z) - (CAS)... 148348 056554-35-9 95 Cyclopentadecanone, 2-hydroxy- 126229 004727-18-8 93 9,12-Octadecadien-1-ol (CAS) \$\$... 150215 001577-52-2 92
20	26.58	0.40	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ... 163704 000112-80-1 94 HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) 163698 000000-00-0 87 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 162047 000060-33-3 60
21	26.84	1.12	C:\Database\WILEY275.L 11-Hexacosyne (CAS) \$\$ HEXACOSY... 218293 034291-69-5 93 Spiro[4.5]decane (CAS) \$\$ Spiro... 26811 000176-63-6 74 1,13-Tetradecadiene (CAS) 78993 021964-49-8 70
22	26.87	1.12	C:\Database\WILEY275.L (Z)14-Tricosenyl formate 220118 077899-10-6 97 11-Hexacosyne (CAS) \$\$ HEXACOSY... 218293 034291-69-5 94 Spiro[4.5]decane (CAS) \$\$ Spiro... 26811 000176-63-6 68
23	26.96	0.14	C:\Database\WILEY275.L 10-Heneicosene (c,t) 173799 000000-00-0 97 Cyclotetracosane (CAS) 203771 000297-03-0 94 1-Docosanol (CAS) \$\$ Behenic al... 197212 000661-19-8 90



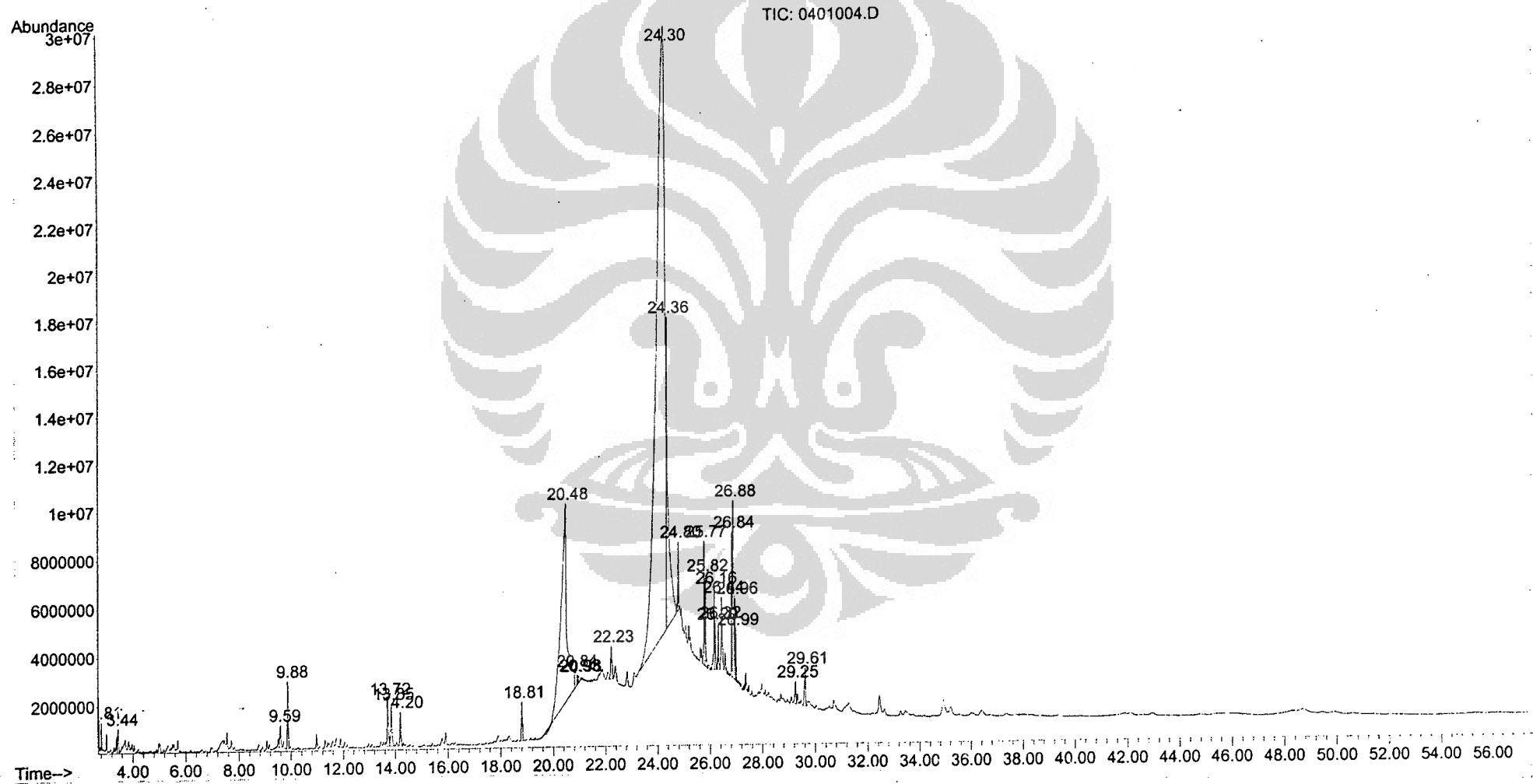
24	29.25	0.41	C:\Database\WILEY275.L				
			A-Norcholestan-3-one, 5-ethenyl...	234146	019594-90-2	52	
			A-Norcholestan-3-one, 5-ethenyl...	234147	019594-90-2	49	
			23,24-METHANOCHOLEST-5-EN-3B-OL...	234197	000000-00-0	46	
25	29.61	0.85	C:\Database\WILEY275.L				
			2,8-diisopropyl-peri-xanthenoxa...	233230	133376-91-7	90	
			2-acetyl-8-isopropyl-peri-xanth...	233200	133376-93-9	90	
			1-(p-tolyl)-3-(6-quinolyl)benzo...	233349	000000-00-0	80	
26	34.90	0.55	C:\Database\WILEY275.L				
			OLEIC ACID, PROPYL ESTER	195830	000000-00-0	53	
			Neronine, 4.beta.,5-dihydro- (C...	209763	019483-30-8	46	
			Methyl 5-nitro-2,11-dioxo-cyclo...	165851	086572-42-1	43	



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0401004.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 15:12 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: B2  
Misc Info :  
Vial Number: 4



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0401004.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 15:12 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: B2  
Misc Info :  
Vial Number: 4



formation from Data File:

File: C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0401004.D  
 Operator: FAZ  
 Date Acquired: 6 Jun 2008 15:12  
 Method File: MJARAK  
 Sample Name: B2  
 Misc Info:  
 Vial Number: 4

