

**STUDI REAKSI METILASI PADA SENYAWA n -OKTANOL
MENGUNAKAN DIMETIL KARBONAT**

SKRIPSI

**Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat mencapai
gelar Sarjana Sains (S.Si.) Program Studi Kimia pada
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Islam Indonesia
Yogyakarta**



Diajukan Oleh :

HERMAWAN NURWIJAYANTO

No Mhs : 16612036

**PROGRAM STUDI KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ISLAM INDONESIA
YOGYAKARTA
2020**

STUDI REAKSI METILASI PADA SENYAWA *n*-OKTANOL MENGUNAKAN DIMETIL KARBONAT

SKRIPSI

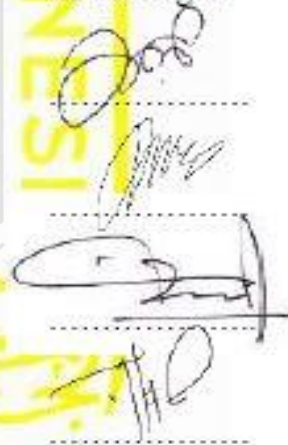
yang diajukan oleh :
HERMAWAN NURWIJAYANTO
No Mhs: 16612036

Telah dipertahankan dihadapan Panitia Penguji Skripsi
Prodi Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Islam Indonesia
Tanggal: 17 November 2020

Dewan Penguji

1. Nurcahyo Iman Prakoso, S.Si., M.Sc.
2. Dr. Dwiarto Rubiyanto, S.Si., M.Si.
3. Dr. Tatang Shabur Julianto, M.Si.
4. Ika Yanti, S.Si., M.Sc.

Tanda tangan



Mengetahui,
Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Islam Indonesia



Prof. Riyanto, S.Pd., M.Si., Ph.D.

SURAT PERNYATAAN BEBAS PLAGIARISME

Yang bertanda tangan dibawah ini :

Nama : Hermawan Nurwijayanto
NIM : 16612036
Fakultas/Prodi : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam/Kimia
Judul Skripsi : **STUDI REAKSI METILASI PADA SENYAWA *n*-OKTANOL MENGGUNAKAN DIMETIL KARBONAT**

“Dengan ini saya menyatakan bahwa dalam penulisan skripsi ini tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu perguruan tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya juga tidak terdapat karya yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam referensi. Apabila di kemudian hari terbukti bahwa pernyataan ini tidak benar, maka saya siap menerima hukuman/sanksi apapun sesuai peraturan yang berlaku.”

Yogyakarta, 22 November 2020

Yang menyatakan,



Hermawan Nurwijayanto

KATA PENGANTAR

Segala puji dan syukur ke hadirat Allah SWT yang telah memberikan rahmat dan hidayah-Nya kepada kita semua. Shalawat dan salam teruntuk Rasulullah Muhammad SAW beserta keluarga, sahabat, serta para pengikutnya yang telah berjuang mengantarkan umat ini menuju keadaan yang lebih baik dan jalan yang diridhoi oleh Allah SWT.

Terselesaikannya skripsi ini tentu tidak lepas dari bantuan segala pihak yang secara langsung ataupun tak langsung telah memberikan dorongan moral maupun material sehingga penulis dapat memulai, mengerjakan, hingga menyelesaikan skripsi ini. Untuk itu, penulis menyampaikan terima kasih kepada:

1. Bapak Fathul Wahid, S.T., M.Sc., P.h.D. selaku Rektor Universitas Islam Indonesia.
2. Bapak Prof. Riyanto, S.Pd., M.Si., Ph.D. selaku Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Islam Indonesia.
3. Ibu Prof. Dr. Is Fatimah, M.Si. selaku Ketua Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam.
4. Bapak Dr. Dwiarto Rubiyanto, S.Si., M.Si. selaku Ketua Program Studi Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Islam Indonesia serta selaku Dosen Pembimbing 2 skripsi penulis.
5. Bapak Nurcahyo Iman Prakoso, S.Si., M.Sc. selaku Dosen Pembimbing 1 skripsi penulis.
6. Ibu Dr. Noor Fitri, S.Si., M.Si. selaku Dosen Pembimbing Akademik.
7. Bapak, Ibu, dan Adik tercinta serta keluarga yang selalu mendoakan penulis untuk meraih kesuksesan.
8. Tb. Hilman, Ubaydillah, Dias, Dimas Mahisa, Dimas Adji, Alvin, Adit, Cahyo, Bagus dan keluarga Abakuya Futsal yang menemani penulis selama menempuh pendidikan di Yogyakarta.
9. Rekan-rekan seperjuangan Kimia 2016 yang banyak membantu penulis dalam menyelesaikan pendidikan.

10. Serta pihak-pihak lain yang tidak dapat disebutkan yang telah banyak membantu, penulis mengucapkan terimakasih sebanyak-banyaknya.

Dalam skripsi ini, penulis menyadari masih banyak kekurangan dan tidaklah sempurna seperti kata pepatah tak ada gading yang tak retak dan Kesempurnaan hanyalah milik Allah SWT. Oleh sebab itu apabila terdapat kekeliruan informasi dan penulisan pada skripsi ini, penulis mengharap ketulusan maaf dari pembaca. Tak lupa untuk memenuhi kekurangan skripsi ini penulis mengharapkan kritik dan saran yang membangun.

Besar harapan semoga skripsi ini dapat memberikan informasi dan manfaat dalam menambah ilmu pengetahuan untuk pembaca. Akhirnya, tiada kata yang dapat penulis sampaikan kecuali panjatan do'a, semoga Allah memberikan balasan yang lebih baik. Aamiin.

Yogyakarta, 16 Maret 2020

Penulis

STUDI REAKSI METILASI PADA SENYAWA *n*-OKTANOL MENGUNAKAN DIMETIL KARBONAT

INTISARI

Hermawan Nurwijayanto

NIM 16612036

Oktanol merupakan bahan dalam banyak produk minyak esensial dan biasa dibuat dengan sintesis. Oktanol biasa digunakan dalam pembuatan ester sebagai pembuat aroma dalam industri parfum untuk membuat berbagai tipe aroma buatan. Metil oktil eter merupakan suatu zat kimia yang dihasilkan dari sintesis metilasi *n*-oktanol. Metil oktil eter disintesis dengan mereaksikan *n*-oktanol dan dimetil karbonat (DMC) menggunakan metode refluks dengan katalis transfer fasa (TBAB) dan basa. Produk yang dihasilkan kemudian diekstraksi dengan menggunakan metil tert-butil eter (MTBE). Dalam penelitian ini dilakukan 4 jenis variasi, yaitu variasi jumlah katalis TBAB, jumlah DMC, jenis basa, dan lama waktu refluks. Berdasarkan hasil analisis diketahui bahwa kondisi optimal diperoleh dari reaksi menggunakan katalis TBAB 4 mmol, DMC 160 mmol, K₂CO₃, dengan waktu refluks 3 jam yang menghasilkan rendemen 38% dengan kemurnian sebesar 97,71%.

Kata kunci : *n*-oktanol, dimetil karbonat, metil oktil eter.

STUDY OF METHYLATION REACTION IN *n*-OCTANOL COMPOUNDS USING DIMETHYL CARBONATE

ABSTRACT

Hermawan Nurwijayanto

NIM 16612036

*Octanol is an ingredient in many essential oil products and is commonly made by synthesis. Octanol is commonly used in the manufacture of esters as a fragrance maker in the perfume industry to create various types of artificial aromas. Methyl octyl ether is a chemical substance produced from the synthesis of methylation of *n*-octanol. Methyl octyl ether was synthesized by reacting *n*-octanol and dimethyl carbonate (DMC) using reflux method with phase transfer catalyst (TBAB) and base. The resulting product is then extracted using methyl tert-butyl ether (MTBE). In the study, 4 types of variations were carried out, namely variations in the amount of TBAB catalyst, the amount of DMC, the type of base, and the length of time for reflux. Based on the results of the analysis, it is known that the optimal conditions are obtained from the reaction using a catalyst TBAB 4 mmol, DMC 160 mmol, K₂CO₃, with a reflux time of 3 hours which produces a yield of 38% with a purity of 97,71%.*

*Keyword : *n*-octanol, dimethyl carbonate, methyl octyl ether .*

DAFTAR ISI

HALAMAN SAMPUL.....	ii
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
SURAT PERNYATAAN BEBAS PLAGIARISME	iii
KATA PENGANTAR.....	iv
INTISARI	vi
ABSTRACT	vii
DAFTAR ISI.....	viii
DAFTAR GAMBAR.....	x
DAFTAR TABEL	xi
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan Penelitian	3
1.4 Manfaat Penelitian	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1 Tinjauan Pustaka	5
2.2 Hipotesis.....	7
BAB III DASAR TEORI	8
3.1 <i>n</i> -oktanol	8
3.2 Metilasi.....	8
3.3 Dimetil Karbonat.....	9
3.4 <i>Tetra-n-Buthylammonium Bromide</i> (TBAB)	10
3.5 Refluks	11
3.6 <i>Gas Chromathography-Mass Spectrometry</i> (GC-MS)	11
3.7 Spektroskopi FTIR	12
3.8 Spektroskopi NMR	13
BAB IV METODOLOGI PENELITIAN	15
4.1 Bahan dan Peralatan.....	15
4.1.1 Bahan	15
4.1.2 Peralatan.....	15

4.2	Prosedur Penelitian.....	15
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN.....		17
5.1	Variasi Jumlah Katalis	17
5.2	Variasi Jumlah Dimetil Karbonat (DMC).....	23
5.3	Variasi Jenis Basa	29
5.4	Variasi Waktu Refluks	31
5.5	Sintesis Metil Oktil Eter Optimum	33
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN		35
6.1	Kesimpulan	35
6.2	Saran.....	35
DAFTAR PUSTAKA.....		36
LAMPIRAN.....		39



DAFTAR GAMBAR

Gambar 1. Struktur <i>n</i> -oktanol	8
Gambar 2. Struktur Dimetil Karbonat.....	9
Gambar 3. Struktur <i>Tetra-n-Buthylammonium Bromide</i>	10
Gambar 4. Kromatogram Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi TBAB 4 mmol	18
Gambar 5. Spektra Massa Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi TBAB 4 mmol	18
Gambar 6. Pola Fragmentasi Metil Oktil Eter	19
Gambar 7. Mekanisme Reaksi Metil Oktil Eter.....	21
Gambar 8. Kromatogram Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi TBAB 2 mmol (a) dan 0 mmol (b)	22
Gambar 9. Kromatogram Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi DMC 20 mmol (a) dan 40 mmol (b)	24
Gambar 10. Kromatogram Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi DMC 120 mmol (a) dan 160 mmol (b)	25
Gambar 11. Spektra FTIR Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi DMC 120 mmol	26
Gambar 12. Spektra H-NMR Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi DMC 160 mmol	27
Gambar 13. Struktur Metil Oktil Eter	28
Gambar 14. Kromatogram Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi Basa NaOH dan Na ₂ CO ₃	30
Gambar 15. Kromatogram Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi Waktu Refluks 3, 7,5 dan 10 Jam	32
Gambar 16. Diagram Hasil Kumulatif Variasi Vs Kemurnian	34
Gambar 17. Diagram Hasil Kumulatif Variasi Vs Rendemen.....	34

DAFTAR TABEL

Tabel 1. Komposisi Bahan dan Reagen	16
Tabel 2. Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi Jumlah Katalis TBAB	23
Tabel 3. Hasil Analisis Spektra FTIR Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi DMC 120 mmol.....	26
Tabel 4. Hasil Analisis Spektra H-NMR Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi DMC 160 mmol.....	27
Tabel 5. Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi Jumlah DMC	28
Tabel 6. Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi Jenis Basa	31
Tabel 7. Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi Waktu Refluks.....	33



BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Isu tentang polusi, limbah, pemanasan global sering diberitakan dalam media masa. Di era modern ini, isu-isu tersebut menjadi isu yang sensitif. Peningkatan kadar polutan yang relatif besar, membuat pembuat kebijakan, aktivis lingkungan dan juga masyarakat umum mulai memikirkan masa depan bumi ini. Hal ini melahirkan istilah ramah lingkungan. Dewasa ini, hampir setiap kegiatan, baik kegiatan sosial maupun industri, dituntut untuk memenuhi kriteria ramah lingkungan. Usaha tersebut lebih dikenal dengan istilah *green chemistry*, yaitu sejumlah prinsip kimia dalam merancang, menggunakan atau memproduksi bahan kimia untuk mengurangi pemakaian atau produksi zat berbahaya (Nurbaity, 2011).

Green chemistry adalah suatu falsafah atau konsep yang mendorong desain dari sebuah produk ataupun proses yang mengurangi penggunaan dan produksi zat-zat (substansi) toksik dan atau berbahaya. Prinsip *green chemistry* merupakan konsep yang dibuat untuk mencegah polusi karena dapat diterapkan secara langsung oleh peneliti saat ini. Konsep ini difokuskan untuk menempatkan aspek lingkungan sebagai prioritas utama oleh peneliti (Sharma, 2008). Prinsip *green chemistry* diusulkan oleh Anastas dan Werner (1998) yang sebagian besar berisi konsep pencegahan polusi lingkungan akibat proses sintesis dengan judul “*The Twelve Principle of Green Chemistry*”.

Prinsip *green chemistry* pernah diterapkan oleh Ouk, *et al.* (2002) dalam penelitiannya sintesis O-metilasi *p*-kresol menggunakan reagen dimetil karbonat dan K_2CO_3 sebagai katalis transfer fasa. Prinsip *green chemistry* juga diterapkan oleh Zhao, *et al.* (2012) yang menggunakan DMC sebagai reagen N-metilasi pada senyawa NH-heterosiklik. Prinsip *green chemistry* yang dilakukan pada penelitian ini yaitu mendesain proses sintesis yang aman yang dapat dilakukan dengan meminimalkan paparan atau meminimalkan bahaya terhadap orang yang menggunakan bahan kimia tersebut, serta penggunaan katalis yang berperan pada

peningkatan selektifitas, mampu mengurangi penggunaan reagen, dan mampu meminimalkan penggunaan energi dalam suatu reaksi.

Reaksi metilasi adalah reaksi pengganti suatu atom atau molekul dengan gugus metil. Sumber elektrofil metil yang biasa digunakan berasal dari reagen metil halida (CH_3X , $\text{X} = \text{I}, \text{Br}, \text{Cl}$), dimetil sulfat (DMS) dan phosgene (COCl_2). Tetapi reagen tersebut menghasilkan produk samping yang bersifat toksik dan tidak ramah lingkungan. Selain itu, reagen-reagen tersebut memiliki toksisitas tinggi dan bersifat karsinogenik. Dimetilsulfat (LD_{50} 0,44 g/kg) dan metil halida (LD_{50} 0,076 g/kg) memiliki nilai letal dosis lebih rendah daripada dimetil karbonat (LD_{50} 13,8 g/kg) sehingga dimetil karbonat tergolong lebih ramah lingkungan daripada kedua senyawa tersebut. Hal ini terlihat dari produk samping yang dihasilkan berupa karbondioksida dan methanol (Tundo, 2002).

Dimetil karbonat (DMC) adalah senyawa ramah lingkungan pada proses metilasi dan karbonilasi sebagai pengganti DMS, metil halida, dan fosgen. Dimetil karbonat (DMC) bersifat tidak beracun dan memiliki biodegradabilitas yang tinggi sehingga banyak digunakan sebagai reagen sintesis yang ramah lingkungan dan pencegah polusi pada sumbernya (Tundo, 2002). Dimetil karbonat (DMC) pernah digunakan oleh Yulinda *et al.* (2013) sebagai reagen untuk reaksi metilasi pada asam galat menggunakan katalis basa K_2CO_3 dan katalis transfer fasa *Tetra-n-buthylammonium Bromide* (TBAB) dan sintesis metil eugenol menggunakan katalis basa dan transfer fasa dengan rendemen 95-95% oleh Prakoso, *et al.* (2016) serta reaksi metil esterifikasi beberapa senyawa asam karbosilat dengan katalis K_2CO_3 -TBACl oleh Chau, *et al.* (2013). Dimetil karbonat (DMC) pernah juga digunakan oleh Saeful (2019) sebagai reagen dalam sintesis O-Metilasi pada senyawa mentol, serta digunakan oleh Wafiya (2019) dalam sintesis senyawa 1-metoksi naftalen.

Berdasarkan latar belakang yang telah dibahas maka dalam penelitian ini dilakukan studi terhadap selektifitas reaksi pada Sintesis O-Metilasi dari *n*-oktanol berbasis *green chemistry* menggunakan dimetil karbonat (DMC) dengan variasi jumlah katalis *Tetra-n-buthylammonium Bromide* (TBAB), jumlah dimetil karbonat (DMC), jenis basa, dan lama waktu refluks.

1.2 Rumusan Masalah

Permasalahan yang diajukan dalam penelitian ini dapat dirumuskan sebagai berikut :

1. Bagaimana pengaruh rasio mol katalis *Tetra-n-buthylammonium Bromide* (TBAB) yang digunakan terhadap reaksi O-Metilasi pada *n*-oktanol?
2. Bagaimana pengaruh jumlah mol dimetil karbonat (DMC) yang digunakan terhadap reaksi O-Metilasi pada *n*-oktanol?
3. Bagaimana pengaruh jenis basa yang digunakan terhadap reaksi O-Metilasi pada *n*-oktanol?
4. Bagaimana pengaruh lama waktu refluks yang dilakukan terhadap reaksi O-Metilasi pada *n*-oktanol?
5. Berapa rendemen yang dihasilkan dari reaksi optimal?

1.3 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini adalah:

1. Mengetahui pengaruh rasio mol katalis *Tetra-n-buthylammonium Bromide* (TBAB) yang digunakan terhadap reaksi O-Metilasi pada *n*-oktanol.
2. Mengetahui pengaruh jumlah mol dimetil karbonat (DMC) yang digunakan terhadap reaksi O-Metilasi pada *n*-oktanol.
3. Mengetahui pengaruh jenis basa yang digunakan terhadap reaksi O-Metilasi pada *n*-oktanol.
4. Mengetahui pengaruh lama waktu refluks yang dilakukan terhadap reaksi O-Metilasi pada *n*-oktanol.
5. Mengetahui besar rendemen hasil sintesis dari reaksi optimal.

1.4 Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan dapat memberikan kontribusi sebagai solusi alternatif dalam sintesis organik berbasis *green chemistry*. Selain itu juga diharapkan dapat memberikan informasi dan sumber edukasi dalam bidang sintesis kimia organik bagi masyarakat maupun peneliti selanjutnya mengenai penggunaan reagen yang aman serta jumlah katalis, jumlah DMC, jenis basa, dan

waktu refluks yang berbeda untuk mendapatkan rendemen hasil yang paling optimal pada O-Metilasi *n*-oktanol.



BAB II TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Tinjauan Pustaka

Prinsip *green chemistry* atau kimia hijau menjadi rujukan dalam sintesis senyawa organik. Salah satu prinsip dari *green chemistry* adalah penggunaan pelarut yang aman atau ramah lingkungan. Menurut Tundo (2002), dimetil karbonat (DMC) merupakan senyawa yang memenuhi prinsip tersebut karena menjadi reagen alternatif pengganti metil halida atau dimetil sulfat yang bersifat korosif dalam proses metilasi. Tundo (2002) menyebutkan bahwa pada temperature refluks ($T = 90\text{ }^{\circ}\text{C}$), DMC berfungsi sebagai agen metoksi karbonil pada kondisi basa dan adanya gugus nukleofil. Sedangkan pada temperatur yang lebih tinggi ($T = 160\text{ }^{\circ}\text{C}$), DMC dapat berfungsi sebagai agen metilasi pada kondisi yang sama. Dimetil karbonat mempunyai sifat kemoselektifitas serta tingkat efisien yang tinggi pada proses karbometoksilasi pada rantai alkohol dari fenol menggunakan katalis H_2SO_4 atau DBU (1,8-diazabicyclo-[5.4.0]undec-8-ene) dengan rendemen lebih dari 98% pada kondisi temperature refluks (Bernini, *et al.*, 2007).

Beberapa peneliti telah melakukan sintesis berbasis *green chemistry* seperti yang telah dilakukan oleh Asnawati, *et al.*, (2015) melakukan penelitian yaitu metilasi eugenol menggunakan dimetil karbonat (DMC) dan bentonite sebagai katalis. Hasil reaksi berupa larutan berwarna kuning bening dengan rendemen sebesar 25.71%.