Search Libraries: C:\Database\WILEY275.L Minimum Quality: 100

Unknown Spectrum: Apex  
 Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

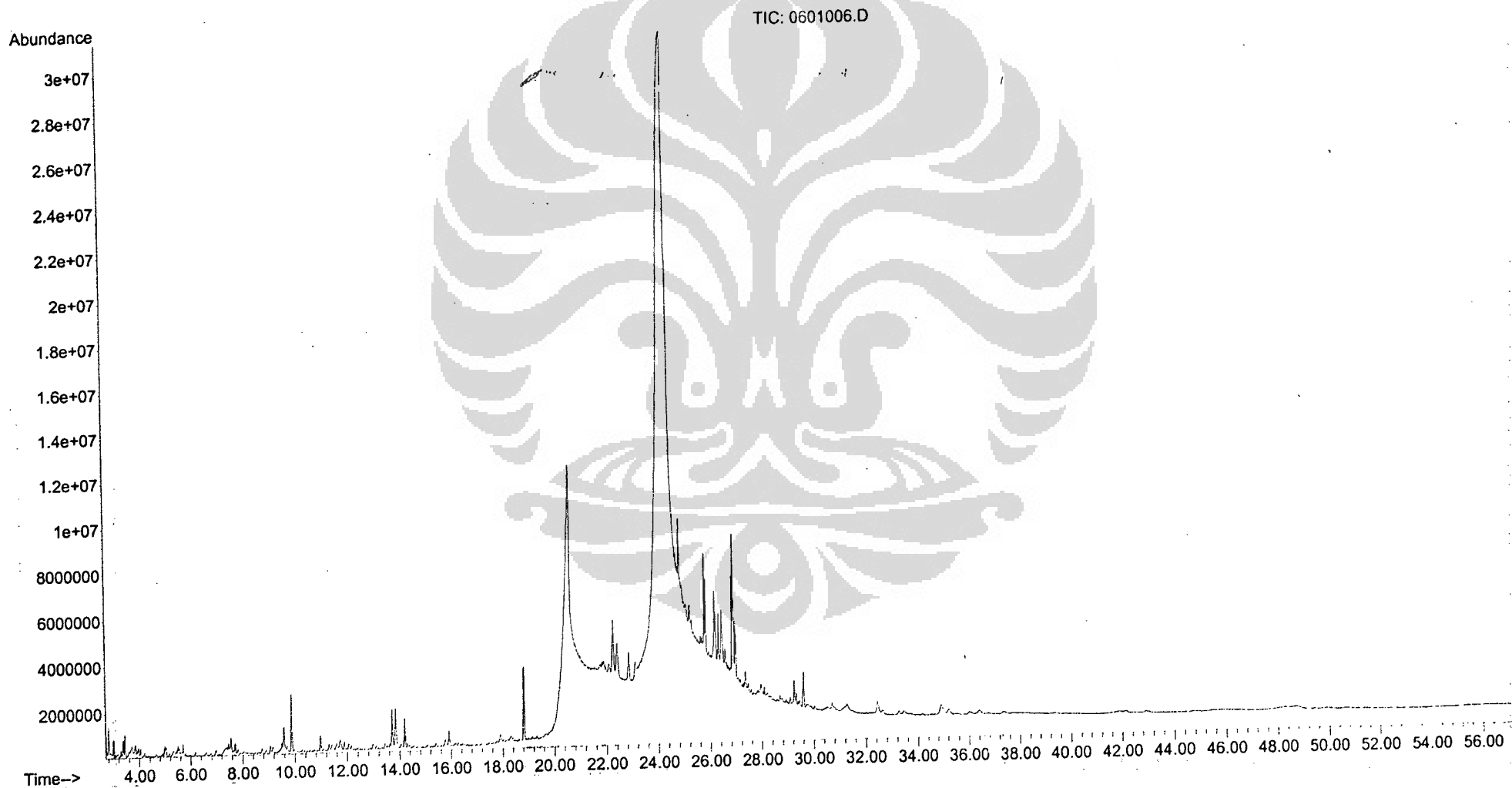
#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	2.81	0.18	C:\Database\WILEY275.L 5-Undecene (CAS)	40857	004941-53-1	97
			4-Undecene, (E)- (CAS) \$\$ (E)-4...	40855	000693-62-9	94
			5-Undecene, (E)- (CAS) \$\$ (E)-5...	40859	000764-97-6	93
2	3.44	0.21	C:\Database\WILEY275.L Benzene, pentyl- (CAS) \$\$ Pentyl...	34217	000538-68-1	94
			Benzene, pentyl- (CAS) \$\$ Pentyl...	34218	000538-68-1	93
			Benzene, pentyl- (CAS) \$\$ Pentyl...	34223	000538-68-1	93
3	9.59	0.32	C:\Database\WILEY275.L 1-Tridecene (CAS) \$\$ n-Tridec-1...	67375	002437-56-1	92
			1-Hexadecanol (CAS) \$\$ Cetal \$\$...	128167	036653-82-4	90
			Cyclopentadecane	96278	000295-48-7	87
4	9.89	0.75	C:\Database\WILEY275.L Pentadecane (CAS) \$\$ n-Pentadec...	98308	000629-62-9	98
			Pentadecane (CAS) \$\$ n-Pentadec...	98302	000629-62-9	98
			Pentadecane (CAS) \$\$ n-Pentadec...	98301	000629-62-9	97
5	13.72	0.67	C:\Database\WILEY275.L 8-Heptadecene	124603	002579-04-6	99
			8-Heptadecene	124604	054290-12-9	98
			Heptadec-8-ene	124600	000000-00-0	98
6	13.86	0.68	C:\Database\WILEY275.L 8-Heptadecene	124604	054290-12-9	98
			Heptadec-8-ene	124600	000000-00-0	98
			1-Pentadecene (CAS) \$\$ Pentadec...	96251	013360-61-7	98
7	14.21	0.43	C:\Database\WILEY275.L Heptadecane (CAS) \$\$ n-Heptadec...	126476	000629-78-7	98
			Tetradecane (CAS) \$\$ n-Tetradec...	83540	000629-59-4	97
			Heptadecane (CAS) \$\$ n-Heptadec...	126473	000629-78-7	97
8	18.81	0.50	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid, methyl ester...	153609	000112-39-0	98
			METHYL HEXADECANOATE \$\$ METHYL ...	153678	000000-00-0	98
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153607	000112-39-0	98
9	20.48	14.65	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	99
10	20.83	0.37	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	98

11	20.93	0.11	C:\Database\WILEY275.L	Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
				Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	98
				Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141005	000057-10-3	98
12	20.98	0.11	C:\Database\WILEY275.L	Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
				Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141005	000057-10-3	98
				Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	97
13	22.23	0.55	C:\Database\WILEY275.L	Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141008	000057-10-3	92
				PALMITIC ACID \$\$ HEXADECANOIC ACID	141082	000000-00-0	92
				Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	92
14	24.30	62.71	C:\Database\WILEY275.L	9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	99
				9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163706	000112-80-1	97
				HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163698	000000-00-0	96
15	24.36	7.99	C:\Database\WILEY275.L	9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163703	000112-80-1	95
				9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163705	000112-80-1	91
				Octadecanoic acid (CAS) \$\$ Stea...	165447	000057-11-4	90
16	24.80	0.57	C:\Database\WILEY275.L	9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163704	000112-80-1	93
				9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163700	000112-80-1	80
				9-Octadecenoic acid (Z)-, 2,3-d...	214835	000111-03-5	70
17	25.78	1.05	C:\Database\WILEY275.L	1-Docosene (CAS)	184639	001599-67-3	99
				10-Heneicosene (c,t)	173799	000000-00-0	98
				Cyclotetracosane (CAS)	203771	000297-03-0	95
18	25.82	0.76	C:\Database\WILEY275.L	1-Nonadecene (CAS)	150251	018435-45-5	96
				1-Heptadecene (CAS) \$\$ Hexahydr...	124592	006765-39-5	95
				Cyclotetracosane (CAS)	203771	000297-03-0	95
19	26.16	0.87	C:\Database\WILEY275.L	9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI...	150204	002423-10-1	94
				9-Octadecanoic acid (Z)-, 2-hyd...	214838	003443-84-3	94
				Cyclopropaneoctanal, 2-octyl-	162189	056196-06-6	92
20	26.20	0.40	C:\Database\WILEY275.L	9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162049	000060-33-3	80
				Linoleic acid	162061	000060-33-3	80
				9-Octadecenoic acid (Z)-, 2,3-d...	214835	000111-03-5	64
21	26.32	0.38	C:\Database\WILEY275.L	9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163704	000112-80-1	94
				9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI...	150204	002423-10-1	64
				8-Octadecenoic acid, methyl est...	175222	026528-50-7	58
22	26.44	0.99	C:\Database\WILEY275.L	9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ...	163704	000112-80-1	95
				9,17-Octadecadienal, (Z)- (CAS)...	148348	056554-35-9	94
				9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162049	000060-33-3	91
23	26.84	1.11	C:\Database\WILEY275.L	13-Hexacosyne (CAS) \$\$ HEXACOSY...	218292	034291-68-4	93
				1,13-Tetradecadiene (CAS)	78993	021964-49-8	76
				(Z)14-Tricosenyl formate	220118	077899-10-6	64

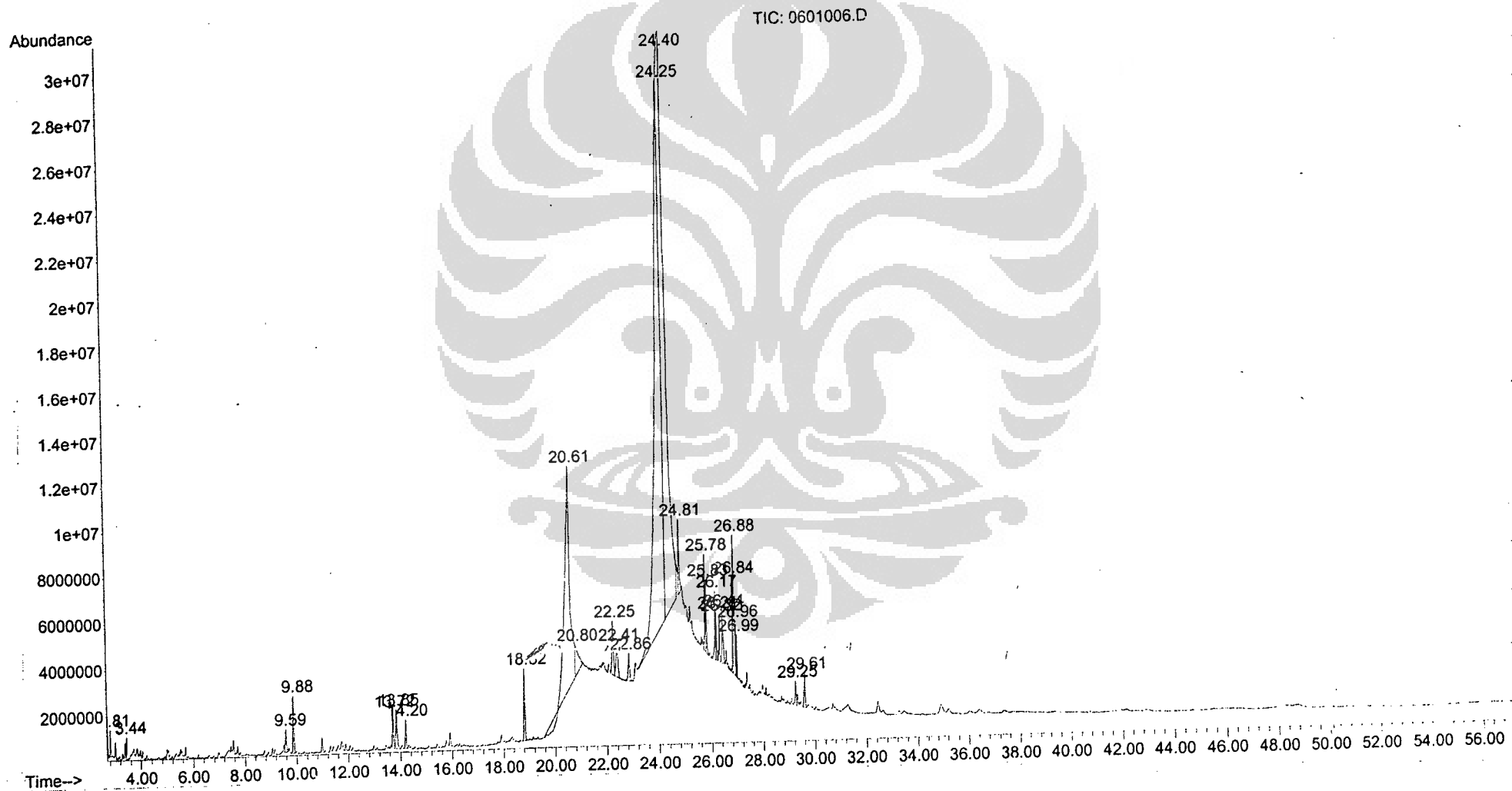
4	26.88	2.00	C:\Database\WILEY275.L (Z)14-Tricosenyl formate	220118	077899-10-6	96
			11-Hexacosyne (CAS) \$\$ HEXACOSY...	218293	034291-69-5	93
			13-Hexacosyne (CAS) \$\$ HEXACOSY...	218292	034291-68-4	87
5	26.96	0.50	C:\Database\WILEY275.L 1-Docosene (CAS)	184639	001599-67-3	99
			9-Nonadecene	150258	000000-00-0	96
			1-Nonadecene (CAS)	150251	018435-45-5	95
6	26.99	0.31	C:\Database\WILEY275.L 9-Hexacosene	219269	000000-00-0	95
			Cyclotetracosane (CAS)	203771	000297-03-0	90
			1-Hexacosene (CAS)	219262	018835-33-1	89
7	29.25	0.32	C:\Database\WILEY275.L 23,24-METHANOCHOLEST-5-EN-3B-OL...	234199	000000-00-0	55
			4.alpha.,5-Cyclo-a-homo-5.alpha...	234242	000000-00-0	45
			23,24-METHANOCHOLEST-5-EN-3B-OL...	234197	000000-00-0	42
8	29.61	0.52	C:\Database\WILEY275.L 2,8-diisopropyl-peri-xanthenoxa...	233230	133376-91-7	83
			2-acetyl-8-isopropyl-peri-xanth...	233200	133376-93-9	83
			1,4,4a,8b-tetrahydro-1-methyl-2...	243416	107319-68-6	83