Ouk, *et al.* (2002), melaporkan bahwa dimetil karbonat dapat digunakan sebagai agen metilasi pada senyawa fenolik. Reaksi dilakukan pada temperatur $90\text{--}100\text{ }^{\circ}\text{C}$ dibawah tekanan atmosfer pada reaktor dengan pendingin refluks menggunakan katalis basa K_2CO_3 dan katalis transfer fasa. Katalis K_2CO_3 dihilangkan dengan penyaringan sedangkan katalis transfer fasa dipisahkan dengan ekstraksi cair-cair dengan HCl ($\text{pH}=1$) dan tert-butil metil eter (MTBE). Berdasarkan reaksi tersebut diketahui bahwa reaksi menggunakan katalis basa K_2CO_3 dan katalis transfer fasa $(\text{Bu})_4\text{NBr}$ atau *tetra-n-butylammonium bromide*

(TBAB) menghasilkan rendemen lebih tinggi daripada katalis yang lain. Proses refluks selama 5 jam pada temperatur sistem 93 °C dengan perbandingan fenol: KTF: DMC: K₂CO₃ (1:0,6:30:0,75 mol) menghasilkan rendemen sebesar 99%. Sedangkan pada metilasi p-kresol selama 5 jam pada kondisi refluks dengan perbandingan p-cresol:KTF:DMC:K₂CO₃= 1:0,5:16:1,5 mol menghasilkan rendemen sebesar 99%. Penurunan perbandingan mol DMC dan K₂CO₃ menjadi 10 mol dan 0,75 mol dengan proses refluks selama 5 jam juga menghasilkan rendemen sebesar 99%.

Prakoso, *et al.* (2016) melaporkan bahwa penggunaan DMC dan katalis TBAB-K₂CO₃ untuk metilasi eugenol dan vanillin mampu menghasilkan rendemen sebesar 95-96%. Metilasi eugenol dengan proses refluks dilakukan selama 3 jam menggunakan perbandingan eugenol: TBAB: DMC (1:0,6:16 mmol) menghasilkan rendemen sebesar 96,16%, sedangkan penurunan perbandingan DMC menjadi 0,4 mmol tidak mengalami perubahan signifikan pada hasil rendemen yaitu sebesar 96,12%. Sintesis viratraldehid dari vanillin juga dilakukan dengan proses refluks selama 10 jam dengan perbandingan vanilin:TBAB:DMC= 1:0,6:24 mmol menghasilkan rendemen sebesar 95,23%. Perbedaan waktu pada proses refluks terjadi karena struktur senyawa yang berbeda dimana pada eugenol terdapat gugus alil yang merupakan gugus penyumbang elektron, sedangkan pada struktur senyawa vanilin terdapat gugus aldehid yang merupakan gugus penarik elektron. Gugus penarik elektron pada vanilin menyebabkan kemampuan nukleofil berkurang sehingga reaksi berlangsung lama, sedangkan gugus penyumbang elektron akan meningkatkan kepadatan elektron gugus -OH yang menyebabkan kemampuan nukleofil meningkat sehingga reaksi berlangsung lebih cepat (Prakoso, *et al.*, 2016).

Zheng, *et al.* (2005) telah melakukan esterifikasi senyawa asam salisilat menggunakan dimetil karbonat (DMC) dan katalis SBA-15 silica dengan gugus propilsulfonik. Proses esterifikasi selama 6 jam pada suhu 473 K menghasilkan rendemen 98,09% dengan selektivitas 96,21%. Katalis yang digunakan adalah SB-15-SO₃H-20 seberat 0,13 gram sedangkan asam salisilat dan DMC yang digunakan masing-masing 10 mmol dan 60 mmol.

Saeful (2019) melaporkan bahwa penggunaan katalis TBAB dalam reaksi O-Metilasi pada senyawa mentol menggunakan DMC dapat menghasilkan produk yang lebih optimal dibandingkan dengan menggunakan tween 80, dengan perbandingan mentol:DMC:TBAB (10:160:2) mmol diperoleh rendemen sebesar 98,65% dengan kemurnian 100%. Sementara itu Wafiya (2019) juga melaporkan bahwa reaksi metilasi dengan DMC terhadap naftol menggunakan katalis TBAB lebih baik dibandingkan dengan tween 80, diperoleh senyawa 1-metoksi naftalen dengan rendemen sebesar 21,854%. Penggunaan katalis TBAB dengan konsentrasi semakin besar maka akan menghasilkan rendemen yang semakin besar juga.

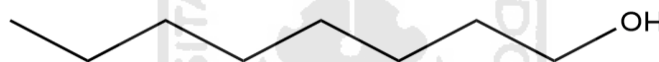
2.2 Hipotesis

1. Sintesis O-metilasi pada *n*-oktanol dapat dilakukan dengan metode refluks menggunakan katalis *Tetra-n-buthylammonium Bromide* (TBAB).
2. Oktanol dapat dimetilasi karena mengandung gugus Hidroksi (OH).
3. Jika rasio katalis *Tetra-n-buthylammonium Bromide* (TBAB) dan dimetil karbonat (DMC) yang digunakan bertambah maka akan meningkatkan persen rendemen dari hasil sintesis.
4. Penggunaan 3 jenis basa yang berbeda akan memberikan hasil rendemen yang berbeda.
5. Semakin lama waktu reaksi akan meningkatkan rendemen hasil sintesis.

BAB III DASAR TEORI

3.1 *n*-oktanol

Oktanol adalah senyawa kimia yang biasa dikenal dengan lemak alkohol (oktil alkohol), merupakan bahan dalam banyak produk minyak esensial dan biasa dibuat dengan sintesis. Wujud senyawa berupa cairan bening tak berwarna, tidak campur dengan air, memiliki aroma yang kuat dan menusuk. Oktanol biasa digunakan sebagai agen pengontrol busa dan biasa digunakan dalam pembuatan ester sebagai pembuat aroma dalam industri parfum untuk membuat berbagai tipe aroma buatan. (Haskins, 2013).



Gambar 1. Struktur *n*-oktanol

Oktanol sebaiknya tidak masuk dalam tubuh dalam jumlah yang besar karena dapat menyebabkan efek merugikan. Oktanol dapat menyebabkan iritasi pada kulit dan mata, menimbulkan rasa panas dan kemerahan, dan disarankan untuk memakai sarung tangan beserta kaca mata keselamatan dalam aktivitas menggunakan oktanol. Penghirupan berlebih dari oktanol akan menyebabkan iritasi pada jalur pernafasan dan dapat mempengaruhi sistem syaraf pusat, menyebabkan rasa pusing hingga kehilangan kesadaran. Penanganan bagi yang terkena kontak dengan oktanol adalah dicuci dengan banyak air dan sabun, serta dibawa pada ruangan terbuka bagi yang menghirupnya (Haskins, 2013).

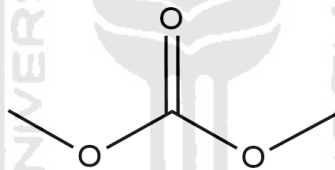
3.2 Metilasi

Metilasi merupakan reaksi pergantian suatu atom atau molekul dengan gugus metil. Sumber-sumber elektrofil metil yang umum digunakan berasal dari reagen dimetil sulfat (DMS) atau metil halida (CH_3X) serta Dimetil karbonat (DMC) (Tundo. P, 2001). Ada dua jenis reaksi metilasi yaitu O-Metilasi dan C-

metilasi. Reaksi O-Metilasi merupakan penambahan gugus metil yang terjadi pada atom O pada gugus hidroksi dan dapat terjadi dengan adanya katalis basa (Asnawati. D dkk, 2015), sedangkan reaksi C-metilasi merupakan reaksi penambahan gugus metil pada ikatan rangkap C=C yang dapat terjadi dengan katalis asam (Lidyawati, 2012).

3.3 Dimetil Karbonat

Dimetil karbonat (DMC) merupakan reagen dan pelarut yang non polusi dalam sintesis kimia organik. Molekul dimetil karbonat memiliki dua pusat aktif yaitu alkil dan karbonil karbon yang reaktivitasnya dapat diatur menggunakan suhu tanpa menghasilkan produk samping berupa garam anorganik. Dimetil karbonat bisa digunakan sebagai pengganti bahan kimia berbahaya seperti Dimetilsulfat (DMS) atau metil klorida untuk reaksi metilasi (Tundo. P, 2001).



Gambar 2. Struktur Dimetil Karbonat

Dimetil karbonat (DMC) ($\text{CH}_3\text{O}-\text{CO}-\text{OCH}_3$) adalah senyawa serbaguna sebagai alternatif ramah lingkungan yang menarik untuk mengganti dua *methyling agent* (dimetil sulfat dan fosgen) untuk proses metilasi dan karbonilasi. DMC tidak hanya sebagai tempat pereaksi metilasi seperti Dimetil sulfat dan fosgen, DMC memiliki tingkat penguapan yang cepat, kompatibilitas pelarut dengan karakteristik yang baik (Zidong, 1997).

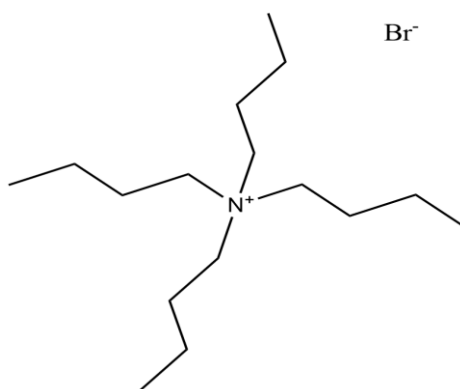
Dimetil karbonat (DMC) berupa cairan tak berbau, tak berwarna, cairan sedikit manis, tidak larut dalam air, larut dalam alkohol, eter, keton dan hampir larut disemua pelarut bahan organik. Reaktivitas DMC akan lebih maksimal pada suhu 90°C dimana metoksikarbonil terjadi, sedangkan pada suhu reaksi yang lebih tinggi reaksi metilasi akan terganggu oleh berbagai nukleofil. Saat dihasilkan oleh proses yang bersih DMC memiliki beberapa kelebihan dibanding reagen yang lain

yaitu bersifat non toksik dan *biodegradable* yang menjadikan DMC sebagai reagen hijau untuk digunakan dalam sintesis yang mencegah polusi pada sumbernya. Metilasi menggunakan DMC merupakan reaksi katalitik yang menggunakan padatan (karbonat basa atau zeolit), sehingga menghindari pembentukan garam anorganik yang tidak diinginkan sebagai produk samping (Tundo dan Selva, 2000).

3.4 *Tetra-n-Buthylammonium Bromide (TBAB)*

Katalis transfer fasa (KTF) adalah katalisator yang memfasilitasi perpindahan reaktan dari satu fasa ke fase lain pada saat reaksi terjadi. KTF sendiri merupakan bentuk khusus dari katalisis heterogen. Reaktan ionik sering larut dalam fasa berair tapi tidak larut dalam fase organik tanpa katalis fase transfer, KTF berfungsi seperti deterjen untuk melarutkan garam ke dalam fase organik, katalisis ini mengacu pada percepatan reaksi pada penambahan katalis fase-transfer (Makosza, 2000).

Tetrabutylammonium bromide (TBAB) adalah garam ammonium kuarterner dengan penyeimbang yaitu bromide sehingga dapat digunakan sebagai katalis transfer fasa. TBAB digunakan untuk reaksi kimia yang berlangsung pada dua fasa yang berbeda polaritasnya, sehingga dibutuhkan TBAB sebagai katalis transfer fasa untuk membantu perpindahan reaktan yang larut dalam air melintasi antarmuka pelarut menuju fasa organik sehingga reaksi homogen dapat terjadi (Ledon, 1979).



Gambar 3. Struktur *Tetra-n-Buthylammonium Bromide*

3.5 Refluks

Refluks merupakan ekstraksi dengan pelarut pada temperatur titik didihnya, selama waktu tertentu dan jumlah pelarut yang relatif konstan dengan adanya pendingin balik. Ekstraksi refluks digunakan untuk mengekstraksi bahan-bahan yang tahan terhadap pemanasan (Sudjadi, 1986).

Prinsip dari metode refluks adalah pelarut volatil yang digunakan akan menguap pada suhu tinggi, namun akan didinginkan dengan kondensor sehingga pelarut yang tadinya dalam bentuk uap akan mengembun pada kondensor dan turun lagi ke dalam wadah reaksi sehingga pelarut akan tetap ada selama reaksi berlangsung. Penarikan komponen kimia yang dilakukan dengan cara sampel dimasukkan kedalam labu alas bulat bersama-sama dengan cairan penyari lalu dipanaskan, uap cairan penyari terkondensasi pada kondensor bola menjadi molekul-molekul cairan penyari yang akan turun kembali menuju labu alas bulat, akan menyari kembali sampel yang berada pada labu alas bulat. Demikian seterusnya berlangsung secara berkesinambungan sampai penyarian sempurna (Sudjadi, 1986).

3.6 *Gas Chromathography-Mass Spectrometry (GC-MS)*

Kromatografi Gas-Spektrometri Massa adalah metode kombinasi antara kromatografi gas dan spektrometri massa yang bertujuan untuk menganalisis berbagai senyawa dalam suatu sampel. Kromatografi ini memiliki prinsip kerja masing-masing, namun keduanya dapat digabungkan untuk mengidentifikasi suatu senyawa baik secara kualitatif maupun secara kuantitatif (Sumarno, 2001).

Prinsip kerja dari alat GC-MS yaitu dengan memisahkan komponen-komponen dari suatu cuplikan kolom yang selanjutnya masuk ke dalam *Mass Spectrometry*. Cara kerja dari GC adalah suatu fase gerak yang berbentuk gas mengalir di bawah tekanan melewati pipa yang dipanaskan dan disalut dengan fase diam cair atau dikemas dengan fase diam cair yang disalut pada suatu penyangga padat. Analit tersebut dimuatkan ke bagian atas kolom melalui suatu portal injeksi yang dipanaskan. Suhu oven dijaga atau diprogram agar meningkat secara bertahap. Ketika sudah berada dalam kolom, terjadi proses pemisahan antar

komponen. Pemisahan ini akan bergantung pada lamanya waktu relatif yang dibutuhkan oleh komponen-komponen tersebut di fase diam (Sparkman *et al.*, 2011). Di dalam *Mass Spectrometry* cuplikan ditembak dengan berkas elektron dan diubah menjadi ion-ion muatan positif yang bertenaga tinggi dan pecah menjadi ion-ion yang lebih kecil, lepasnya elektron dari molekul atau komponen-komponen menghasilkan radikal kation. Ion-ion molekul, ion-ion pecahan, dan ion-ion radikal pecahan dipisahkan oleh ion pembelokan dalam medan magnet yang berubah sesuai dengan massa muatannya. Perubahan tersebut menimbulkan arus (arus ion) pada kolektor yang sebanding dengan limpahan relatifnya. Kemudian dicatat sebagai spektra massa yang merupakan gambaran antara limpahan relatif dengan rasio massa/muatan (m/z) (Sastrohamidjojo, 2005).

3.7 Spektroskopi FTIR

Analisis yang sering digunakan dalam identifikasi karakteristik gugus fungsi adalah dengan spektroskopi FTIR (*Fourier Transform Infra Red*). Spektroskopi FTIR merupakan teknik analisis yang sangat berguna dan banyak dimanfaatkan dalam analisa berbagai produk pangan dikarenakan analisisnya relatif cepat, hasil pengukuran yang akurat, preparasinya yang tidak terlalu rumit dan mudah dikerjakan oleh siapa saja tanpa perlu keahlian khusus (Hashim *et al.*, 2010).

Frekuensi inframerah biasanya dinyatakan dalam satuan bilangan gelombang (*wavenumber*), yang didefinisikan sebagai banyaknya gelombang per sentimeter. Spektroskopi secara otomatis membaca sejumlah radiasi yang menembus sampel dengan kisaran frekuensi tertentu dan merekam pada kertas berapa persen radiasi yang ditransmisikan. Radiasi yang diserap oleh molekul muncul sebagai pita pada spektrum (Fannyda. R, 2014).

Dalam spektroskopi FTIR sinar inframerah dilewatkan pada sampel lalu diukur fraksi radiasi yang terabsorpsi pada panjang gelombang menghasilkan spektrum yang menunjukkan informasi kualitatif. Struktur kimia dan bentuk ikatan molekul serta gugus fungsional tertentu suatu sampel yang diuji menjadi dasar bentuk spektrum yang akan diperoleh dari hasil analisis (Sari. M, 2011).

3.8 Spektroskopi NMR

Spektroskopi resonansi magnetic inti (NMR) merupakan metode analisis struktur molekul menggunakan perputaran inti muatan yang menghasilkan medan magnetic. Inti suatu unsur tertentu yang mempunyai spin akan menghasilkan medan magnet. Metode ini memberikan gambaran mengenai jenis atom, jumlah, maupun lingkungan atom hidrogen (^1H NMR) maupun karbon (^{13}C NMR). Spektroskopi NMR proton mengukur momen magnet atom hidrogennya. Sinyal spectrum yang diperoleh menunjukkan banyaknya proton di bagian-bagian molekul. Spektroskopi ^{13}C NMR menunjukkan sejumlah karbon yang terdapat dalam molekul dengan semua pergeseran kimia (Hart, 1983).

NMR (*Nuclear Magnetic Resonance*) merupakan salah satu instrument yang digunakan untuk menentukan struktur dari senyawa organik maupun anorganik. Spektrofotometer NMR pada dasarnya merupakan spektrofotometri absorpsi. Prinsip dari NMR yaitu absorpsi radiasi elektromagnetik daerah frekuensi radio oleh suatu sampel, pada frekuensi yang tergantung dari sifat-sifat sampel. Suatu plot dari frekuensi puncak-puncak absorpsi versus intensitas puncak memberikan spektrum NMR. Spektroskopi ini didasarkan pada medan magnet yang berasal dari spin inti atom yang bermuatan listrik (Sudjadi, 1985).

Spektroskopi resonansi magnetik inti (nuclear magnetic resonance, NMR) merupakan teknik pengukuran yang dapat digunakan untuk menentukan struktur senyawa organik berdasarkan medan magnet yang berasal dari spin inti senyawa (Rouessac, 2007). Spektroskopi NMR bekerja berdasarkan serapan gelombang radio oleh inti-inti senyawa dalam sebuah medan magnet yang kuat sehingga menyebabkan terjadinya fenomena resonansi. Hasil pengukuran spektroskopi NMR berupa nilai geseran kimia (*chemical shift*) (Hart et al., 1997). Pergeseran kimia adalah perbedaan frekuensi absorpsi yang disebabkan oleh perbedaan letak proton (Solomon, 2010). Pergeseran kimia dapat digunakan untuk mengidentifikasi dan menentukan letak gugus fungsi dalam struktur senyawa organik. Nilai pergeseran kimia dapat dinyatakan dalam besaran medan atau frekuensi dengan simbol δ dalam satuan ppm dan bergantung pada lingkungan kimia suatu proton (Sastrohamidjojo, 2001).

Dalam spektroskopi NMR, karakteristik absorpsi energy oleh perputaran inti dalam medan magnet yang kuat, ketika diradiasi oleh medan yang lebih lemah dan singkat, memungkinkan identifikasi atom dalam molekul. Absorpsi terjadi ketika inti tersebut bertransisi dari satu garis sejajar dalam medan ke dalam garis sejajar lain (Willard *et al.*, 1988).

Prinsip dasar spektroskopi NMR yakni inti dari setiap isotope tertentu memiliki gerakan berputar di sekeliling sumbunya. Perputaran partikel berenergi atau sirkulasinya, menimbulkan kejadian magnetis sepanjang sumbu perputaran. Jika inti diletakkan diluar medan magnet maka momen magnetisnya dapat sejajar atau melawan medan magnet (Willard *et al.*, 1988).



BAB IV

METODOLOGI PENELITIAN

4.1 Bahan dan Peralatan

4.1.1 Bahan

Bahan-bahan yang digunakan dalam penelitian ini adalah asam *n*-Oktan-1-ol, Dimetil karbonat (DMC), *Tetra-n-butylammonium bromide* (TBAB), Kalium karbonat (K_2CO_3), Natrium karbonat (Na_2CO_3), Natrium hidroksida (NaOH), Asam sulfat (H_2SO_4) 1%, aquades, Natrium sulfat anhidrat ($Na_2SO_4 \cdot 5H_2O$), MTBE (Metil tert-butyl eter), kertas saring, dan kertas pH.

4.1.2 Peralatan

Peralatan yang digunakan dalam penelitian ini adalah labu leher tiga 100 mL Pyrex, kondensor, hot plate, magnetic stirrer, corong pisah 250 mL, corong gelas, neraca analitik, gelas beker 50 mL, pipet volume 10 mL, pipet volume 1 mL, pipet tetes, propipet, gelas beker 100 mL Pyrex, sendok sungsang, instrumen GC-MS, instrumen NMR, spektrofotometer FTIR dan pompa air.