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0601006.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 17:16 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: B4  
Misc Info :  
Vial Number: 6



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0601006.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 17:16 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: B4  
Misc Info :  
Vial Number: 6





Information from Data File:

File: C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0601006.D  
 Operator: TAZ  
 Date Acquired: 6 Jun 2008 17:16  
 Method File: MJARAK  
 Sample Name: B4  
 Misc Info:  
 Vial Number: 6

Search Libraries: C:\Database\WILEY275.L Minimum Quality: 100

Unknown Spectrum: Apex  
 Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

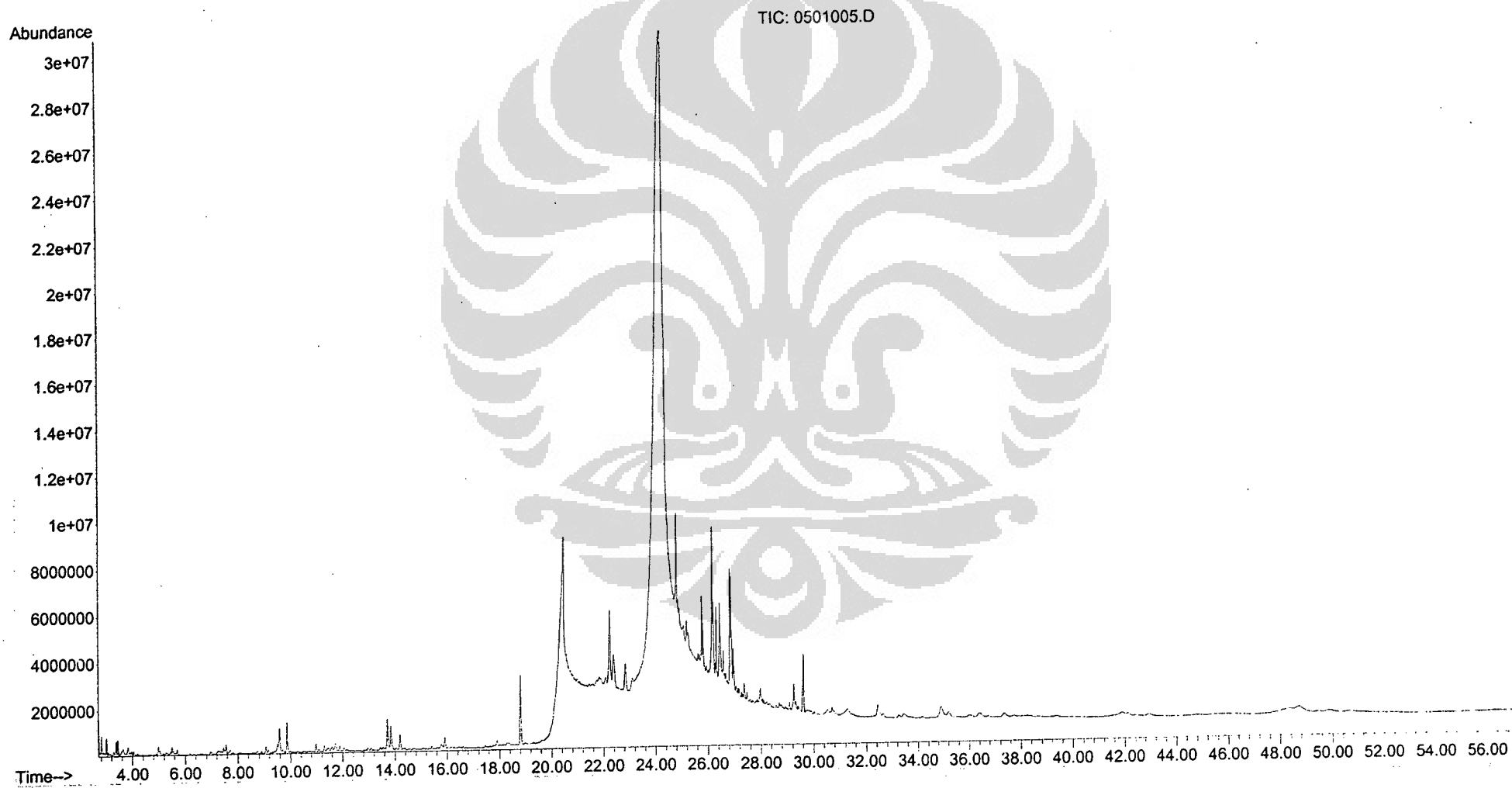
PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	2.81	0.19	C:\Database\WILEY275.L 5-Undecene (CAS)	40857	004941-53-1	97
			4-Undecene, (E)- (CAS) \$\$ (E)-4...	40855	000693-62-9	94
			5-Undecene, (E)- (CAS) \$\$ (E)-5...	40859	000764-97-6	93
2	3.44	0.21	C:\Database\WILEY275.L Benzene, pentyl- (CAS) \$\$ Pentyl...	34217	000538-68-1	95
			Benzene, pentyl- (CAS) \$\$ Pentyl...	34223	000538-68-1	93
			Benzene, pentyl- (CAS) \$\$ Pentyl...	34218	000538-68-1	76
3	9.59	0.32	C:\Database\WILEY275.L 1-Tetradecanol (CAS) \$\$ Alfol 1...	100051	000112-72-1	91
			1-Tetradecanol (CAS) \$\$ Alfol 1...	100054	000112-72-1	90
			5-Tetradecene, (E)- (CAS)	81334	041446-66-6	87
4	9.88	0.64	C:\Database\WILEY275.L Pentadecane (CAS) \$\$ n-Pentadec...	98308	000629-62-9	98
			pentadecane	98340	000629-62-9	98
			Pentadecane (CAS) \$\$ n-Pentadec...	98302	000629-62-9	98
5	13.72	0.53	C:\Database\WILEY275.L 8-Heptadecene	124603	002579-04-6	99
			Heptadec-8-ene	124600	000000-00-0	98
			8-Heptadecene	124604	054290-12-9	98
6	13.85	0.64	C:\Database\WILEY275.L 8-Heptadecene	124604	054290-12-9	98
			Heptadec-8-ene	124600	000000-00-0	98
			8-Heptadecene	124603	002579-04-6	98
7	14.20	0.36	C:\Database\WILEY275.L Heptadecane (CAS) \$\$ n-Heptadec...	126476	000629-78-7	98
			Heptadecane (CAS) \$\$ n-Heptadec...	126473	000629-78-7	96
			Heptadecane (CAS) \$\$ n-Heptadec...	126474	000629-78-7	96
8	18.82	0.92	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid, methyl ester...	153622	000112-39-0	99
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153629	000112-39-0	98
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153609	000112-39-0	98
9	20.61	12.96	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	99
10	20.81	1.20	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	98