4.2 Prosedur Penelitian

Pada penelitian ini dilakukan 4 variasi, diantaranya yaitu variasi jumlah katalis, jumlah DMC, jenis basa, dan waktu refluks. Lalu dari variasi tersebut ditentukan mana yang paling optimal untuk sintesis O-Metilasi pada *n*-oktanol. Katalis yang digunakan dalam penelitian ini adalah *Tetra-n-butylammonium bromide* (TBAB). Proses sintesis dilakukan dengan metode refluks. Komposisi bahan dan reagen yang ditambahkan seperti pada tabel berikut ini :

Tabel 1. Komposisi Bahan dan Reagen

Running	Variasi	Reaktan		Katalis	Basa			Waktu (Jam)
		<i>n</i> -oktanol	DMC	TBAB	K ₂ CO ₃	Na ₂ CO ₃	NaOH	
1	Jumlah Katalis	10	80	0	7,5	0	0	5
				2				
				4				
2	Jumlah DMC	10	20	Optimal	7,5	0	0	5
			40					
			120					
			160					
3	Jenis Basa	10	Optimal	Optimal	7,5	-	-	5
					-	7,5	-	5
					-	-	7,5	5
4	Waktu Refluks	10	Optimal	Optimal	Optimal			3
								5
								7,5
								10

(Satuan dalam mmol)

Hasil refluks kemudian didinginkan sambil distirer selama 1-1,5 jam. Lalu ditambahkan MTBE dan distirer kembali selama 45-60 menit. Kemudian dimasukkan kedalam corong pisah dan diasamkan dengan penambahan H₂SO₄ 1% sampai pH < 3 dan diekstraksi menggunakan aquades sebanyak 3x20 mL. Kemudian ambil lapisan organiknya dan ditambahkan Na₂SO₄ anhidrat. Setelah itu dipisahkan dan ditampung lalu dikeringkan. Selanjutnya dianalisis dengan GC-MS, NMR, dan Spektrofotometer FTIR. Selanjutnya dipilih jumlah katalis, jumlah DMC, jenis basa, dan waktu refluks yang paling optimal.

BAB V

HASIL DAN PEMBAHASAN

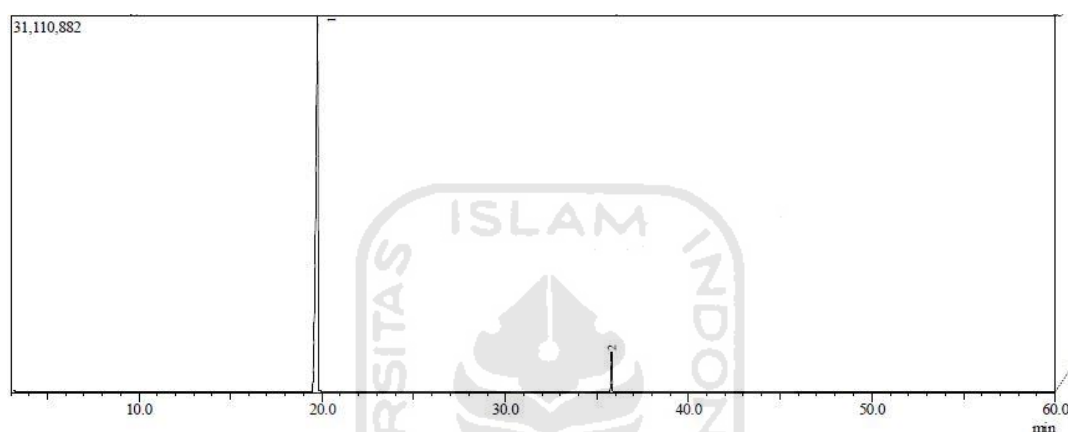
Penelitian ini mengenai “Studi Reaksi Metilasi Pada Senyawa *n*-Oktanol Menggunakan Dimetil Karbonat”. Pada penelitian ini digunakan senyawa *n*-oktanol sebagai *starting material* dalam proses metilasi *n*-oktanol menjadi senyawa metil oktil eter dengan menggunakan reagen dimetil karbonat (DMC). Proses sintesis metil oktil eter ini dilakukan dengan metode refluks. Refluks merupakan ekstraksi dengan pelarut pada temperatur titik didihnya, selama waktu tertentu dan jumlah pelarut yang relatif konstan dengan adanya pendingin balik (Sudjadi, 1986). Dalam penelitian ini, dilakukan 4 jenis variasi untuk mencari hasil yang optimal pada proses metilasi *n*-oktanol. Variasi yang dilakukan yaitu variasi jumlah katalis, jumlah DMC, jenis basa, dan waktu refluks. Sedangkan untuk *n*-oktanol yang digunakan pada setiap variasi jumlahnya tetap, yaitu sebanyak 10 mmol.

5.1 Variasi Jumlah Katalis

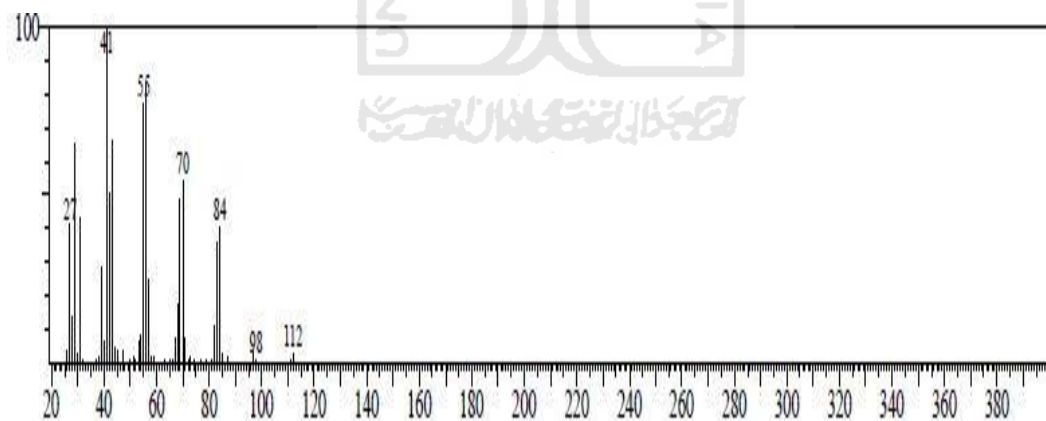
Pada tahap ini proses sintesis metil oktil eter dilakukan dengan variasi jumlah katalis. Katalis yang digunakan yaitu *Tetra-*n*-Buthylammonium Bromide* (TBAB). Untuk variasi jumlah katalis TBAB yang digunakan yaitu ada 3, yaitu 0, 2, dan 4 mmol. Dalam tahap ini jumlah DMC yang digunakan yaitu sebanyak 80 mmol, jenis basa yang digunakan yaitu K_2CO_3 sebanyak 7,5 mmol, dan proses refluks dilakukan selama 5 jam. Hasil refluks setelah itu diekstrak dengan metil tersier butyl eter (MTBE). Kemudian disaring dalam corong pisah dan ditambahkan H_2SO_4 1% sampai pH < 3. Lalu diekstraksi dengan aquades, diambil lapisan atasnya, dan ditambahkan dengan Na_2SO_4 anhidrat untuk menghilangkan sisa aquades atau pelarut.

Sintesis metil oktil eter dengan katalis TBAB 4 mmol menghasilkan produk berupa cairan dengan berat 1,2904 gram. Produk yang dihasilkan berwarna kuning bening. Selanjutnya larutan yang didapat diidentifikasi menggunakan GC-MS untuk mengetahui jumlah senyawa dan jenis senyawa yang

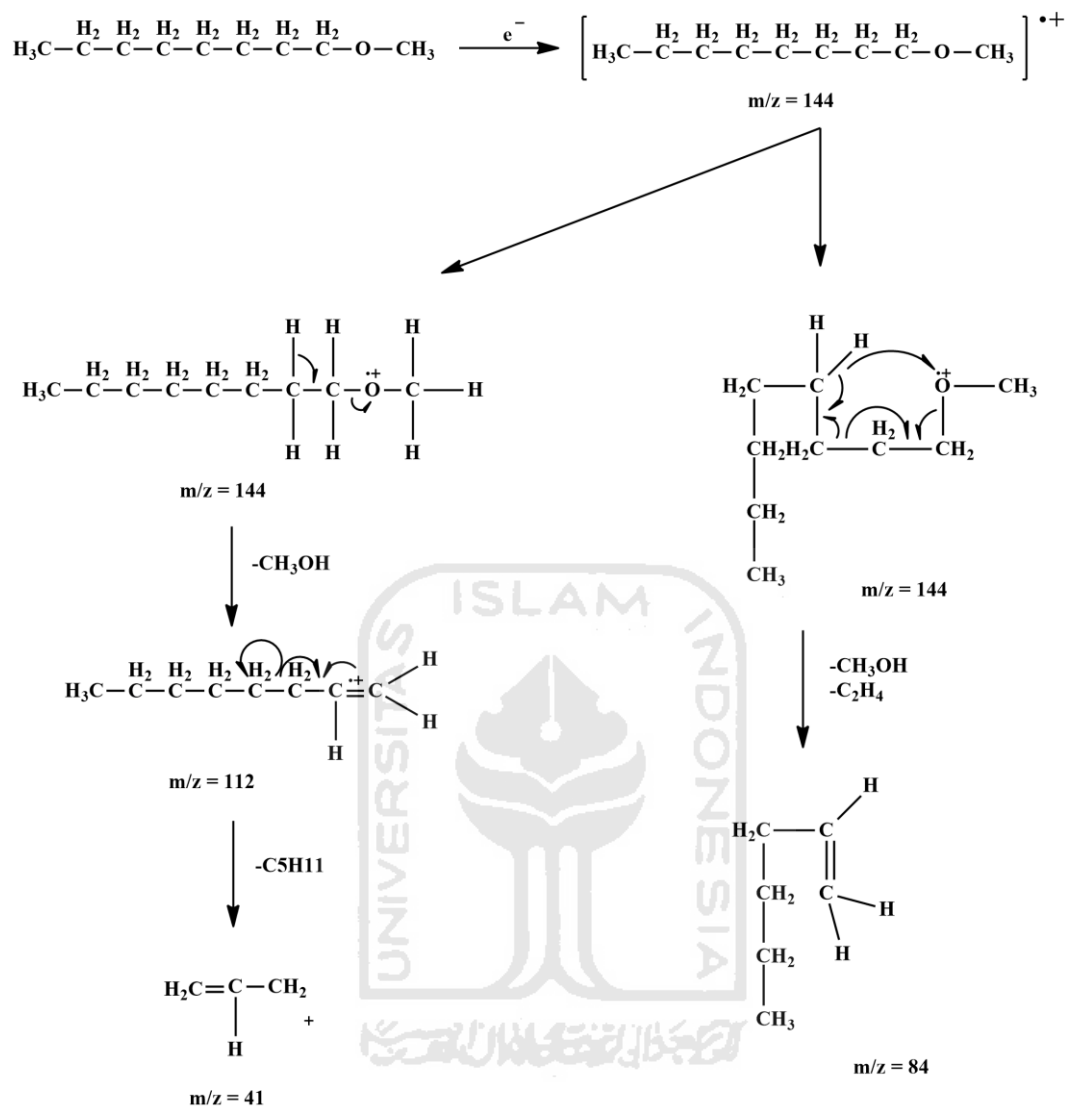
terdapat pada produk yang diperoleh tersebut. Dari hasil identifikasi menggunakan GC-MS menghasilkan kromatogram pada Gambar 4 yang menunjukkan 1 puncak dominan pada waktu retensi 19,772 menit dengan luas area sebesar 95,11% yang diperkirakan merupakan senyawa metil oktil eter. Hal ini diperkuat dengan spektrum massa dari puncak 1 pada kromatogram yang disajikan pada Gambar 5.



Gambar 4. Kromatogram Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi TBAB 4 mmol



Gambar 5. Spektra Massa Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi TBAB 4 mmol



Gambar 6. Pola Fragmentasi Metil Oktil Eter

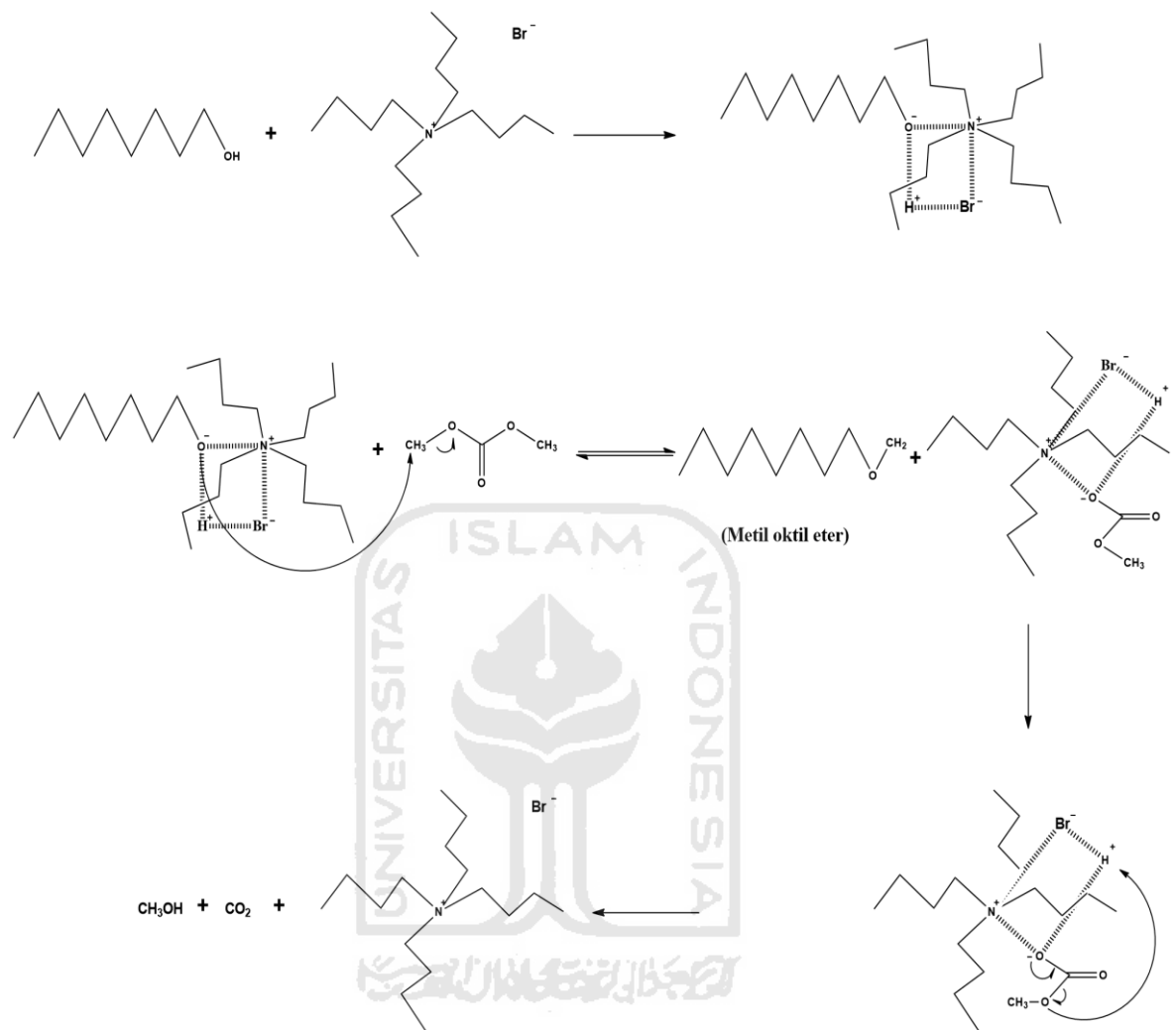
Spektra massa pada Gambar yang memiliki waktu retensi 19,772 menit diprediksi merupakan senyawa metil oktil eter. Hal ini diperlihatkan dari pola fragmentasi yang dihasilkan yang disajikan pada Gambar 6. Fragmen ion molekuler melepas molekul radikal metanol ($-\text{CH}_3\text{OH}$) menghasilkan fragmen dengan $m/z = 112$. Puncak ion molekuler lemah dan hampir tidak terdeteksi sehingga tidak muncul dalam hasil fragmentasi spektra tersebut. Kemudian fragmen $m/z = 112$ mengalami fragmentasi melepaskan molekul radikal $-\text{C}_5\text{H}_{11}$ menghasilkan fragmen dengan $m/z = 41$ yang merupakan *base peak*. Selain itu,

metil oktil eter juga mengalami fragmentasi melepaskan molekul radikal metanol ($-\text{CH}_3\text{OH}$) dan $-\text{C}_2\text{H}_4$ yang menghasilkan fragmen dengan $m/z = 84$.

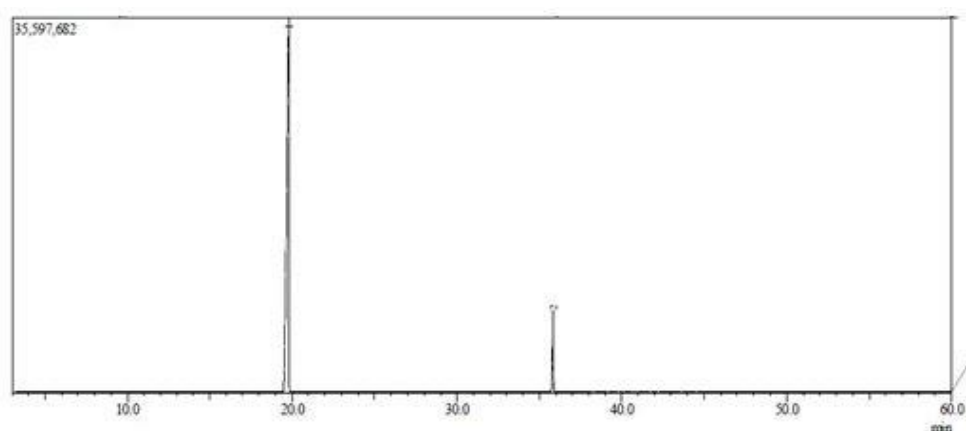
Reaksi metilasi *n*-oktanol menggunakan DMC didasarkan pada reaksi sintesis eter Williamson yang merupakan reaksi substitusi nukleofilik bimolekuler ($\text{S}_{\text{N}}2$). DMC memiliki 2 sisi aktif dimana masing-masing sisi aktif tersebut selektif terhadap nukleofil yang berbeda. Gugus karbonil merupakan elektrofil yang kuat karena terpolarisasi oleh muatan positif dan hibridisasi sp^2 , sedangkan gugus metil bersifat elektrofil lemah dengan hibridisasi sp^3 . Pada prinsipnya, suatu nukleofil yang kuat akan bereaksi dengan elektrofil yang kuat. DMC bersifat sebagai elektrofil yang memiliki tiga pusat reaktif yaitu satu gugus karbonil dan dua gugus metil yang akan bereaksi dengan nukleofil (Prakoso *et al.*, 2016). Pada reaksi metilasi *n*-oktanol menggunakan dimetil karbonat, gugus metil diharapkan dapat bereaksi dengan gugus nukleofil dari ion oktanoat dan membentuk produk turunan eter. Sehingga nukleofilisitas ion oktanoat dikurangi dengan cara menggunakan basa lemah K_2CO_3 .

Proses reaksi metilasi *n*-oktanol dimulai dengan adanya kesetimbangan antara *n*-oktanol dan ion oktanoat dalam fasa air. Kemudian dilanjutkan proses pertukaran ion oktanoat dengan kation ammonium kuartener sehingga terjadi substitusi nukleofilik dalam fasa organik dimana produk eter yaitu metil oktil eter dan katalis transfer fasa akan didapatkan kembali pada proses akhir reaksi. Produk samping dari proses metilasi *n*-oktanol dengan menggunakan DMC ini berupa metanol dan karbon dioksida.

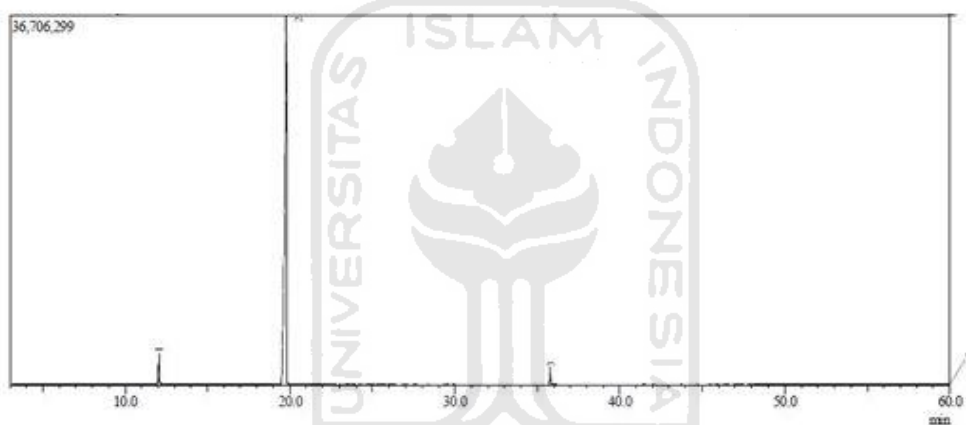
Katalis TBAB merupakan katalis garam ammonium kuartener yang berfungsi sebagai katalis transfer fasa. Proses substitusi nukleofilik dengan katalis transfer fasa ini berlangsung terus menerus sampai semua nukleofil habis bereaksi. Mekanisme reaksi sintesis metil oktil eter dengan DMC dimungkinkan terjadi seperti yang disajikan pada Gambar 7.