11	22.25	0.94	C:\Database\WILEY275.L 8-Octadecenoic acid, methyl est... 175222 026528-50-7 95 8-Octadecenoic acid, methyl est... 175221 026528-50-7 95 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163701 000112-80-1 93
12	22.41	0.74	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm... 141008 000057-10-3 95 PALMITIC ACID \$\$ HEXADECANOIC ACID 141082 000000-00-0 95 Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm... 141013 000057-10-3 95
13	22.86	0.51	C:\Database\WILEY275.L Octadecanoic acid, methyl ester... 176802 000112-61-8 95 Pentadecanoic acid, methyl este... 141021 007132-64-1 91 Octadecanoic acid, methyl ester... 176789 000112-61-8 91
14	24.25	38.19	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163703 000112-80-1 99 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163706 000112-80-1 97 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163702 000112-80-1 96
15	24.40	33.50	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163703 000112-80-1 99 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163706 000112-80-1 97 HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) 163698 000000-00-0 95
16	24.81	0.84	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163703 000112-80-1 94 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163704 000112-80-1 94 HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) 163698 000000-00-0 89
17	25.77	0.74	C:\Database\WILEY275.L 1-Docosene (CAS) 184639 001599-67-3 99 10-Heneicosene (c,t) 173799 000000-00-0 98 1-Heptadecene (CAS) \$\$ Hexahydr... 124592 006765-39-5 95
18	25.82	0.63	C:\Database\WILEY275.L 1-Docosene (CAS) 184639 001599-67-3 99 1-Octadecene (CAS) \$\$ .alpha.-O... 137616 000112-88-9 95 Cyclotetracosane (CAS) 203771 000297-03-0 93
19	26.17	0.69	C:\Database\WILEY275.L Cyclopropanoic acid, 2-octyl- (... 162189 056196-06-6 97 9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI... 150204 002423-10-1 95 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd... 214838 003443-84-3 81
20	26.20	0.39	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd... 214838 003443-84-3 96 Linoleic acid 162061 000060-33-3 89 9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)... 162049 000060-33-3 86
21	26.32	0.36	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163704 000112-80-1 94 9-Octadecenal, (Z)- (CAS) \$\$ CI... 150204 002423-10-1 64 HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1) 163698 000000-00-0 64
22	26.45	0.81	C:\Database\WILEY275.L 9-Octadecenoic acid (Z)- (CAS) ... 163704 000112-80-1 96 (R)-(-)-14-Methyl-8-hexadecyn-1-ol 137566 064566-18-3 92 1-Nonadecene (CAS) 150254 018435-45-5 92
23	26.84	0.68	C:\Database\WILEY275.L (Z)14-Tricosenyl formate 220118 077899-10-6 99 11-Hexacosyne (CAS) \$\$ HEXACOSY... 218293 034291-69-5 93 13-Hexacosyne (CAS) \$\$ HEXACOSY... 218292 034291-68-4 93

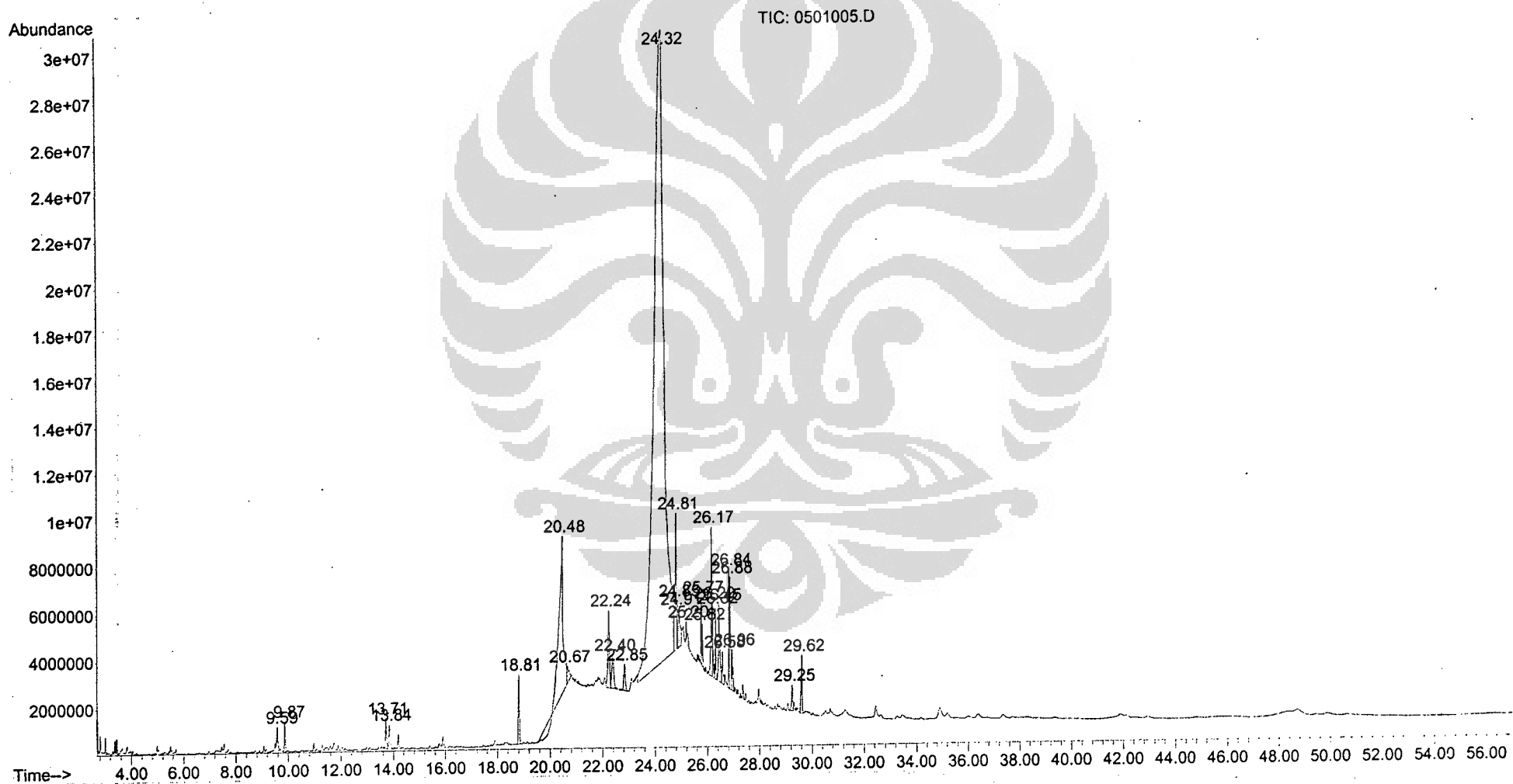
24	26.88	1.59	C:\Database\WILEY275.L				
			cis-11-Hexadecen-1-yl acetate	163745	000000-00-0	81	
			(Z)14-Tricosenyl formate	220118	077899-10-6	81	
			13-Octadecenal (spectrum disagr...	150209	056554-90-6	74	
25	26.96	0.36	C:\Database\WILEY275.L				
			1-Docosene (CAS)	184639	001599-67-3	98	
			10-Heneicosene (c,t)	173799	000000-00-0	98	
			Cyclotetracosane (CAS)	203771	000297-03-0	97	
26	26.99	0.27	C:\Database\WILEY275.L				
			Cyclotetracosane (CAS)	203771	000297-03-0	99	
			9-Hexacosene	219269	000000-00-0	95	
			10-Heneicosene (c,t)	173799	000000-00-0	92	
27	29.25	0.33	C:\Database\WILEY275.L				
			4ALPHA-METHYLCHOLEST-7-EN-3-ONE...	234189	013490-57-8	78	
			3-Ethylidenecholestane	234265	000000-00-0	64	
			7-(Trimethylsilyloxy)-3-[4-(tri...	233827	000000-00-0	52	
28	29.62	0.45	C:\Database\WILEY275.L				
			ERGOSTA-4,6,22-TRIEN-3BETA-OL \$...	233340	034026-93-2	87	
			2,8-diisopropyl-peri-xanthenoxa...	233230	133376-91-7	83	
			2-acetyl-8-isopropyl-peri-xanth...	233200	133376-93-9	83	