Gambar 7. Mekanisme Reaksi Metil Oktil Eter



a. TBAB 2 mmol



b. TBAB 0 mmol

Gambar 8. Kromatogram Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi TBAB 2 mmol (a) dan 0 mmol (b)

Hasil sintesis metil oktil eter dengan menggunakan katalis TBAB 2 mmol menghasilkan produk berupa cairan berwarna bening dengan berat sebesar 0,9435 gram. Pada kromatogram yang ditunjukkan pada Gambar 8 menunjukkan sintesis metil oktil eter menggunakan katalis TBAB 2 mmol menghasilkan 1 puncak dominan pada waktu retensi 19,803 menit dengan luas area sebesar 91,48%.

Sedangkan hasil sintesis metil oktil eter menggunakan katalis TBAB 0 mmol atau tanpa katalis TBAB menghasilkan produk berupa cairan berwarna bening dengan berat 1,0582 gram. Pada kromatogram yang ditunjukkan pada Gambar 8 menunjukkan sintesis metil oktil eter dengan katalis TBAB 0 mmol

atau tanpa menggunakan katalis TBAB menghasilkan 1 puncak dominan pada waktu retensi 19,776 menit dengan luas area sebesar 93,61%.

Hasil sintesis metil oktil eter pada variasi jumlah katalis TBAB menghasilkan produk dengan tingkat kemurnian dan rendemen seperti yang disajikan pada Tabel 2.

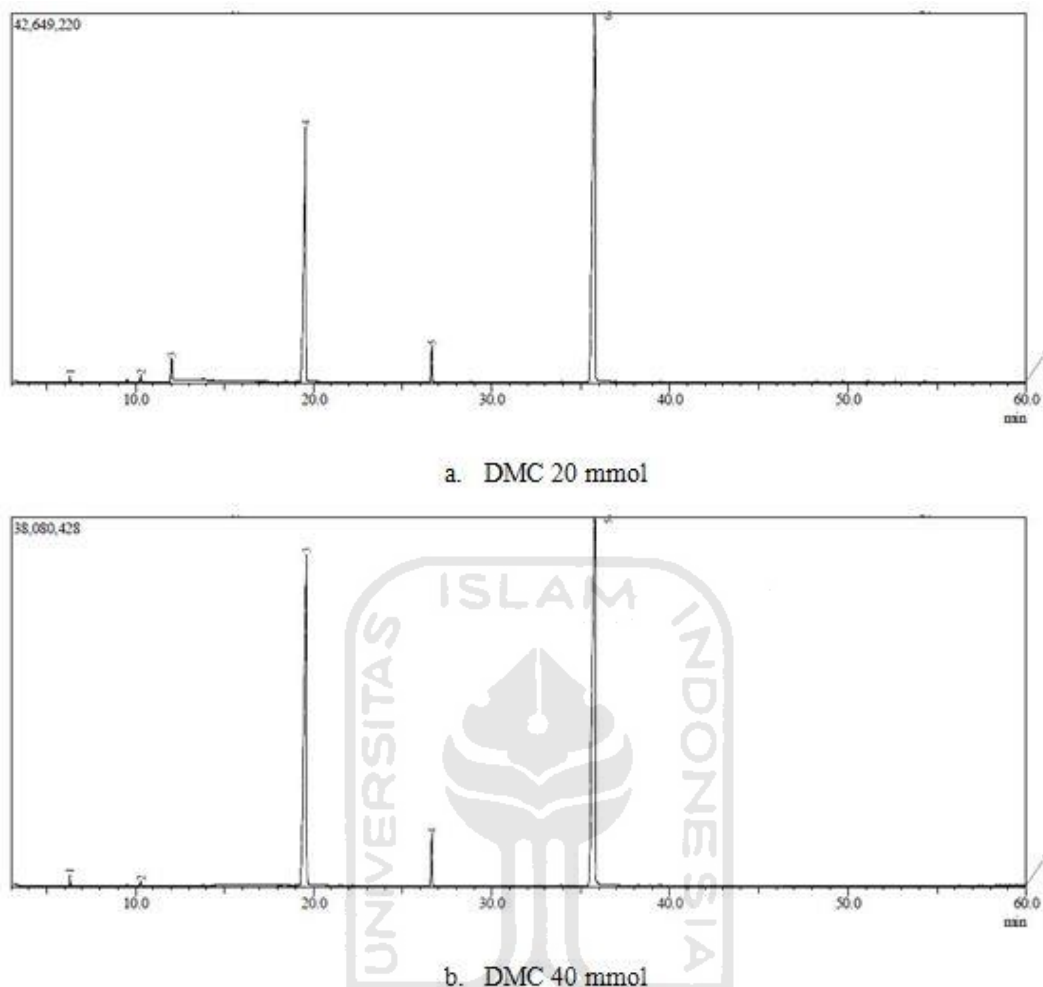
Tabel 2. Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi Jumlah Katalis TBAB

<i>n</i> -Oktanol (mmol)	Katalis TBAB (mmol)	DMC (mmol)	Basa	Waktu Refluks (Jam)	Kadar Metil Oktil Eter (%)	Rendemen (%)
10	4	80	K ₂ CO ₃	5	95,11	85
10	2	80	K ₂ CO ₃	5	91,48	60
10	0	80	K ₂ CO ₃	5	93,61	69

Dari Tabel yang diperoleh dari hasil sintesis metil oktil eter pada variasi jumlah katalis TBAB menunjukkan bahwa pada variasi katalis TBAB 4 mmol memiliki tingkat kemurnian 95,11% dengan rendemen sebesar 85%. Kemudian pada variasi katalis TBAB 2 mmol memiliki tingkat kemurnian 60% dengan rendemen sebesar 60%. Sedangkan pada variasi katalis TBAB 0 mmol, produk memiliki tingkat kemurnian 93,61% dengan rendemen sebesar 69%. Dari ketiga variasi tersebut maka kondisi optimum dari sintesis metil oktil eter pada variasi jumlah katalis TBAB yaitu pada katalis TBAB 4 mmol.

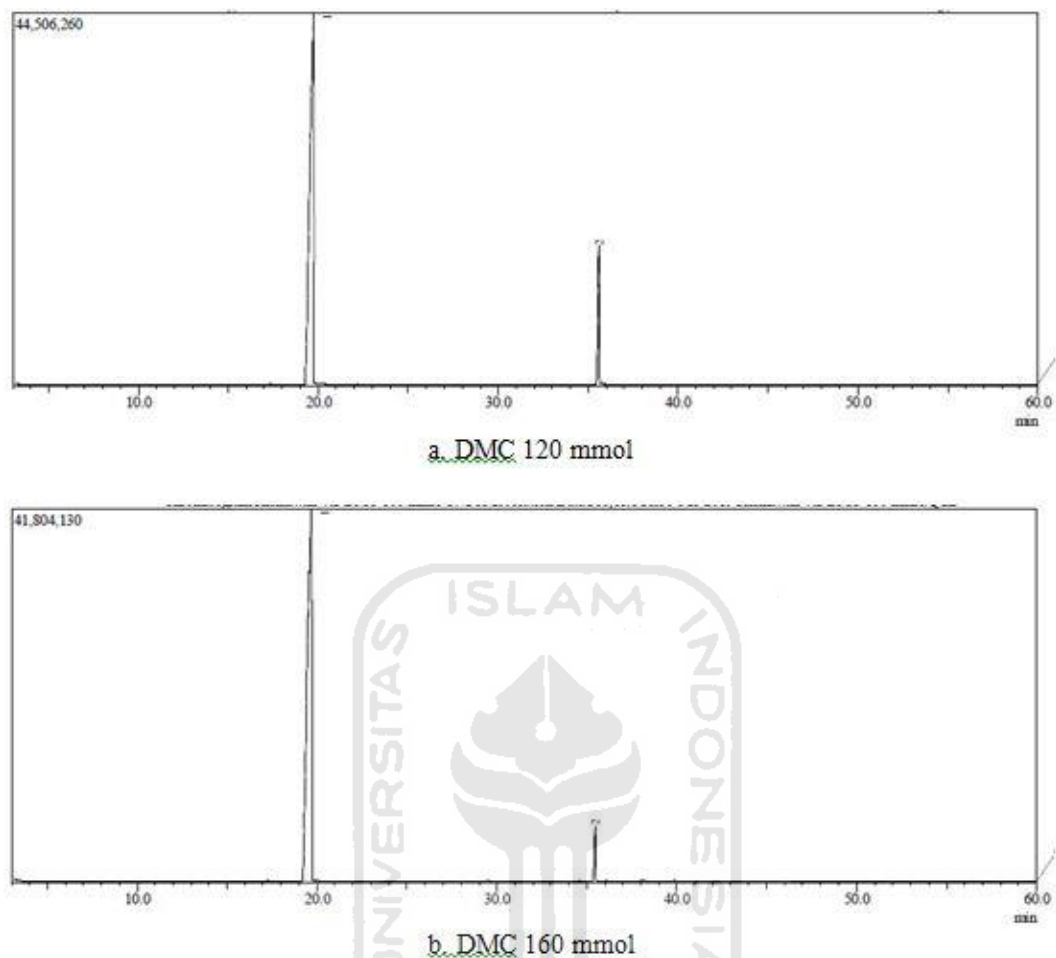
5.2 Variasi Jumlah Dimetil Karbonat (DMC)

Pada tahap ini proses sintesis metil oktil eter dilakukan dengan variasi jumlah DMC. Terdapat 4 variasi jumlah DMC, yaitu 20, 40, 120, dan 160 mmol. Dalam penelitian ini *n*-oktanol berperan sebagai pereaksi pembatas. Semakin besar jumlah DMC yang digunakan diharapkan dapat memperbesar probabilitas gugus metil yang masuk menjadi produk. Pada tahap ini katalis TBAB yang digunakan yaitu sebanyak 4 mmol sedangkan jenis basa yang digunakan yaitu K₂CO₃ 7,5 mmol dengan proses refluks selama 5 jam. Perlakuan selanjutnya tetap sama dengan tahap sebelumnya.



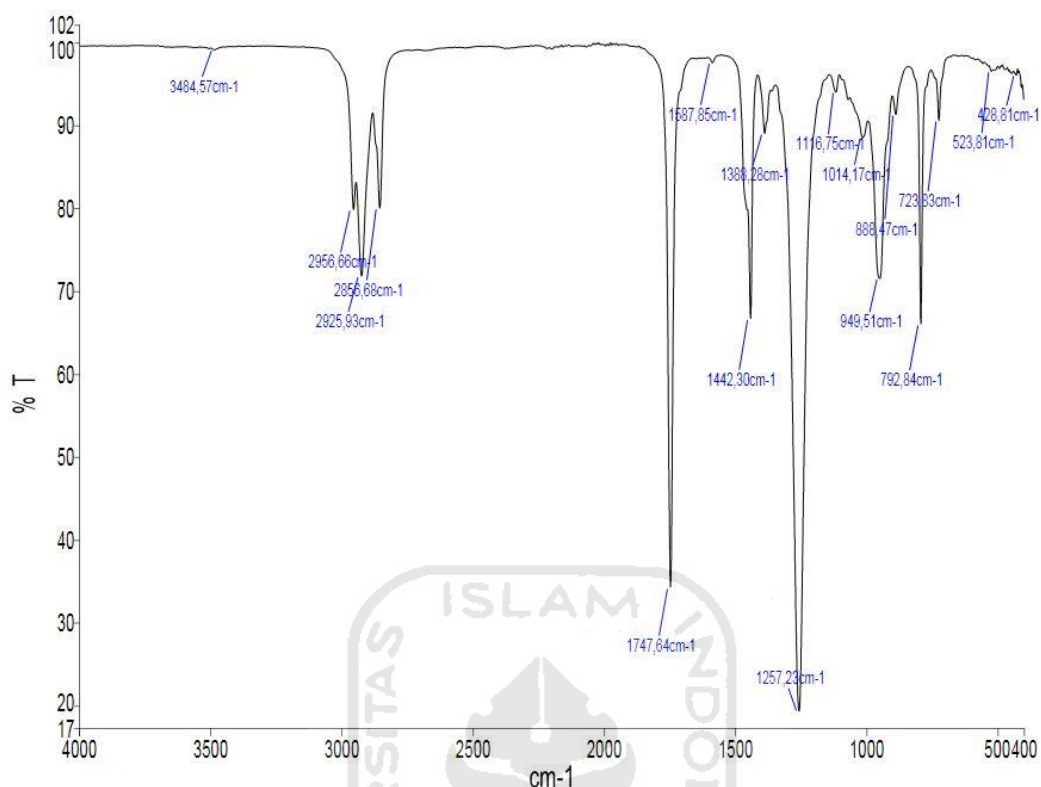
Gambar 9. Kromatogram Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi DMC 20 mmol (a) dan 40 mmol (b)

Sintesis metil oktil eter pada variasi jumlah DMC 20 mmol menghasilkan produk berupa cairan berwarna kuning bening dengan berat 0,4085 g. Sedangkan sintesis metil oktil eter menggunakan DMC 40 mmol menghasilkan produk berupa cairan berwarna kuning bening seberat 0,6794 g. Pada variasi DMC 20 mmol produk memiliki kemurnian sebesar 33,46% dengan besar rendemen sebesar 9%. Sedangkan pada variasi DMC 40 mmol memiliki kemurnian sebesar 42,36% dengan besar rendemen yaitu 20%. Kromatogram sintesis metil oktil eter variasi jumlah DMC 20 dan 40 mmol disajikan pada Gambar 9.



Gambar 10. Kromatogram Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi DMC 120 mmol (a) dan 160 mmol (b)

Pada sintesis metil oktil eter variasi jumlah DMC 120 mmol menghasilkan produk berupa cairan berwarna bening dengan berat 1,057 g. Sedangkan sintesis metil oktil eter menggunakan DMC 160 mmol menghasilkan produk berupa cairan berwarna bening dengan berat 0,81 g. Pada variasi DMC 120 mmol produk memiliki kemurnian sebesar 88,01% dengan rendemen sebesar 65%. Sedangkan pada variasi DMC 160 mmol diperoleh produk dengan kemurnian 96,33% dengan rendemen sebesar 54%. Kromatogram sintesis metil oktil eter variasi jumlah DMC 120 dan 160 mmol disajikan pada Gambar 10.



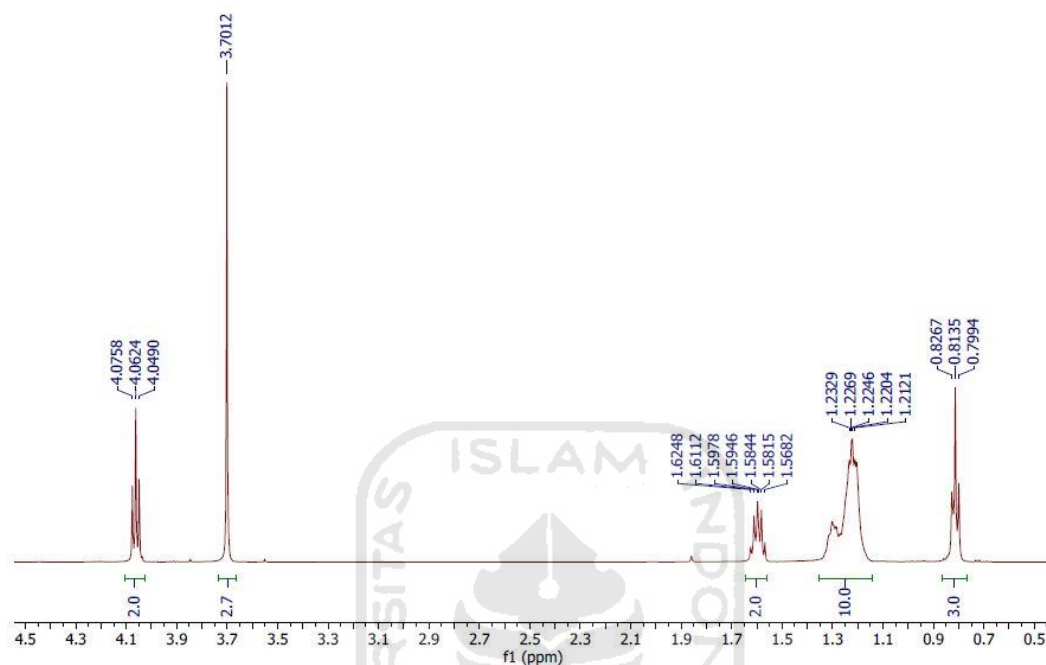
Gambar 11. Spektra FTIR Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi DMC 120 mmol

Tabel 3. Hasil Analisis Spektra FTIR Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi DMC 120 mmol

Bilangan Gelombang (cm^{-1})	Gugus Fungsi
2956, 2925, dan 2856	C-H alifatik
1747	C=O
1442	-CH ₃
1257	C-O eter

Sampel dengan variasi DMC 120 mmol dilakukan pengujian dengan menggunakan spektroskopi FTIR. Spektra yang dihasilkan disajikan pada Gambar 11. Hal ini digunakan untuk mengetahui gugus-gugus yang terbentuk dari sampel. Hasil analisis dari spektra yang diperoleh ditampilkan pada Tabel 3. Pada bilangan gelombang 2956, 2952, dan 2856 cm^{-1} menunjukkan serapan dari gugus C-H alifatik. Pada 1442 cm^{-1} merupakan serapan dari gugus -CH₃. Lalu pada 1257 cm^{-1} merupakan serapan dari gugus C-O eter. Terdapat serapan pada

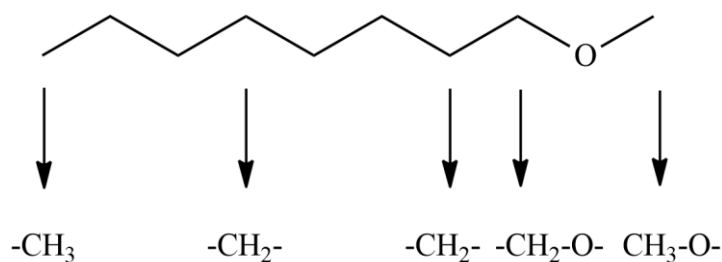
bilangan gelombang 1747 cm^{-1} yang merupakan serapan dari gugus C=O yang diindikasikan merupakan kontaminan dari dimetil karbonat.



Gambar 12. Spektra H-NMR Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi DMC 160 mmol

Tabel 4. Hasil Analisis Spektra H-NMR Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi DMC 160 mmol

δ (ppm)	Lingkungan	Integrasi	Splitting
0,794-0,8267	-CH ₃	3H	Triplet
1,2121-1,2329	-CH ₂ -	10H	Multiplet
1,5682-1,6248	-CH ₂ -	2H	Multiplet
3,7012	CH ₃ -O-	3H	Singlet
4,0490-4,0758	-CH ₂ -O-	2H	Triplet



Gambar 13. Struktur Metil Oktil Eter

Sampel dengan variasi DMC 160 mmol dilakukan pengujian dengan menggunakan spektroskopi ^1H NMR. Hasil yang diperoleh berupa spektra yang ditunjukkan pada Gambar 12. Spektra tersebut menandakan kenampakan sinyal-sinyal proton yang terdapat pada metil oktil eter. Kemudian spektra yang diperoleh di analisis yang hasilnya disajikan pada Tabel 4. Spektra ^1H NMR pada pergeseran kimia 0,794-0,8267 ppm memiliki *splitting triplet* dengan jumlah proton atau integrasi 3H yang merupakan serapan dari proton $-\text{CH}_3$. Pergeseran kimia pada 1,2121-1,2329 ppm, memiliki *splitting multiplet* dengan integrasi 10H yang merupakan serapan dari $-\text{CH}_2-$. Pergeseran kimia pada 1,5682-1,6248 ppm memiliki *splitting multiplet* dengan integrasi 3H yang merupakan serapan dari $-\text{CH}_2$. Kemudian pada pergeseran kimia 3,7012 ppm memiliki *splitting singlet* dengan integrasi 3H yang merupakan serapan dari CH_3-O . Sedangkan pada pergeseran kimia 4,0490-4,0758 ppm memiliki *splitting triplet* dengan integrasi 2H, yang merupakan serapan dari $-\text{CH}_2-\text{O}$. Dari hasil tersebut maka menunjukkan bahwa produk yang diperoleh merupakan senyawa target atau senyawa metil oktil eter.

Hasil sintesis metil oktil eter pada variasi jumlah DMC menghasilkan produk dengan tingkat kemurnian dan rendemen seperti yang disajikan pada Tabel 5.