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0501005.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 16:14 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: B3  
Misc Info :  
Vial Number: 5



File : C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0501005.D  
Operator : TAZ  
Acquired : 6 Jun 2008 16:14 using AcqMethod MJARAK  
Instrument : GC MS E  
Sample Name: B3  
Misc Info :  
Vial Number: 5



Information from Data File:

File: C:\MSDCHEM\1\DATA\080606-A\0501005.D  
 Operator: TAZ  
 Date Acquired: 6 Jun 2008 16:14  
 Method File: MJARAK  
 Sample Name: B3  
 Misc Info:  
 Vial Number: 5

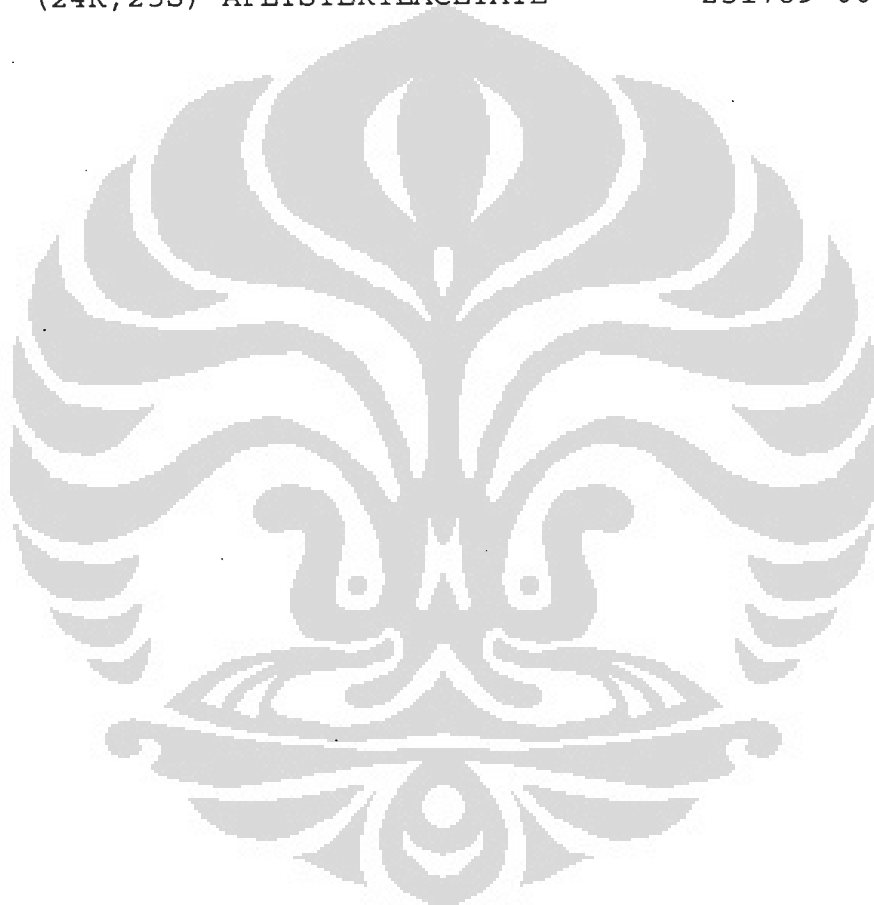
Search Libraries: C:\Database\WILEY275.L Minimum Quality: 100

Unknown Spectrum: Apex  
 Integration Events: Chemstation Integrator - autoint1.e

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	9.59	0.33	C:\Database\WILEY275.L 1-Tridecene (CAS) \$\$ n-Tridec-1...	67375	002437-56-1	91
			1-Tetradecanol (CAS) \$\$ Alfol 1...	100051	000112-72-1	87
			1-Hexadecanol (CAS) \$\$ Cetal \$\$...	128167	036653-82-4	87
2	9.87	0.33	C:\Database\WILEY275.L Pentadecane (CAS) \$\$ n-Pentadec...	98308	000629-62-9	98
			Pentadecane (CAS) \$\$ n-Pentadec...	98301	000629-62-9	98
			Pentadecane (CAS) \$\$ n-Pentadec...	98312	000629-62-9	98
3	13.71	0.42	C:\Database\WILEY275.L 8-Heptadecene	124603	002579-04-6	99
			8-Heptadecene	124604	054290-12-9	98
			Heptadec-8-ene	124600	000000-00-0	98
4	13.85	0.38	C:\Database\WILEY275.L 8-Heptadecene	124604	054290-12-9	98
			Heptadec-8-ene	124600	000000-00-0	98
			8-Heptadecene	124603	002579-04-6	98
5	18.82	0.86	C:\Database\WILEY275.L METHYL HEXADECANOATE \$\$ METHYL ...	153678	000000-00-0	99
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153607	000112-39-0	98
			Hexadecanoic acid, methyl ester...	153629	000112-39-0	98
6	20.48	7.10	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	99
7	20.67	0.37	C:\Database\WILEY275.L Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141012	000057-10-3	99
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141016	000057-10-3	98
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	98
8	22.25	1.48	C:\Database\WILEY275.L METHYL 9-OCTADECENOATE \$\$ METHY...	175277	000000-00-0	99
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175230	000112-62-9	99
			9-Octadecenoic acid (Z)-, methy...	175237	000112-62-9	98
9	22.40	0.78	C:\Database\WILEY275.L 8-Octadecenoic acid, methyl est...	175221	026528-50-7	95
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141013	000057-10-3	94
			Hexadecanoic acid (CAS) \$\$ Palm...	141008	000057-10-3	93
10	22.85	0.43	C:\Database\WILEY275.L Octadecanoic acid, methyl ester...	176801	000112-61-8	95
			Octadecanoic acid, methyl ester...	176789	000112-61-8	92
			Octadecanoic acid, methyl ester...	176792	000112-61-8	92

11	24.33	75.12	C:\Database\WILEY275.L					
			9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ...	163703	000112-80-1	99		
			9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ...	163706	000112-80-1	97		
			9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ...	163702	000112-80-1	94		
12	24.81	2.33	C:\Database\WILEY275.L					
			9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ...	163704	000112-80-1	92		
			1-Docosene (CAS)	184638	001599-67-3	64		
			9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ...	163700	000112-80-1	60		
13	24.85	0.59	C:\Database\WILEY275.L					
			9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ...	163703	000112-80-1	95		
			9,17-Octadecadienal, (Z) - (CAS)...	148348	056554-35-9	83		
			1-Docosene (CAS)	184639	001599-67-3	78		
14	24.91	0.75	C:\Database\WILEY275.L					
			9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ...	163703	000112-80-1	95		
			1-Docosene (CAS)	184639	001599-67-3	94		
			9-Octadecen-1-ol, (Z) - (CAS) \$\$...	151932	000143-28-2	87		
15	25.20	0.13	C:\Database\WILEY275.L					
			9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ...	163704	000112-80-1	96		
			9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ...	163703	000112-80-1	95		
			HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163698	000000-00-0	90		
16	25.77	0.48	C:\Database\WILEY275.L					
			1-Docosene (CAS)	184639	001599-67-3	99		
			1-Heptadecene (CAS) \$\$ Hexahydr...	124592	006765-39-5	95		
			1-Octadecene (CAS) \$\$ .alpha.-O...	137616	000112-88-9	95		
17	25.82	0.33	C:\Database\WILEY275.L					
			Cyclotetracosane (CAS)	203771	000297-03-0	98		
			9-Tricosene, (Z) - (CAS) \$\$ Musc...	194628	027519-02-4	96		
			1-Docosene (CAS)	184639	001599-67-3	95		
18	26.17	1.54	C:\Database\WILEY275.L					
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	214838	003443-84-3	93		
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2-hyd...	197040	004500-01-0	87		
			9-Octadecenoic acid (Z)-, 2,3-d...	214835	000111-03-5	86		
19	26.20	0.61	C:\Database\WILEY275.L					
			9,17-Octadecadienal, (Z) - (CAS)...	148348	056554-35-9	97		
			9,12-Octadecadienoic acid (Z,Z)...	162047	000060-33-3	95		
			9-Octadecenal, (Z) - (CAS) \$\$ CI...	150204	002423-10-1	94		
20	26.32	0.49	C:\Database\WILEY275.L					
			9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ...	163704	000112-80-1	92		
			HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163698	000000-00-0	55		
			CYCLOEICOSANE	162226	000000-00-0	43		
21	26.45	1.22	C:\Database\WILEY275.L					
			9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ...	163704	000112-80-1	96		
			Cyclopentadecanone, 2-hydroxy-	126229	004727-18-8	96		
			9,17-Octadecadienal, (Z) - (CAS)...	148348	056554-35-9	95		
22	26.58	0.41	C:\Database\WILEY275.L					
			9-Octadecenoic acid (Z) - (CAS) ...	163704	000112-80-1	95		
			9,17-Octadecadienal, (Z) - (CAS)...	148348	056554-35-9	91		
			HEPTADECENE-(8)-CARBONIC ACID-(1)	163698	000000-00-0	89		
23	26.83	0.88	C:\Database\WILEY275.L					
			(Z)14-Tricosenyl formate	220118	077899-10-6	81		
			Octadecenol (acinetobacter extr...	151937	000000-00-0	80		
			1,1'-Bicyclopentyl, 2-hexadecyl...	218289	055334-11-7	78		

24	26.88	1.18	C:\Database\WILEY275.L (Z)14-Tricosenyl formate	220118	077899-10-6	99
			11-Hexacosyne (CAS) \$\$ HEXACOSY...	218293	034291-69-5	91
			cis-11-Hexadecen-1-yl acetate	163745	000000-00-0	76
25	26.96	0.40	C:\Database\WILEY275.L Cyclotetracosane (CAS)	203771	000297-03-0	98
			10-Heneicosene (c,t)	173799	000000-00-0	95
			9-Hexacosene	219269	000000-00-0	95
26	29.25	0.37	C:\Database\WILEY275.L 4.alpha.,5-Cyclo-a-homo-5.alpha...	234242	000000-00-0	41
			23,24-METHANOCHOLEST-5-EN-3B-OL...	234197	000000-00-0	38
			2,12-BIS(PHENYLTHIS)CYCLODODECA...	233981	060774-80-3	25
27	29.62	0.70	C:\Database\WILEY275.L 2-acetyl-8-isopropyl-peri-xanth...	233200	133376-93-9	90
			2,8-diisopropyl-peri-xanthenoxa...	233230	133376-91-7	90
			(24R,25S)-APLYSTERYLACETATE	251789	000000-00-0	81







**LAMPIRAN V**  
**DATA PENUNJANG**

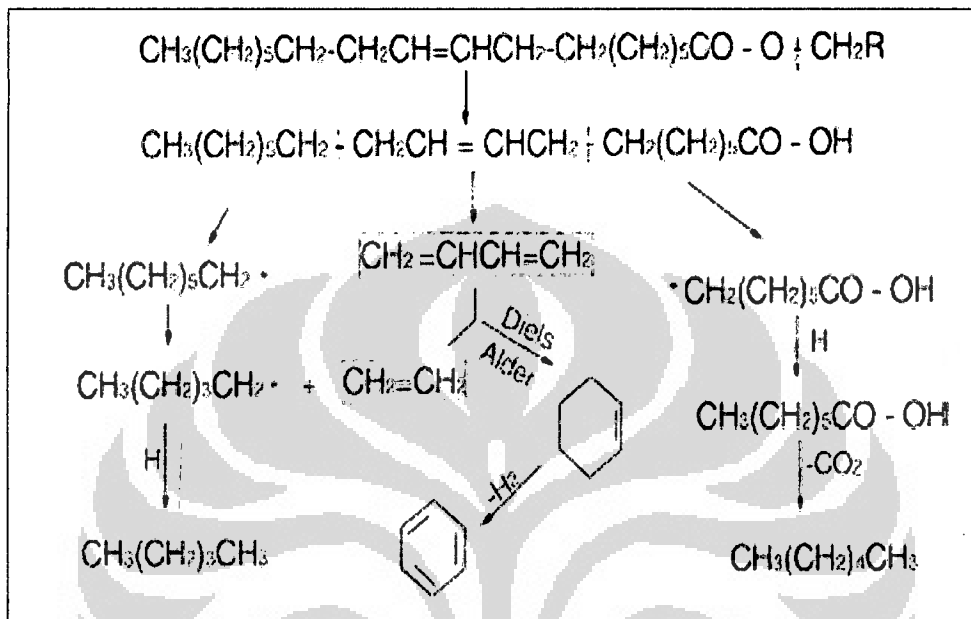
Lampiran 5.1.