Tabel 5. Hasil Sintesis Metil Oktal Eter Pada Variasi Jumlah DMC

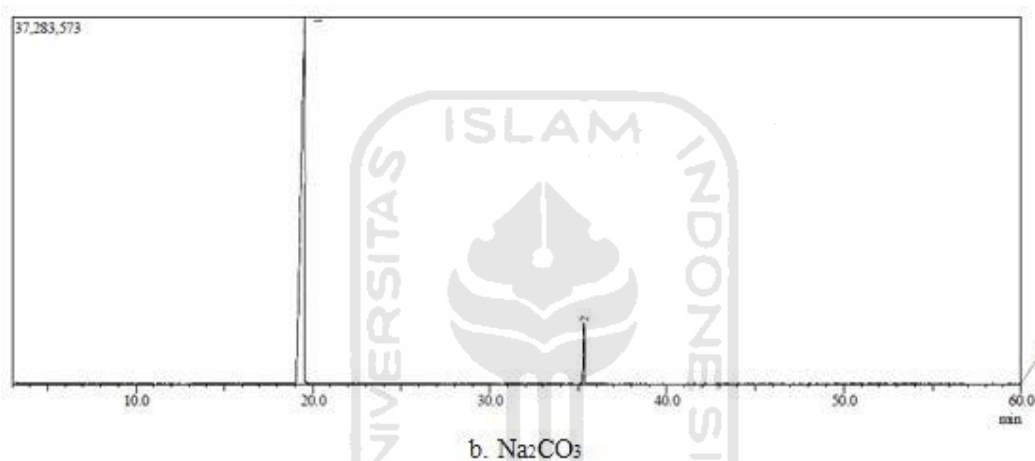
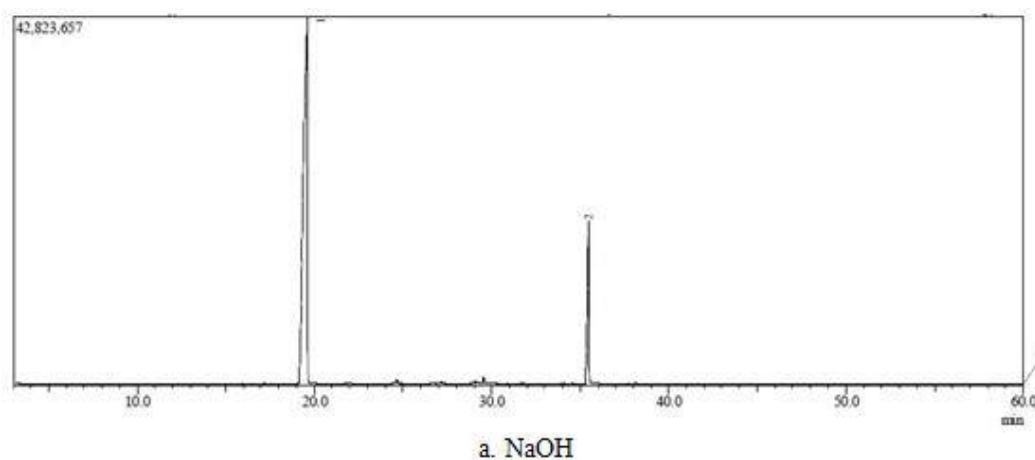
<i>n</i> -Oktanol (mmol)	Katalis TBAB (mmol)	DMC (mmol)	Basa	Waktu Refluks (Jam)	Kadar Metil Oktal Eter (%)	Rendemen (%)
10	4	20	K_2CO_3	5	33,46	9

10	4	40	K_2CO_3	5	42,36	20
10	4	80	K_2CO_3	5	95,11	85
10	4	120	K_2CO_3	5	88,01	65
10	4	160	K_2CO_3	5	96,33	54

Dari Tabel yang diperoleh dari hasil sintesis metil oktil eter variasi jumlah DMC menunjukkan bahwa pada variasi DMC 20 mmol produk memiliki tingkat kemurnian 33,46% dengan rendemen sebesar 9%. Kemudian pada variasi DMC 40 mmol memiliki tingkat kemurnian 42,36% dengan rendemen 20%. Lalu pada variasi 120 mmol memiliki tingkat kemurnian 88,01% dengan rendemen 65%. Sedangkan pada variasi DMC 160 mmol memiliki tingkat kemurnian 96,33% dengan rendemen sebesar 54%.

5.3 Variasi Jenis Basa

Pada tahap ini proses sintesis dilakukan dengan variasi jenis basa. Basa yang digunakan yaitu NaOH dan Na_2CO_3 . Sedangkan variasi K_2CO_3 tidak dilakukan karena sudah didapatkan datanya dari tahap sebelumnya. Dalam proses ini, banyaknya basa yang digunakan tetap sama dengan tahap sebelumnya yaitu 7,5 mmol. Sedangkan jumlah katalis TBAB yang digunakan yaitu 4 mmol dan jumlah DMC yang digunakan 160 mmol. Proses refluks dilakukan selama 5 jam.



Gambar 14. Kromatogram Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi Basa NaOH dan Na₂CO₃

Sintesis metil oktil eter pada variasi NaOH dan menghasilkan produk berupa cairan berwarna bening dengan berat 0,496 g. Sedangkan pada sintesis metil oktil eter menggunakan Na₂CO₃ menghasilkan produk berupa cairan berwarna bening dengan berat 0,684 g. Pada variasi NaOH produk memiliki kemurnian sebesar 87,18% dengan rendemen sebesar 30%. Sedangkan pada variasi Na₂CO₃ produk yang diperoleh memiliki kemurnian sebesar 94,92% dengan besar rendemennya yaitu 45%. Kromatogram sintesis metil oktil eter variasi jenis basa NaOH dan Na₂CO₃ disajikan pada Gambar 13.

Hasil sintesis metil oktil eter pada variasi jenis basa menghasilkan produk dengan tingkat kemurnian dan rendemen seperti yang disajikan pada Tabel 6.

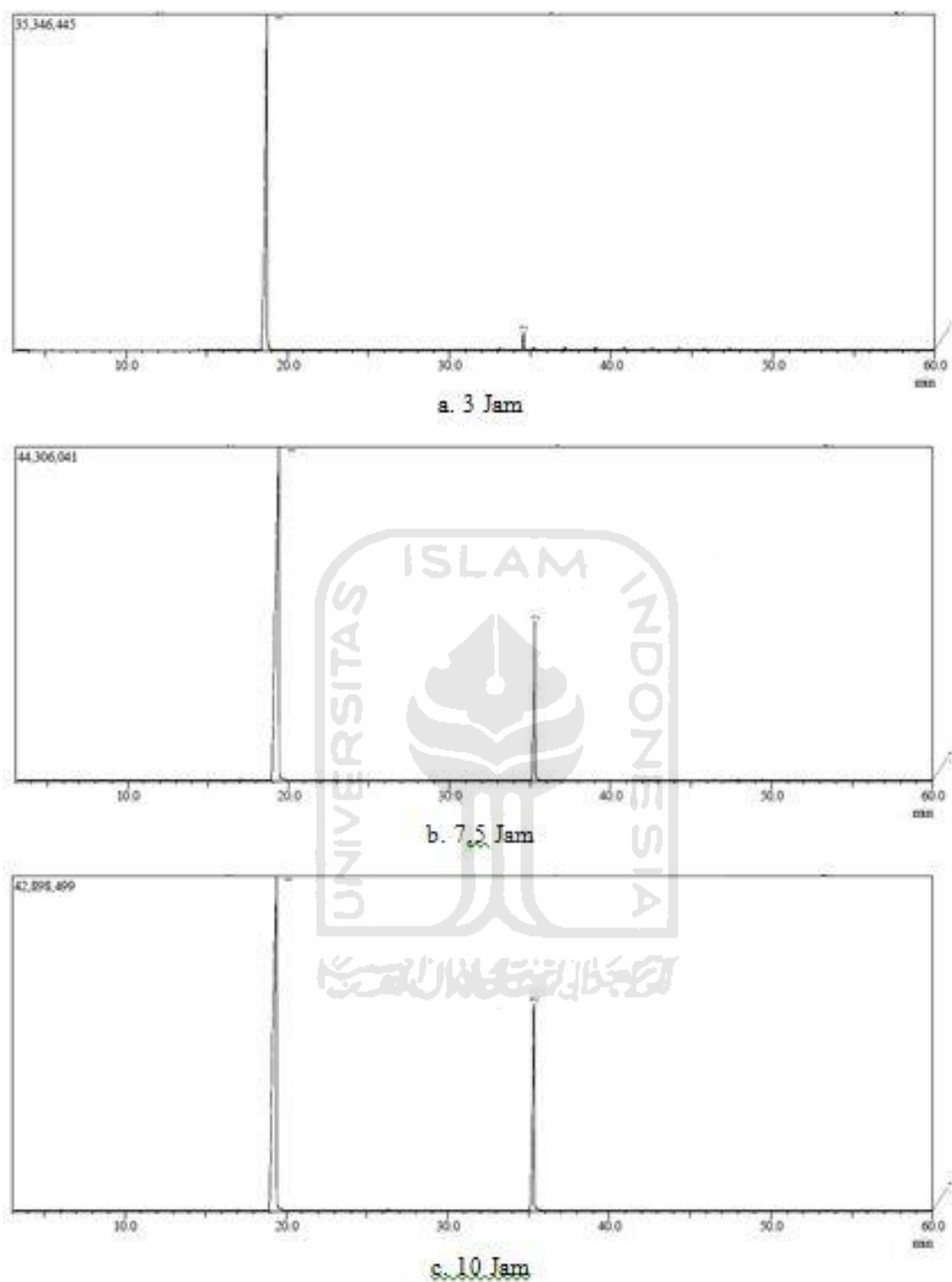
Tabel 6. Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi Jenis Basa

<i>n</i> -Oktanol (mmol)	Katalis TBAB (mmol)	DMC (mmol)	Basa	Waktu Refluks (Jam)	Kadar Metil Oktil Eter (%)	Rendemen (%)
10	4	160	K ₂ CO ₃	5	96,33	54
10	4	160	NaOH	5	87,18	30
10	4	160	Na ₂ CO ₃	5	94,92	45

Dari Tabel hasil sintesis metil oktil eter variasi jenis basa menunjukkan bahwa pada sintesis metil oktil eter menggunakan NaOH produk memiliki tingkat kemurnian 87,18% dengan rendemen 30%. Sedangkan pada sintesis metil oktil eter menggunakan Na₂CO₃ memiliki tingkat kemurnian sebesar 94,92% dengan rendemen sebesar 45%. Berdasarkan hasil ini maka sintesis metil oktil eter yang hasilnya paling optimum yaitu dengan menggunakan basa K₂CO₃ karna memiliki tingkat kemurnian dan rendemen yang dihasilkan lebih besar daripada menggunakan NaOH dan Na₂CO₃.

5.4 Variasi Waktu Refluks

Pada tahap ini proses sintesis dilakukan dengan variasi lama waktu pada proses refluks. Variasi waktu refluks yang dilakukan yaitu 7,5 dan 10 jam. Dalam proses ini digunakan katalis TBAB 4 mmol, DMC 160 mmol, dan basa K₂CO₃ 7,5 mmol.



Gambar 15. Kromatogram Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi Waktu Refluks 3, 7,5 dan 10 Jam

Pada sintesis metil oktil eter dengan variasi waktu refluks 3 jam, diperoleh produk berupa cairan berwarna bening dengan berat 0,5641 g. Lalu pada variasi waktu refluks 7,5 jam, didapatkan produk berupa cairan berwarna bening dengan

berat 0,671 g. Sedangkan pada variasi waktu refluks 10 jam diperoleh produk berupa cairan yang berwarna bening dengan berat 0,814 g. Pada variasi waktu refluks 3 jam produk yang diperoleh memiliki kemurnian sebesar 97,71 % dengan rendemen sebesar 38%. Kemudian pada variasi waktu refluks 7,5 jam, produk yang diperoleh memiliki kemurnian sebesar 82,67% dengan besar rendemennya yaitu 39%. Sedangkan pada variasi waktu refluks 10 jam, produk memiliki tingkat kemurnian sebesar 77,46% dengan besar rendemennya yaitu 44%. Kromatogram sintesis metil oktil eter variasi waktu refluks disajikan pada Gambar 14.

Hasil sintesis metil oktil eter pada variasi waktu refluks menghasilkan produk dengan tingkat kemurnian dan rendemen seperti yang disajikan pada Tabel 7.

Tabel 7. Hasil Sintesis Metil Oktil Eter Pada Variasi Waktu Refluks

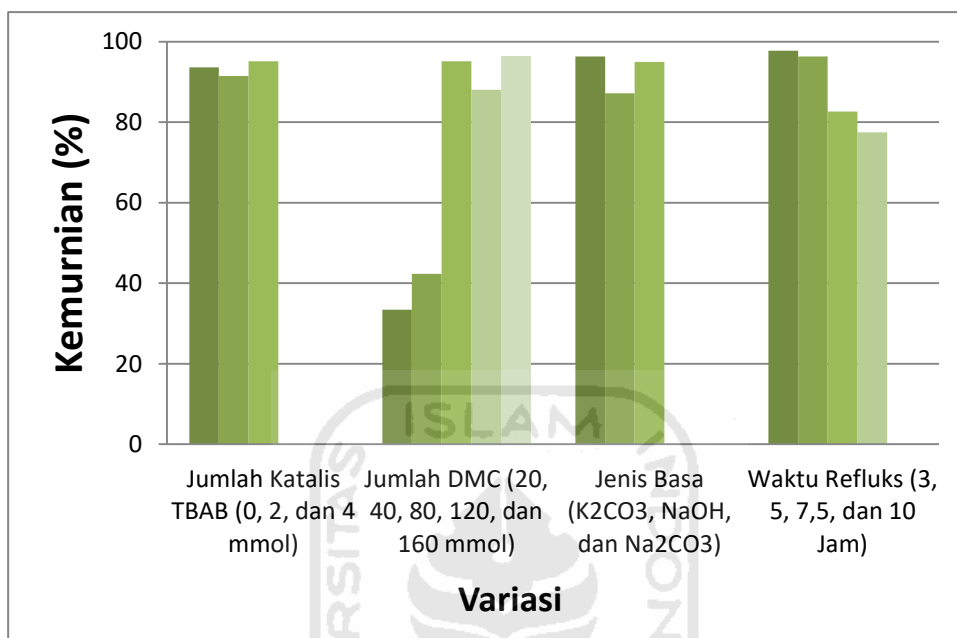
<i>n</i> -Oktanol (mmol)	Katalis TBAB (mmol)	DMC (mmol)	Basa	Waktu Refluks (Jam)	Kadar Metil Oktil Eter (%)	Rendemen (%)
10	4	160	K ₂ CO ₃	3	97,71	38
10	4	160	K ₂ CO ₃	5	96,33	54
10	4	160	K ₂ CO ₃	7,5	82,67	39
10	4	160	K ₂ CO ₃	10	77,46	44

Dari Tabel hasil sintesis metil oktil eter pada variasi waktu refluks, menunjukkan bahwa pada sintesis metil oktil eter dengan waktu refluks 3 jam memiliki tingkat kemurnian yang tinggi sebesar 97,71% dengan rendemen sebesar 38%. Kemudian pada sintesis metil oktil eter variasi waktu refluks 7,5 jam memiliki tingkat kemurnian sebesar 82,67% dengan rendemen sebesar 39%. Sedangkan pada sintesis metil oktil eter dengan waktu refluks 10 jam produk memiliki tingkat kemurnian 77,46% dengan rendemen sebesar 44%. Dari hasil tersebut maka waktu refluks yang optimal pada sintesis metil oktil eter yaitu pada waktu 3 jam.

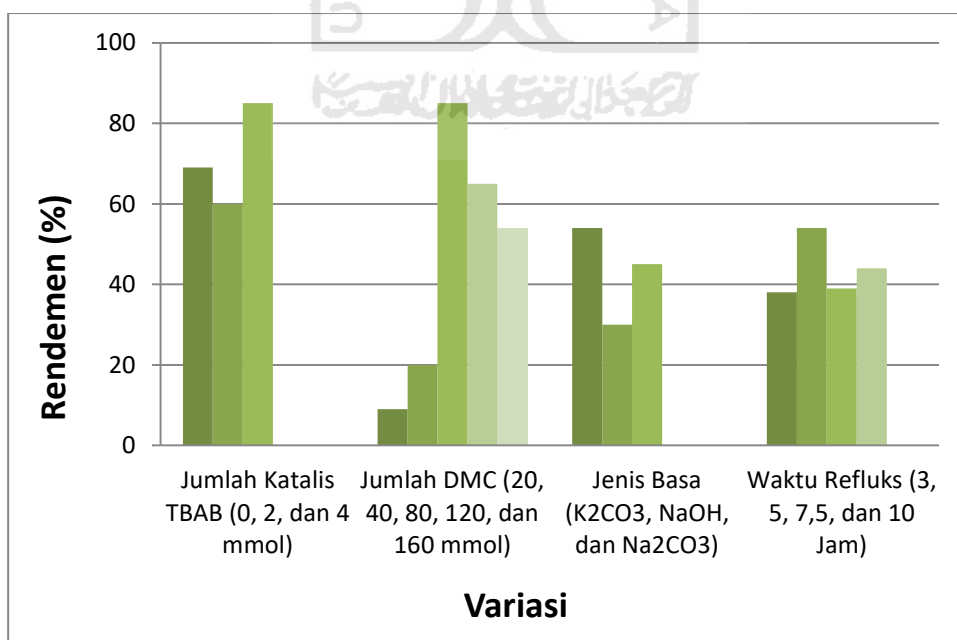
5.5 Sintesis Metil Oktil Eter Optimum

Berdasarkan hasil penelitian yang dilakukan, maka kondisi optimum sintesis metil oktil eter yaitu pada penggunaan katalis TBAB 4 mmol, DMC 160

mmol, basa K_2CO_3 , dengan waktu refluks selama 3 jam. Dari kondisi tersebut diperoleh rendemen sebesar 38% dengan kemurnian sebesar 97,71%. Hasil kumulatif penelitian ini disajikan pada Gambar 16 dan 17.



Gambar 16. Diagram Hasil Kumulatif Variasi Vs Kemurnian



Gambar 17. Diagram Hasil Kumulatif Variasi Vs Rendemen

BAB VI

KESIMPULAN DAN SARAN

6.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian sintesis metilasi pada *n*-oktanol menggunakan DMC, maka dapat diambil kesimpulan bahwa :

1. Penggunaan katalis TBAB 4 mmol menghasilkan produk dengan rendemen yang lebih besar daripada menggunakan katalis TBAB sebanyak 2 mmol dan 0 mmol.
2. Penggunaan DMC 80 mmol menghasilkan produk dengan rendemen yang lebih besar daripada menggunakan DMC dengan konsentrasi 20, 40, 120, dan 160 mmol.
3. Penggunaan jenis basa yang berbeda akan menghasilkan produk dengan rendemen yang berbeda, penggunaan K_2CO_3 menghasilkan rendemen yang lebih besar daripada menggunakan NaOH dan Na_2CO_3 .
4. Waktu refluks selama 5 jam menghasilkan rendemen yang lebih besar daripada 3, 7,5 dan 10 jam.
5. Reaksi metilasi *n*-oktanol dapat menghasilkan produk yang optimal pada perbandingan *n*-oktanol:DMC:TBAB (10:160:4) mmol dengan waktu refluks 3 jam yang menghasilkan rendemen sebesar 38% dengan tingkat kemurnian 97,71%.

6.2 Saran

Berdasarkan pengamatan selama penelitian, terdapat beberapa saran yang dapat dipertimbangkan, yaitu :

1. Adanya penelitian lebih lanjut terkait variasi jumlah katalis transfer fasa, jumlah reagen metilasi DMC, jenis basa lainnya, serta waktu reaksi.
2. Adanya penelitian lebih lanjut terkait metode yang mengacu pada prinsip kimia hijau, khususnya pada bidang metilasi.

DAFTAR PUSTAKA

- Anastas, P., dan Warner, J.C., 1998, *Green Chemistry, Theory and Practice*, Oxford University Press, Oxford.
- Asnawati, Dina., dkk., 2015. Methylation Of Eugenol Using Dimethyl Carbonate And Bentonite As Catalyst, Department of Chemistry, Faculty of Science, Mataram University. *Indones. J. Chem.*, 2015, 15 (3), 256 – 262.
- Bernini, R., E. Mincione, F. Crisante, M. Barontini, G. Fabrizi, dan P. Gentili, 2007, Chemoselective and efficient carbomethoxylation of the alcoholic chain of phenols by dimethyl carbonate (DMC), *Tetrahedron Letters*, 48, 7000-7003.
- Chau, Khiem.D.N., Fritz, D., dan Thach, N.L., 2013, Methyl Esterification of Carboxylic Acids with dimethyl carbonate promoted by K_2CO_3 /tetrabutylammonium chloride, *Green Chemistry Letters and Reviews*, 6 (1), 89-93.
- Fannyda, Raidatul., 2014, Pengaruh Ekstrak Daun Medang Perawas (*Litsea Odorifera* Val.) Terhadap Tukak Lambung Mus *Musculus* Dan Karakterisasi Gugus Fungsi Dengan Spektroskopi FTIR, Skripsi Program Studi Pendidikan Kimia Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan Universitas Bengkulu, Bengkulu.
- Hart, H., 1983, *Organic Chemistry a Short Course, sixth edition*, Boston : Houghton Mifflin Company.
- Hart, H. H., 1997, *Organic Chemistry A short Course*, New Delhi: S. Chand and Company Ltd
- Hashim DM, Che Man YB, Norakasha R, Shuhaimi M, Salah Y, Syahariza ZA., 2010, Potential Use Of Fourier Transform Infra Red Spectroscopy For Differentiation Of Bovine And Porcine Gelatins, *Food Chemistry. 118*: 856-860.
- Haskins, M., 2013, What Is Octanol, <http://www.wisegeek.com/what-is-octanol.htm>, 2 Desember 2013.
- Ledon, H. J., 1979, Diazo Transfer by Means of Phase-Transfer Catalysis : Di-tert-Butyl Diazomalonate. *Organic Synthesis*, 59-66.
- Lidyawati, 2012, Studi Reaksi O-Metilasi Eugenol Dengan Metanol Menggunakan Katalis Zeolit KNAX, Skripsi, FMIPA, Universitas Indonesia, Jakarta.

- Makosza, M., 2000, Phase-Transfer Catalysis, A General Green Methodology in Organic Synthesis, *Pure and Applied Chemistry*, 72, 1399-1403.
- Nurbaity, 2011, Pendekatan Green Chemistry Dalam Pembelajaran Kimia Berwawasan Lingkungan, *Jurnal Riset Pendidikan Kimia*, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Jakarta, Vol. 1 No. 1.
- Ouk, S., Shopie, T., Elisabeth, B., Pierre, L., dan Loic, L., 2002, O-Methylation of Phenolic Compounds with Dimethyl Carbonate Under Solid/Liquid Phase Transfer System, *Tetrahedron Letters*, 43, 2661-2663.
- Prakoso, N.I., P.H. Pangestu., dan T.D. Wahyuningsih., 2016, O-Methylation Of Natural Phenolic Compounds Based On Green Chemistry Using Dimethyl Carbonate, *Conf. Ser.: Mater. Scie. Eng.*, 107.
- Rouessac, F. A., 2007, *Chemical Analysis Modern Instrumentation Method and Technique*, Hoboken: John Willey and sons Ltd.
- Saeful, Ahmad., 2019, Studi Variasi Jenis Dan Jumlah Katalis Transfer Fasa Pada Sintesis O-Metilasi Senyawa Mentol Berbasis Green Chemistry Menggunakan Dimetil Karbonat, Skripsi Program Studi Kimia Fakultas Matematika Dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Islam Indonesia, Yogyakarta.
- Sari, Mayang., 2011, Identifikasi Protein Menggunakan Fourier Transform Infrared (FTIR), Skripsi Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia, Depok.
- Sastrohamidjojo, 2001, *Spektroskopi*, Yogyakarta: Liberty.
- Sastrohamidjojo, H., 2005, *Kromatografi*, Yogyakarta: Gadjah Mada University Press.
- Sharma, S.K., Chaudhary, A., dan Singh, R.V., 2008, Gray Chemistry Versus Green Chemistry: Challenges and Opportunities, *Rasayan J.Chem.*, 1 (1), 68-92.
- Solomon, G., 2010, *Organic Chemistry*, Hoboken: John Willey and Sons Ltd.
- Sparkman, O.D., Penton, Z., Fulton, G., 2011, *Gas Chromatography and Mass Spectrometry : a practical guide*, Elsevier.
- Sudjadi, 1985, *Penentuan Struktur Senyawa Organik*, Jakarta: Ghalia Indonesia
- Sudjadi, 1986, *Metode Pemisahan*, UGM Press, Yogyakarta.

- Sumarno, 2001, *Teori Dasar Metode Kromatografi Untuk Analisis Makanan*, Yogyakarta : Pustaka Pelajar.
- Tundo P And Selva M. 2000, *Alkyl Methyl Carbonates as Methylating Agents. The O-Methylation of Phenols* in SYNLETT, vol. 2000, pp. 272-274 (ISSN 0936-5214)
- Tundo P., 2001, New Developments in Dimethyl Carbonate Chemistry, *Pure Appl. Chem*, 73, 7, 1117-1124.
- Tundo, P dan M.Selva., 2002, The Chemistry of Dimethyl Carbonate, *Account of Chemical Research*, 35 (9), 706-716.
- Wafiya, Izdiyar Qatrunnada., 2019, Studi Variasi Jenis Basa Dan Katalis Transfer Fasa Pada Sintesis Senyawa 1-Metoksi Naftalen Berbasis Green Chemistry Menggunakan Dimetil Karbonat, Skripsi Program Studi Kimia Fakultas Matematika Dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Islam Indonesia, Yogyakarta.
- Willard, Robert H., Merrit Jr, Lynne L., et al., 1988, *Instrumental Methods of Analysis*, California : Wadsworth Publishing Company.
- Yulinda, L.R., T.D. Wahyuningsih, dan H.D. Pranowo., 2013, Metilasi asam galat menggunakan agen metilasi dimetil sulfat (DMS) atau dimetil karbonat (DMC), *Berkala MIPA*, 23 (2), 198-210.
- Zhao, S., H. Zhang, D. Zhang, dan Z., Shao., 2012, N-Methylation of NH-Containing Heterocycles with Dimethyl Carbonate Catalysed with TMEDA, *Synthetic Communications*, 42, 128-135.
- Zidong, L., 1997, *Bahan Baku Praktis Perekat manual*, Industri Pertahanan Nasional Press, Beijing.
- Zheng, Y., Su, X., Zhang, X., Wei, W., dan Y. Sun, 2005, Functionalized Mesoporous SBA-15 Silica With Propylsulfonic Groups As Catalyst For Esterification Of Salicylic Acid With Dimethyl Carbonate, *Studies in Surface Science and Catalysis*, 205-212.

LAMPIRAN

Lampiran 1. Perhitungan Rendemen Produk Hasil Sintesis

1. Variasi Jumlah Katalis TBAB

a. TBAB 4 mmol

$$\begin{aligned}\text{Berat metil oktil eter} &= \frac{\% \text{ metil oktil eter}}{100\%} \times \text{berat produk} \\ &= \frac{95,11\%}{100\%} \times 1,2904 \text{ g} \\ &= 1,2273 \text{ g}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Mol metil oktil eter} &= \frac{\text{berat metil oktil eter}}{\text{Mr metil oktil eter}} \\ &= \frac{1,2273 \text{ g}}{144 \text{ g/mol}} \\ &= 0,0085 \text{ mol} \\ &= 8,5 \text{ mmol}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Rendemen} &= \frac{\text{mol metil oktil eter}}{\text{mol oktanol}} \times 100\% \\ &= \frac{8,5 \text{ mmol}}{10 \text{ mmol}} \times 100\% \\ &= 85\%\end{aligned}$$

b. TBAB 2 mmol

$$\begin{aligned}\text{Berat metil oktil eter} &= \frac{\% \text{ metil oktil eter}}{100\%} \times \text{berat produk} \\ &= \frac{91,48\%}{100\%} \times 0,9435 \text{ g} \\ &= 0,8631 \text{ g}\end{aligned}$$

$$\text{Mol metil oktil eter} = \frac{\text{berat metil oktil eter}}{\text{Mr metil oktil eter}}$$

$$= \frac{0,8631 \text{ g}}{144 \text{ g/mol}}$$

$$= 0,006 \text{ mol}$$

$$= 6 \text{ mmol}$$

$$\text{Rendemen} = \frac{\text{mol metil oktil eter}}{\text{mol oktanol}} \times 100\%$$

$$= \frac{6 \text{ mmol}}{10 \text{ mmol}} \times 100\%$$

$$= 60\%$$

c. TBAB 0 mmol

$$\text{Berat metil oktil eter} = \frac{\% \text{ metil oktil eter}}{100\%} \times \text{berat produk}$$

$$= \frac{93,61\%}{100\%} \times 1,0582 \text{ g}$$

$$= 0,9906 \text{ g}$$

$$\text{Mol metil oktil eter} = \frac{\text{berat metil oktil eter}}{\text{Mr metil oktil eter}}$$

$$= \frac{0,9906 \text{ g}}{144 \text{ g/mol}}$$

$$= 0,0069 \text{ mol}$$

$$= 6,9 \text{ mmol}$$

$$\text{Rendemen} = \frac{\text{mol metil oktil eter}}{\text{mol oktanol}} \times 100\%$$

$$= \frac{\text{mmol}}{10 \text{ mmol}} \times 100\%$$

$$= 69\%$$

2. Variasi Jumlah DMC

a. DMC 20 mmol

$$\text{Berat metil oktil eter} = \frac{\% \text{ metil oktil eter}}{100\%} \times \text{berat produk}$$

$$= \frac{33,46\%}{100\%} \times 0,4085 \text{ g}$$

$$= 0,1367 \text{ g}$$

Mol metil oktil eter

$$= \frac{\text{berat metil oktil eter}}{\text{Mr metil oktil eter}}$$

$$= \frac{0,1367 \text{ g}}{144 \text{ g/mol}}$$

$$= 0,0009 \text{ mol}$$

$$= 0,9 \text{ mmol}$$

Rendemen

$$= \frac{\text{mol metil oktil eter}}{\text{mol oktanol}} \times 100\%$$

$$= \frac{0,9 \text{ mmol}}{10 \text{ mmol}} \times 100\%$$

$$= 9\%$$

b. DMC 40 mmol

Berat metil oktil eter

$$= \frac{\% \text{ metil oktil eter}}{100\%} \times \text{berat produk}$$

$$= \frac{42,36\%}{100\%} \times 0,6794 \text{ g}$$

$$= 0,2878 \text{ g}$$

Mol metil oktil eter

$$= \frac{\text{berat metil oktil eter}}{\text{Mr metil oktil eter}}$$

$$= \frac{0,2878 \text{ g}}{144 \text{ g/mol}}$$

$$= 0,002 \text{ mol}$$

$$= 2 \text{ mmol}$$

Rendemen

$$= \frac{\text{mol metil oktil eter}}{\text{mol oktanol}} \times 100\%$$

$$= \frac{2 \text{ mmol}}{10 \text{ mmol}} \times 100\%$$

$$= 20\%$$

c. DMC 120 mmol

$$\begin{aligned}\text{Berat metil oktil eter} &= \frac{\% \text{ metil oktil eter}}{100\%} \times \text{berat produk} \\ &= \frac{88,01\%}{100\%} \times 1,057 \text{ g} \\ &= 0,9303 \text{ g}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Mol metil oktil eter} &= \frac{\text{berat metil oktil eter}}{\text{Mr metil oktil eter}} \\ &= \frac{0,9303 \text{ g}}{144 \text{ g/mol}} \\ &= 0,0065 \text{ mol} \\ &= 6,5 \text{ mmol}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Rendemen} &= \frac{\text{mol metil oktil eter}}{\text{mol oktanol}} \times 100\% \\ &= \frac{6,5 \text{ mmol}}{10 \text{ mmol}} \times 100\% \\ &= 65\%\end{aligned}$$

d. TBAB 160 mmol

$$\begin{aligned}\text{Berat metil oktil eter} &= \frac{\% \text{ metil oktil eter}}{100\%} \times \text{berat produk} \\ &= \frac{96,33\%}{100\%} \times 0,81 \text{ g} \\ &= 0,7803 \text{ g}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Mol metil oktil eter} &= \frac{\text{berat metil oktil eter}}{\text{Mr metil oktil eter}} \\ &= \frac{0,7803 \text{ g}}{144 \text{ g/mol}} \\ &= 0,0054 \text{ mol} \\ &= 5,4 \text{ mmol}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Rendemen} &= \frac{\text{mol metil oktil eter}}{\text{mol oktanol}} \times 100\% \\
 &= \frac{5,4 \text{ mmol}}{10 \text{ mmol}} \times 100\% \\
 &= 54\%
 \end{aligned}$$

3. Variasi Jenis Basa

a. Na_2CO_3 7,5 mmol

$$\begin{aligned}
 \text{Berat metil oktil eter} &= \frac{\% \text{ metil oktil eter}}{100\%} \times \text{berat produk} \\
 &= \frac{94,92\%}{100\%} \times 0,684 \text{ g} \\
 &= 0,6493 \text{ g}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Mol metil oktil eter} &= \frac{\text{berat metil oktil eter}}{\text{Mr metil oktil eter}} \\
 &= \frac{0,6493 \text{ g}}{144 \text{ g/mol}} \\
 &= 0,0045 \text{ mol} \\
 &= 4,5 \text{ mmol}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Rendemen} &= \frac{\text{mol metil oktil eter}}{\text{mol oktanol}} \times 100\% \\
 &= \frac{4,5 \text{ mmol}}{10 \text{ mmol}} \times 100\% \\
 &= 45\%
 \end{aligned}$$

b. NaOH 7,5 mmol

$$\begin{aligned}
 \text{Berat metil oktil eter} &= \frac{\% \text{ metil oktil eter}}{100\%} \times \text{berat produk} \\
 &= \frac{87,18\%}{100\%} \times 0,496 \text{ g} \\
 &= 0,4324 \text{ g}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Mol metil oktil eter} &= \frac{\text{berat metil oktil eter}}{\text{Mr metil oktil eter}} \\
 &= \frac{0,4324 \text{ g}}{144 \text{ g/mol}} \\
 &= 0,003 \text{ mol} \\
 &= 3 \text{ mmol}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Rendemen} &= \frac{\text{mol metil oktil eter}}{\text{mol oktanol}} \times 100\% \\
 &= \frac{3 \text{ mmol}}{10 \text{ mmol}} \times 100\% \\
 &= 30\%
 \end{aligned}$$

4. Variasi Waktu Refluks

a. Refluks 3 Jam

$$\begin{aligned}
 \text{Berat metil oktil eter} &= \frac{\% \text{ metil oktil eter}}{100\%} \times \text{berat produk} \\
 &= \frac{97,71\%}{100\%} \times 0,5641 \text{ g} \\
 &= 0,5512 \text{ g}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Mol metil oktil eter} &= \frac{\text{berat metil oktil eter}}{\text{Mr metil oktil eter}} \\
 &= \frac{0,5512 \text{ g}}{144 \text{ g/mol}} \\
 &= 0,0038 \text{ mol} \\
 &= 3,8 \text{ mmol}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Rendemen} &= \frac{\text{mol metil oktil eter}}{\text{mol oktanol}} \times 100\% \\
 &= \frac{3,8 \text{ mmol}}{10 \text{ mmol}} \times 100\% \\
 &= 38\%
 \end{aligned}$$

b. Refluks 7,5 Jam

$$\begin{aligned}
 \text{Berat metil oktil eter} &= \frac{\% \text{ metil oktil eter}}{100\%} \times \text{berat produk} \\
 &= \frac{82,67\%}{100\%} \times 0,671 \text{ g} \\
 &= 0,5547 \text{ g}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Mol metil oktil eter} &= \frac{\text{berat metil oktil eter}}{\text{Mr metil oktil eter}} \\
 &= \frac{0,5547 \text{ g}}{144 \text{ g/mol}} \\
 &= 0,0039 \text{ mol} \\
 &= 3,9 \text{ mmol}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Rendemen} &= \frac{\text{mol metil oktil eter}}{\text{mol oktanol}} \times 100\% \\
 &= \frac{3,9 \text{ mmol}}{10 \text{ mmol}} \times 100\% \\
 &= 39\%
 \end{aligned}$$

c. Waktu Refluks 10 Jam

$$\begin{aligned}
 \text{Berat metil oktil eter} &= \frac{\% \text{ metil oktil eter}}{100\%} \times \text{berat produk} \\
 &= \frac{77,46\%}{100\%} \times 0,814 \text{ g} \\
 &= 0,6305 \text{ g}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Mol metil oktil eter} &= \frac{\text{berat metil oktil eter}}{\text{Mr metil oktil eter}} \\
 &= \frac{0,6305 \text{ g}}{144 \text{ g/mol}} \\
 &= 0,0044 \text{ mol} \\
 &= 4,4 \text{ mmol}
 \end{aligned}$$

$$\text{Rendemen} = \frac{\text{mol metil oktil eter}}{\text{mol oktanol}} \times 100\%$$

$$\begin{aligned} &= \frac{4,4 \text{ mmol}}{10 \text{ mmol}} \times 100\% \\ &= 44\% \end{aligned}$$



Lampiran 2. Hasil GCMS Variasi Jumlah Katalis TBAB

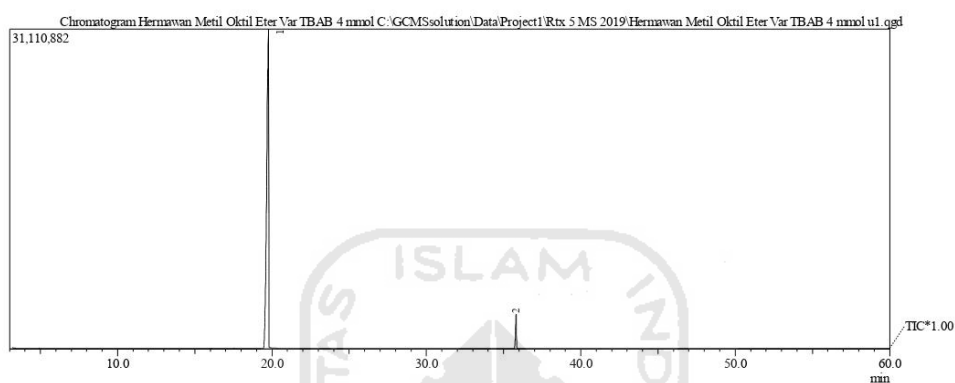
1. TBAB 4 mmol

C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Hermawan Metil Oktil Eter Var TBAB 4 mmol u1.qgd 11/7/2019

Lab Kimia Organik FMIPA - UGM

Sample Information

Analyzed by : Admin
 Sample Name : Hermawan Metil Oktil Eter Var TBAB 4 mmol
 Sample ID :
 Data File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Hermawan Metil Oktil Eter Var TBAB 4 mmol u1.qgd
 Method File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Organik baru.qsm
 Tuning File : C:\GCMSsolution\System1\Tune1\July 24 2019.qgt



Peak#	R Time	I Time	F Time	Area	Area%	Height
1	19.772	19.458	19.883	271705743	95.11	30964284
2	35.808	35.667	35.933	13957257	4.89	3169825
				285663000	100.00	34134109

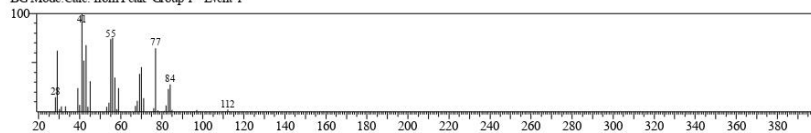
Library

<< Target >>

Line# 1 R Time: 19.775(Scan#: 1990) MassPeaks: 34

RawMode: Averaged 19.767-19.783(1989-1991) BasePeak: 41.05(3407854)

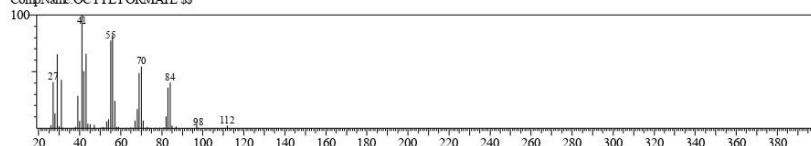
BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 34441 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₉H₁₈O₂ CAS: 112-32-3 MolWeight: 158 RetIndex: 0