Tabel Energi disosiasi ikatan antar atom<sup>[25]</sup>

Jenis Ikatan antar atom	Enegi disosiasi (Kkal/mol)
C=O	173.757
C-O	81.500
C-C	88
C=C	163
C-H	
• CH <sub>4</sub>	104
• CH <sub>3</sub> -CH <sub>2</sub> -H	98
• $\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{-CH-H} \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$	94.5
• CH <sub>2</sub> =CH-H	108

## Lampiran 5.2

Skema reaksi yang mungkin terjadi pada thermal cracking<sup>[31]</sup>



Gambar diatas menunjukkan reaksi yang mungkin terjadi pada thermal cracking:

### 1. Pemutusan Asam lemak dari rantai trigliserida

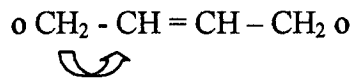
Pada tahap ini diketahui energi disosiasi C-O adalah 81.5 Kkal/mol. Energi lebih rendah bila dibandingkan ikatan antar atom pada SJO, sehingga akan terpotong terlebih dahulu. Pemotongan terjadi pada trigliserida dalam SJO menjadi senyawa asam, tepatnya menjadi asam lemak.

### 2. Terbentuknya radikal bebas

Setelah Asam lemak terbentuk maka kemungkinan akan terbentuk radikal bebas. Hal ini terjadi karena adanya pemutusan ikatan C-C secara homolitik

### 3. Terbentuknya senyawa tak jenuh

Tahap ini terjadi bersamaan dengan terbentuknya radikal bebas. Hal ini terjadi karena radikal bebas dalam rantai  $\text{CH}_2$  ujung akan menyerang C disebelahnya, karena kondisi yang tidak stabil.



4. Terbentuknya senyawa parafin

Parafin terbentuk karena radikal bebas mengambil 1 atom H

5. Terbentuknya alkena

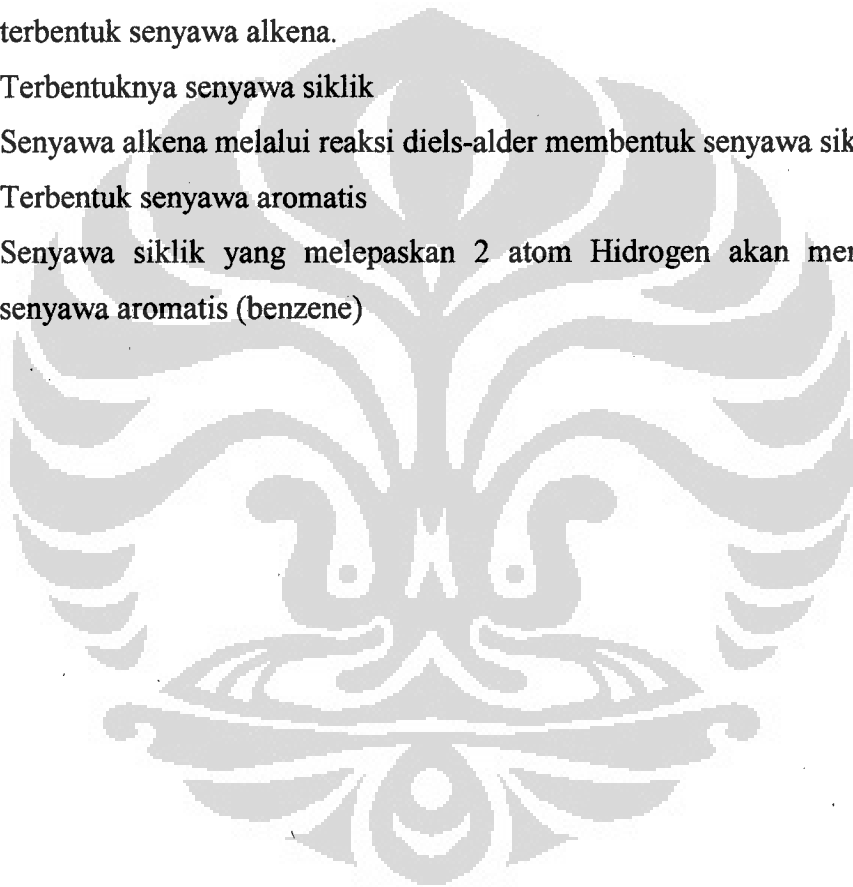
Setelah terbentuk senyawa hidrokarbon tak jenuh dengan jumlah 2 ikatan tak jenuh, akan terjadi pemutusan ikatan antara atom C-C lagi, sehingga terbentuk senyawa alkena.

6. Terbentuknya senyawa siklik

Senyawa alkena melalui reaksi diels-alder membentuk senyawa siklik

7. Terbentuk senyawa aromatis

Senyawa siklik yang melepaskan 2 atom Hidrogen akan membentuk senyawa aromatis (benzene)



### Lampiran 5.3. Tool Untuk analisa Spektrum FTIR<sup>[25]</sup>

#### 1. Daerah serapan ikatan antar atom C-H

Gugus	Daerah serapan	Keterangan
-CH <sub>2</sub> - -CH <sub>3</sub>	2960-2850(s)	Vibrasi valensi Umumnya terdiri dari 2-3 puncak
-CH <sub>2</sub> -	720(w)	Vibrasi rocking

#### 2. Daerah serapan ikatan rangkap Alkena

Gugus	Daerah serapan	Keterangan
C=C non konjugasi	1680-1620(v)	Lemah sesuai dengansimetri molekul
Konjugasi dengan aromatik	Sekitar 1625(m)	Lebih kuat dari pada C=C yang tidak terkonjugasi
Diene, triene	1650 dan 1600(s)	Puncak dengan frekuensi rendah, pada umumnya lebih kuat dan dapat menutup

#### 3. Daerah serapan ikatan C-O

Gugus	Daerah serapan	Keterangan
C-O	1050-1260	