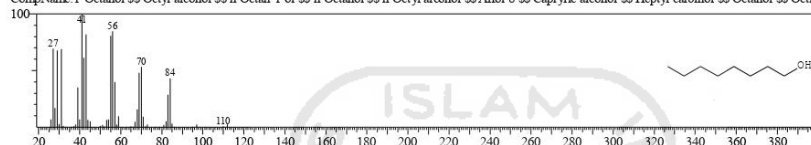
CompName: OCTYL FORMATE



Hit# 2 Entry: 5507 Library: NIST62 LIB

SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

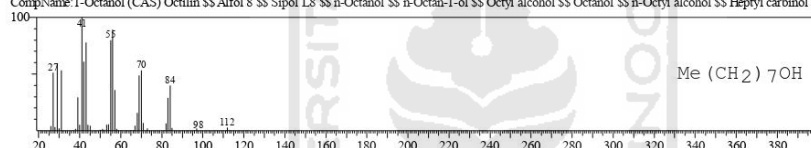
CompName: 1-Octanol



Hit# 3 Entry: 16383 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

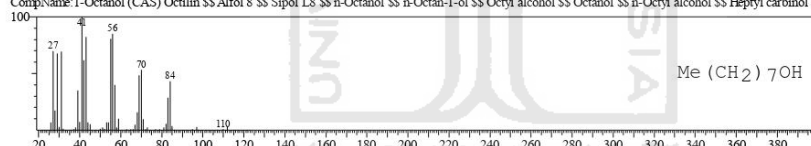
CompName: 1-Octanol



Hit# 4 Entry: 16386 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

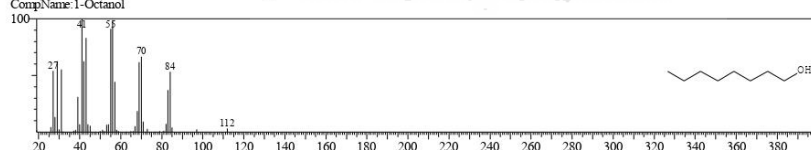
CompName: 1-Octanol



Hit# 5 Entry: 3043 Library: NIST12 LIB

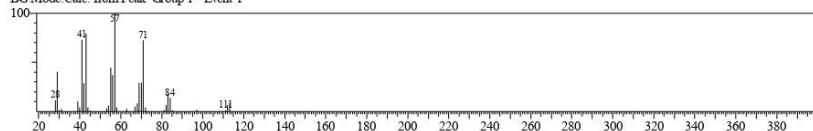
SI89 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

CompName: 1-Octanol

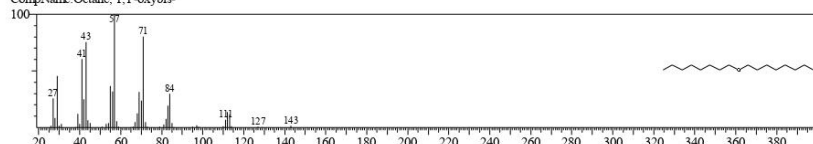


<< Target >>

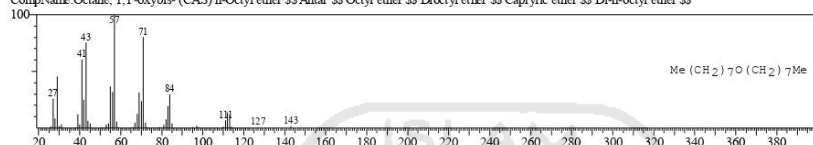
Line# 2 R Time: 35.808 (Scan# 3914) Mass Peaks: 33
 Raw Mode Averaged 35.800-35.817 (3913-3915) Base Peak: 57.05 (475376)
 BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



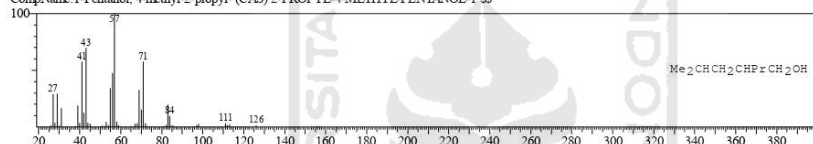
Hit# 1 Entry: 9015 Library: NIST12 LIB
 SI: 95 Formula: C₁₆H₃₄O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0
 CompName: Octane, 1,1'-oxybis-



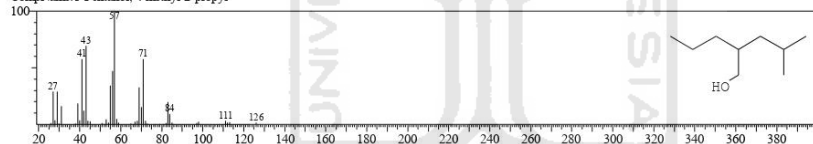
Hit# 2 Entry: 103317 Library: WILEY229 LIB
 SI: 95 Formula: C₁₆H₃₄O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0
 CompName: Octane, 1,1'-oxybis- (CAS) n-Octyl ether \$S\$ Antar \$S\$ Octyl ether \$S\$ Dioctyl ether \$S\$ Caprylic ether \$S\$ Di-n-octyl ether \$S\$



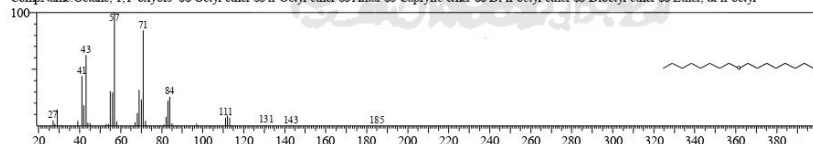
Hit# 3 Entry: 24473 Library: WILEY229 LIB
 SI: 92 Formula: C₉H₂₀O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0
 CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl- (CAS) 2-PROPYL-4-METHYL-PENTANOL-1 \$S\$



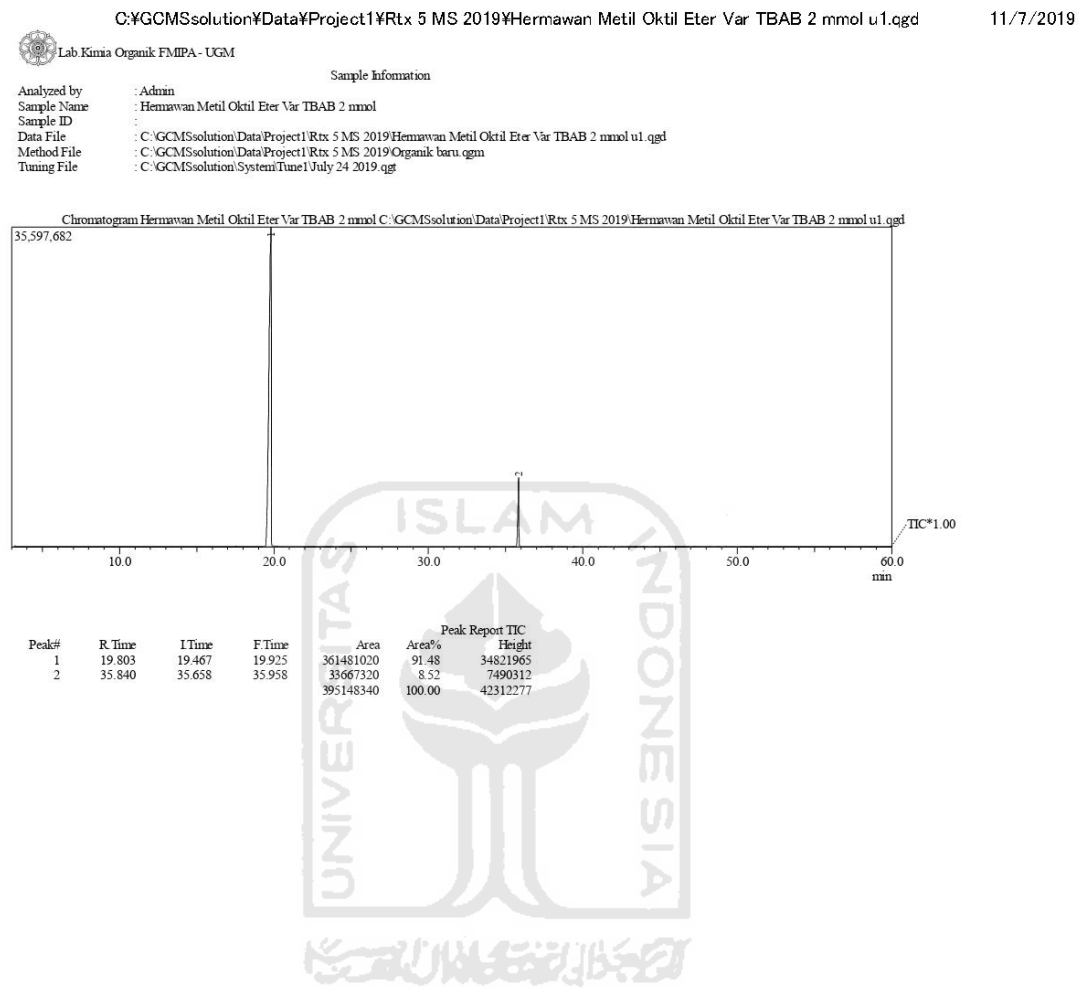
Hit# 4 Entry: 8543 Library: NIST62 LIB
 SI: 92 Formula: C₉H₂₀O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0
 CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl-



Hit# 5 Entry: 32426 Library: NIST62 LIB
 SI: 91 Formula: C₁₆H₃₄O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0
 CompName: Octane, 1,1'-oxybis- \$S\$ Octyl ether \$S\$ n-Octyl ether \$S\$ Antar \$S\$ Caprylic ether \$S\$ Di-n-octyl ether \$S\$ Dioctyl ether \$S\$ Ether, di-n-octyl-



2. TBAB 2 mmol



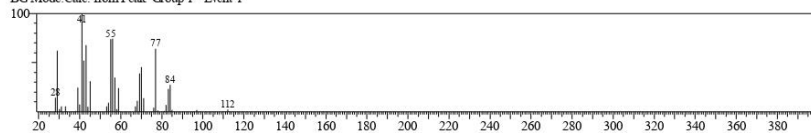
Library

<< Target >>

Line# 1 R Time: 19.800(Scan#: 1993) MassPeaks: 35

RawMode: Averaged 19.792-19.808(1992-1994) BasePeak: 41.05(3975893)

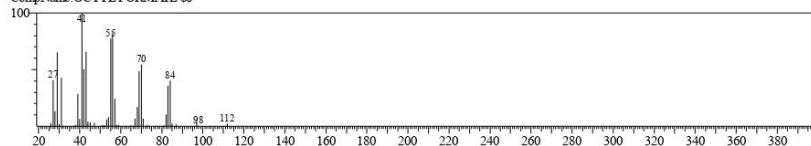
BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 34441 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₉H₁₈O₂ CAS: 112-32-3 MolWeight: 158 RetIndex: 0

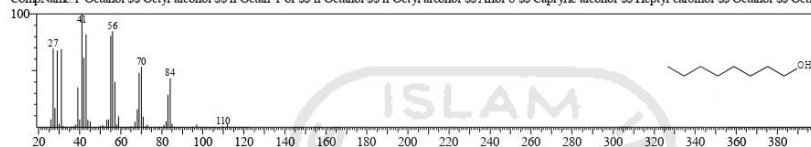
CompName: OCTYL FORMATE



Hit# 2 Entry: 5507 Library: NIST62 LIB

SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

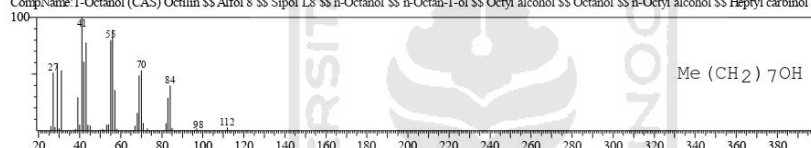
CompName: 1-Octanol



Hit# 3 Entry: 16383 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

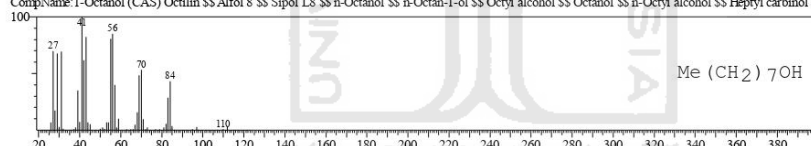
CompName: 1-Octanol



Hit# 4 Entry: 16386 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

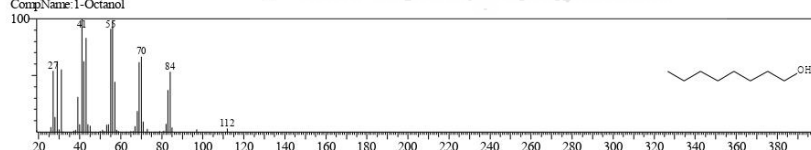
CompName: 1-Octanol



Hit# 5 Entry: 3043 Library: NIST12 LIB

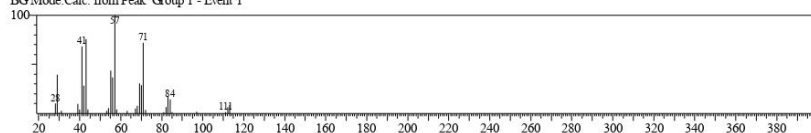
SI89 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

CompName: 1-Octanol



<< Target >>

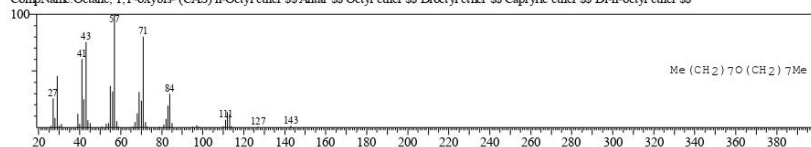
Line# 2 R Time: 35.842 (Scan# 3918) Mass Peaks: 32
 Raw Mode: Averaged 35.833-35.850 (3917-3919) Base Peak: 57.10 (1103179)
 BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 103317 Library: WILEY229 LIB

SI: 96 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

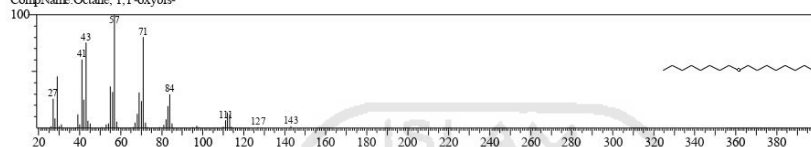
CompName: Octane, 1,1'-oxybis- (CAS) n-Octyl ether SS Antar SS Octyl ether SS Dioctyl ether SS Caprylic ether SS Di-n-octyl ether SS



Hit# 2 Entry: 9015 Library: NIST12 LIB

SI: 95 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

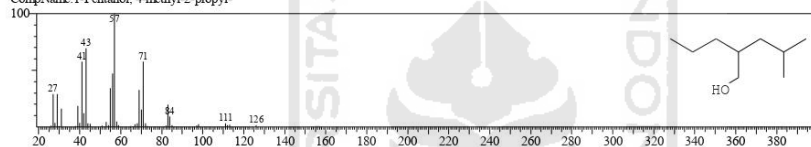
CompName: Octane, 1,1'-oxybis-



Hit# 3 Entry: 8543 Library: NIST62 LIB

SI: 92 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0

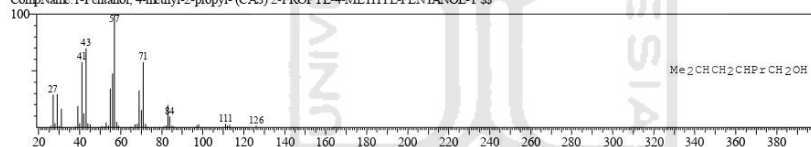
CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl-



Hit# 4 Entry: 24473 Library: WILEY229 LIB

SI: 92 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0

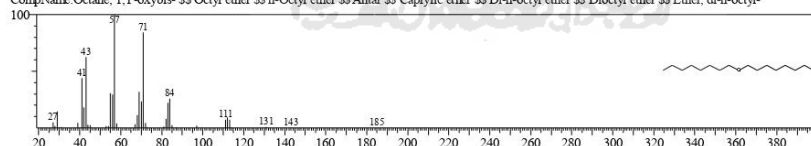
CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl- (CAS) 2-PROPYL-4-METHYL-PENTANOL-1 SS



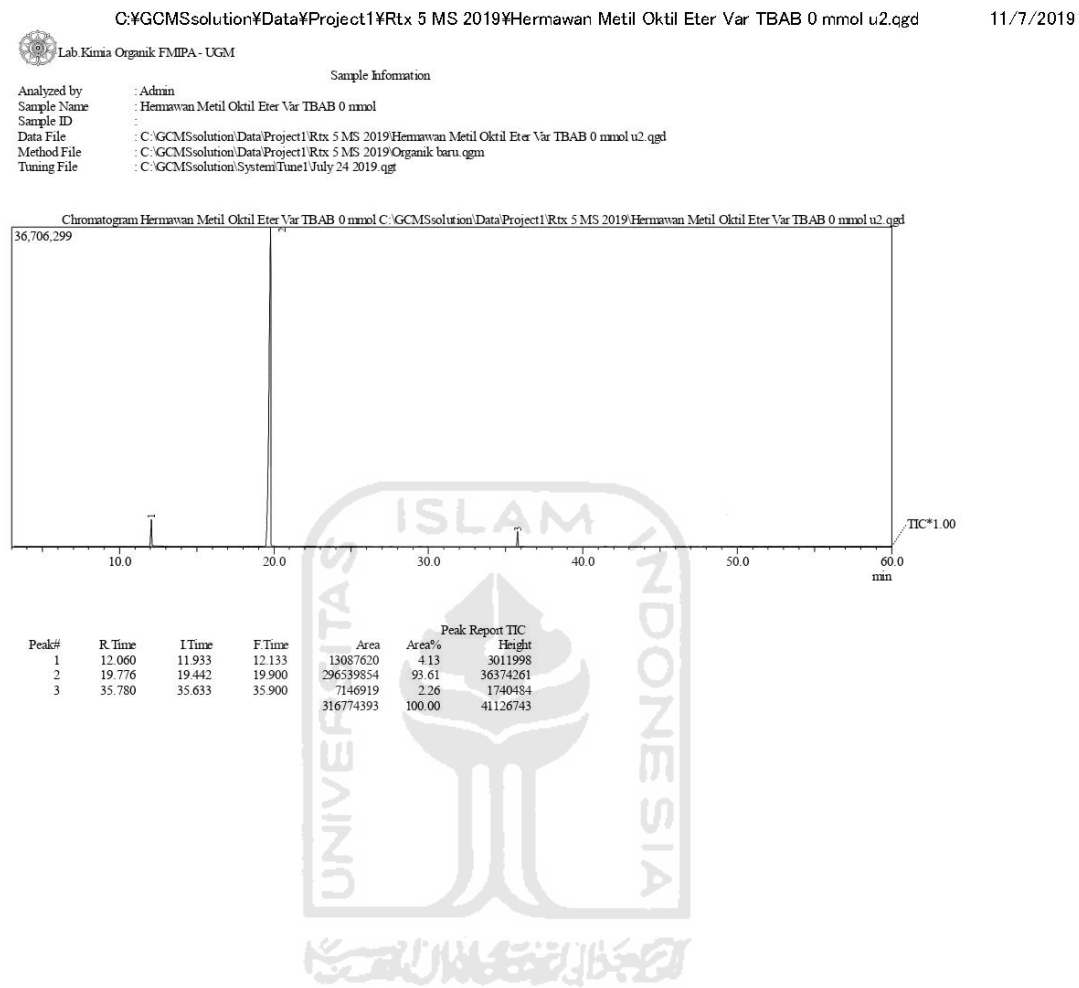
Hit# 5 Entry: 32426 Library: NIST62 LIB

SI: 92 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

CompName: Octane, 1,1'-oxybis- SS Octyl ether SS n-Octyl ether SS Antar SS Caprylic ether SS Di-n-octyl ether SS Dioctyl ether SS Ether, di-n-octyl-



3. TBAB 0 mmol



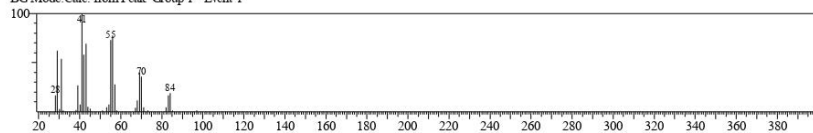
Library

<< Target >>

Line# 1 R Time: 12.058 (Scan# 1064) MassPeaks: 31

RawMode: Averaged 12.050-12.067 (1063-1065) BasePeak: 41.05 (386515)

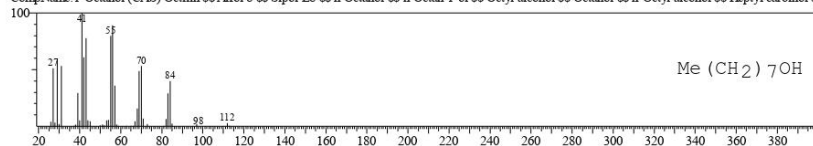
BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 16383 Library: WILEY229 LIB

SI 95 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

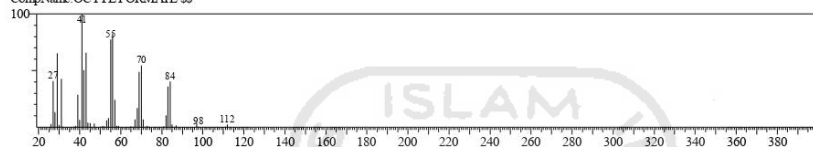
CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$\$ Alfol 8 \$\$ Sipol L8 \$\$ n-Octanol \$\$ n-Octan-1-ol \$\$ Octyl alcohol \$\$ Octanol \$\$ n-Octyl alcohol \$\$ Heptyl carbinol \$\$ Caprylic alcohol \$\$ 1-Hydroxyoctane \$\$ Octan-1



Hit# 2 Entry: 34441 Library: WILEY229 LIB

SI 95 Formula: C₉H₁₈O₂ CAS: 112-32-3 MolWeight: 158 RetIndex: 0

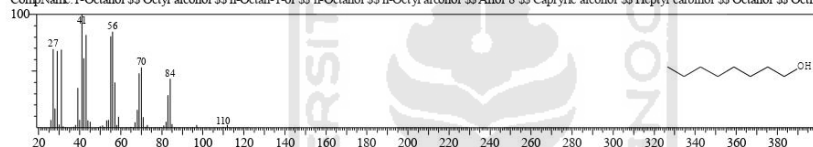
CompName: OCTYL FORMATE \$\$



Hit# 3 Entry: 5507 Library: NIST62 LIB

SI 95 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

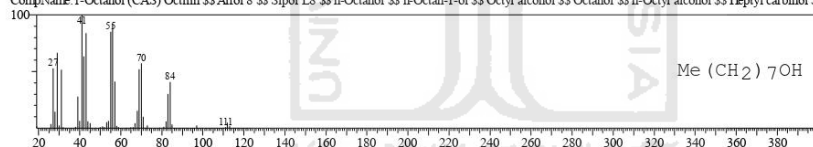
CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$\$ Alfol 8 \$\$ Sipol L8 \$\$ n-Octanol \$\$ n-Octan-1-ol \$\$ Octyl alcohol \$\$ Octanol \$\$ n-Octyl alcohol \$\$ Heptyl carbinol \$\$ Caprylic alcohol \$\$ 1-Hydroxyoctane \$\$ Octan-1



Hit# 4 Entry: 16387 Library: WILEY229 LIB

SI 95 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

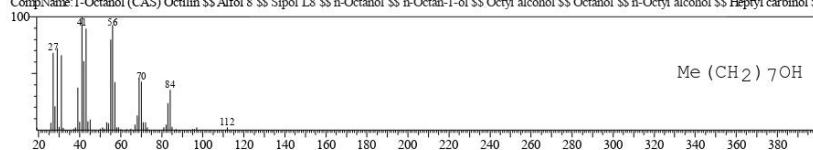
CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$\$ Alfol 8 \$\$ Sipol L8 \$\$ n-Octanol \$\$ n-Octan-1-ol \$\$ Octyl alcohol \$\$ Octanol \$\$ n-Octyl alcohol \$\$ Heptyl carbinol \$\$ Caprylic alcohol \$\$ 1-Hydroxyoctane \$\$ Octan-1



Hit# 5 Entry: 16385 Library: WILEY229 LIB

SI 95 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$\$ Alfol 8 \$\$ Sipol L8 \$\$ n-Octanol \$\$ n-Octan-1-ol \$\$ Octyl alcohol \$\$ Octanol \$\$ n-Octyl alcohol \$\$ Heptyl carbinol \$\$ Caprylic alcohol \$\$ 1-Hydroxyoctane \$\$ Octan-1

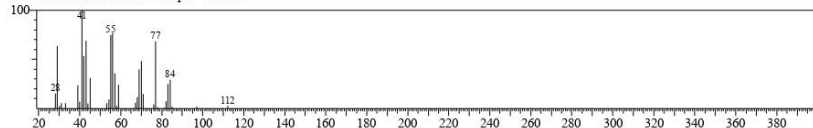


<< Target >>

Line# 2 R Time: 19.775(Scan# 1990) MassPeaks: 34

RawMode: Averaged 19.767-19.783(1989-1991) BasePeak: 41.05(4036363)

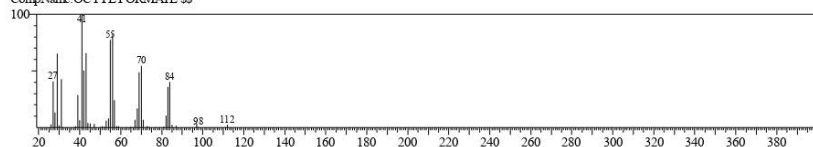
BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit#1 Entry: 34441 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₉H₁₈O₂ CAS: 112-32-3 MolWeight: 158 RetIndex: 0

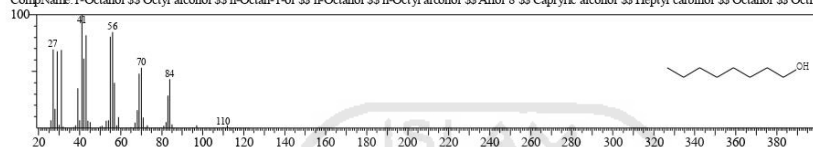
CompName: OCTYL FORMATE \$S



Hit#2 Entry: 5507 Library: NIST62 LIB

SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

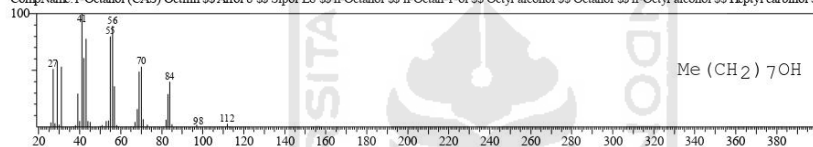
CompName: 1-Octanol \$S n-Octanol \$S n-Octyl alcohol \$S Alfol 8 \$S Caprylic alcohol \$S Heptyl carbinol \$S Octanol \$S Octilin \$S Sipol L8 \$S Alcohol c-8 \$S Capryl alcohol \$S



Hit#3 Entry: 16383 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

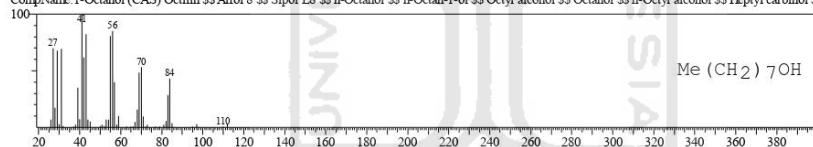
CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$S Alfol 8 \$S Sipol L8 \$S n-Octanol \$S n-Octan-1-ol \$S Octyl alcohol \$S Octanol \$S n-Octyl alcohol \$S Heptyl carbinol \$S Caprylic alcohol \$S 1-Hydroxyoctane \$S Octan-1



Hit#4 Entry: 16386 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

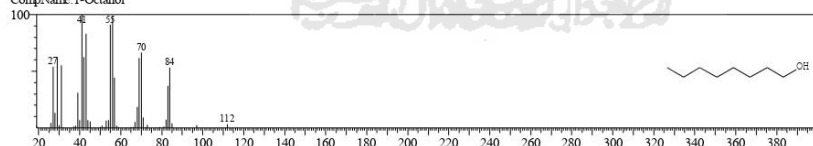
CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$S Alfol 8 \$S Sipol L8 \$S n-Octanol \$S n-Octan-1-ol \$S Octyl alcohol \$S Octanol \$S n-Octyl alcohol \$S Heptyl carbinol \$S Caprylic alcohol \$S 1-Hydroxyoctane \$S Octan-1



Hit#5 Entry: 3043 Library: NIST12 LIB

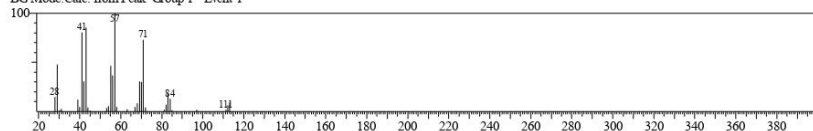
SI90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

CompName: 1-Octanol

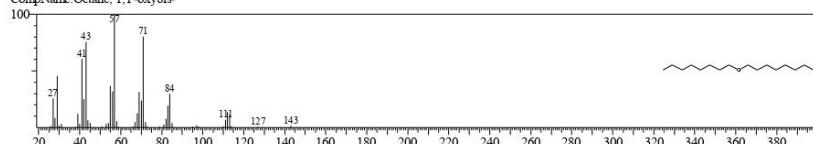


<< Target >>

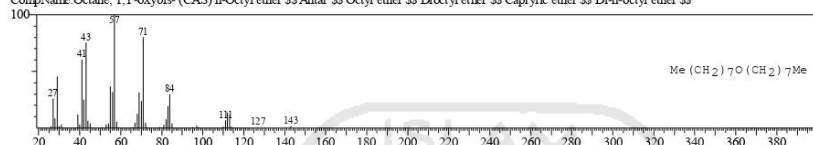
Line# 3 R Time: 35.783 (Scan# 3911) MassPeaks: 33
 RawMode: Averaged 35.775-35.792 (3910-3912) BasePeak: 57.10 (233773)
 BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



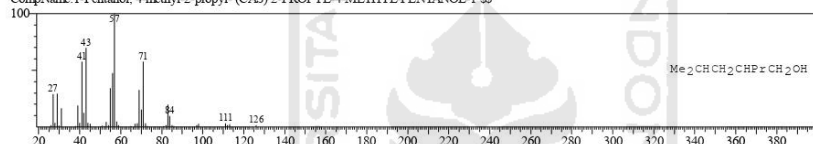
Hit# 1 Entry: 9015 Library: NIST12 LIB
 SI: 95 Formula: C₁₆H₃₄O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0
 CompName: Octane, 1,1'-oxybis-



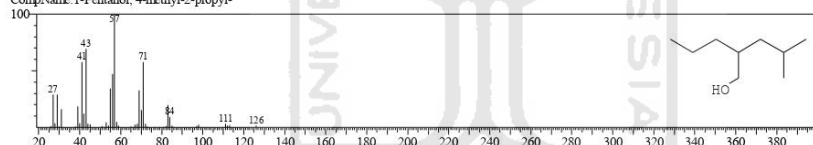
Hit# 2 Entry: 103317 Library: WILEY229 LIB
 SI: 95 Formula: C₁₆H₃₄O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0
 CompName: Octane, 1,1'-oxybis- (CAS) n-Octyl ether SS Antar SS Octyl ether SS Dioctyl ether SS Caprylic ether SS Di-n-octyl ether SS



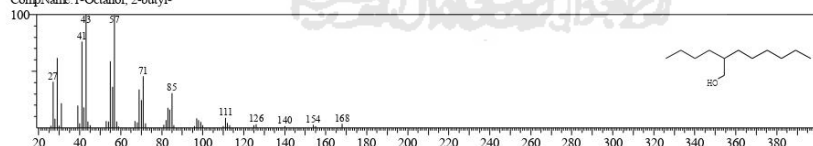
Hit# 3 Entry: 24473 Library: WILEY229 LIB
 SI: 91 Formula: C₉H₂₀O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0
 CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl- (CAS) 2-PROPYL-4-METHYL-PENTANOL-1 SS



Hit# 4 Entry: 8543 Library: NIST62 LIB
 SI: 91 Formula: C₉H₂₀O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0
 CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl-



Hit# 5 Entry: 6873 Library: NIST12 LIB
 SI: 91 Formula: C₁₂H₂₆O CAS: 3913-02-8 MolWeight: 186 RetIndex: 0
 CompName: 1-Octanol, 2-butyl-



Lampiran 3. Hasil GCMS Variasi Jumlah DMC

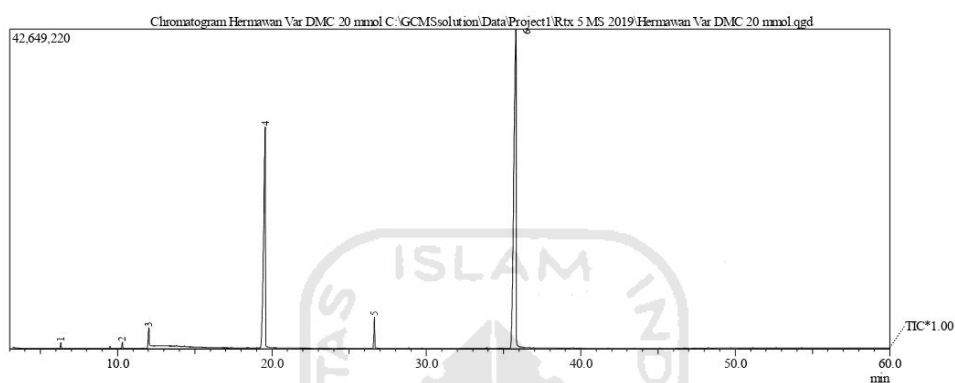
1. DMC 20 mmol

C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Hermawan Var DMC 20 mmol.qgd 12/30/2019

Lab Kimia Organik FMIPA - UGM

Sample Information

Analyzed by : Admin
 Sample Name : Hermawan Var DMC 20 mmol
 Sample ID :
 Data File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Hermawan Var DMC 20 mmol.qgd
 Method File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Organik baru.qsm
 Tuning File : C:\GCMSsolution\System1\Tune1\July 24 2019.qgt



Peak#	R Time	I Time	F Time	Area	Area%	Height
1	6.318	6.242	6.392	2319761	0.33	765122
2	10.309	10.242	10.392	2615464	0.37	826404
3	12.024	11.925	12.108	10634091	1.50	2561068
4	19.557	19.233	19.708	236845042	33.46	29413064
5	26.641	26.492	26.775	16757973	2.37	4121810
6	35.793	35.408	35.992	438736602	61.98	41745574
				707908933	100.00	79433042

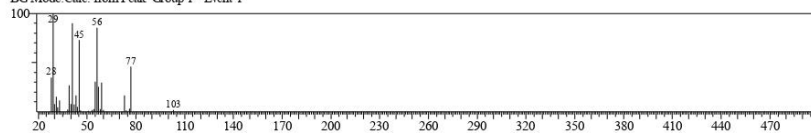
Library

<< Target >>

Line# 1 R Time: 6.317 (Scan# 375) MassPeaks: 29

RawMode: Averaged 6.308-6.325 (374-376) BasePeak: 29.05 (107760)

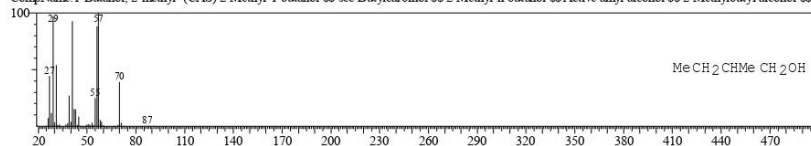
BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 3314 Library: WILEY229.LIB

SI 82 Formula: C5H12O CAS: 137-32-6 MolWeight: 88 RetIndex: 0

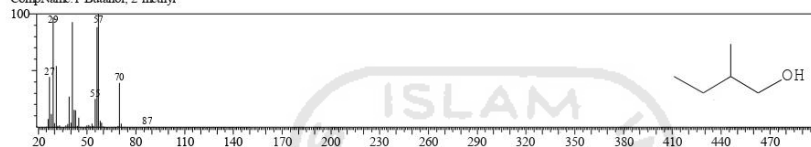
CompName: 1-Butanol, 2-methyl- (CAS) 2-Methyl-1-butanol \$\$ sec-Butylcarbinol \$\$ 2-Methyl-n-butanol \$\$ Active anyl alcohol \$\$ 2-Methylbutyl alcohol \$\$ Primary active anyl alcohol \$\$ Active primary anyl



Hit# 2 Entry: 710 Library: NIST12.LIB

SI 82 Formula: C5H12O CAS: 137-32-6 MolWeight: 88 RetIndex: 0

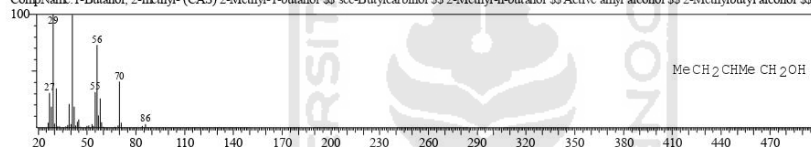
CompName: 1-Butanol, 2-methyl-



Hit# 3 Entry: 3311 Library: WILEY229.LIB

SI 82 Formula: C5H12O CAS: 137-32-6 MolWeight: 88 RetIndex: 0

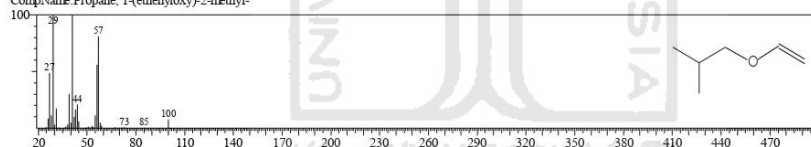
CompName: 1-Butanol, 2-methyl- (CAS) 2-Methyl-1-butanol \$\$ sec-Butylcarbinol \$\$ 2-Methyl-n-butanol \$\$ Active anyl alcohol \$\$ 2-Methylbutyl alcohol \$\$ Primary active anyl alcohol \$\$ Active primary anyl



Hit# 4 Entry: 1179 Library: NIST12.LIB

SI 81 Formula: C6H12O CAS: 109-53-5 MolWeight: 100 RetIndex: 0

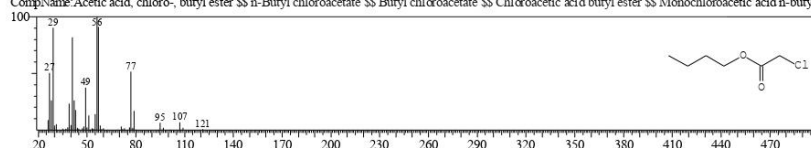
CompName: Propane, 1-(ethenoxy)-2-methyl-



Hit# 5 Entry: 9608 Library: NIST62.LIB

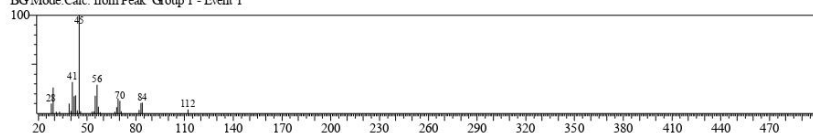
SI 81 Formula: C6H11ClO2 CAS: 590-02-3 MolWeight: 150 RetIndex: 0

CompName: Acetic acid, chloro-, butyl ester \$\$ n-Butyl chloroacetate \$\$ Butyl chloroacetate \$\$ Chloroacetic acid butyl ester \$\$ Monochloroacetic acid n-butyl ester \$\$ Chloroacetic acid n-butyl ester



<< Target >>

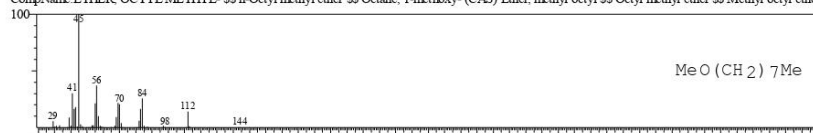
Line# 2 R Time: 10.308 (Scan# 854) MassPeaks: 27
 RawMode: Averaged 10.300-10.317 (853-855) BasePeak: 45.05 (216865)
 BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 24474 Library: WILEY229 LIB

SI92 Formula: C₉H₂₀O CAS: 929-56-6 MolWeight: 144 RetIndex: 0

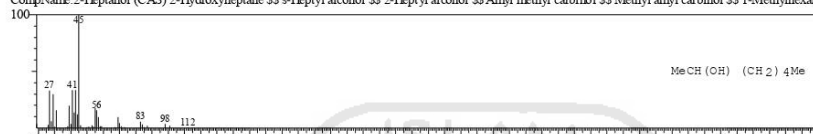
CompName: ETHER, OCTYL METHYL- \$\$ n-Octyl methyl ether \$\$ Octane, 1-methoxy- (CAS) Ether, methyl octyl \$\$ Octyl methyl ether \$\$ Methyl octyl ether \$\$ 1-Methoxyoctane \$\$



Hit# 2 Entry: 10566 Library: WILEY229 LIB

SI90 Formula: C₇H₁₆O CAS: 543-49-7 MolWeight: 116 RetIndex: 0

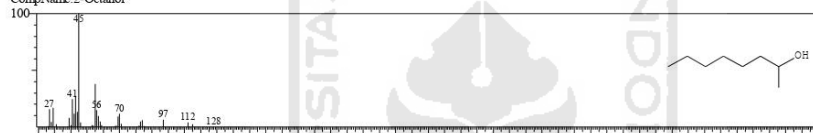
CompName: 2-Heptanol (CAS) 2-Hydroxyheptane \$\$ s-Heptyl alcohol \$\$ 2-Heptyl alcohol \$\$ Amyl methyl carbinol \$\$ Methyl amyl carbinol \$\$ 1-Methylhexanol \$\$



Hit# 3 Entry: 3052 Library: NIST12 LIB

SI90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 123-96-6 MolWeight: 130 RetIndex: 0

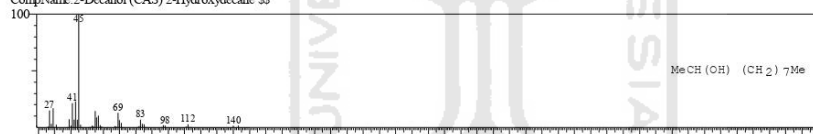
CompName: 2-Octanol



Hit# 4 Entry: 34590 Library: WILEY229 LIB

SI90 Formula: C₁₀H₂₂O CAS: 1120-06-5 MolWeight: 158 RetIndex: 0

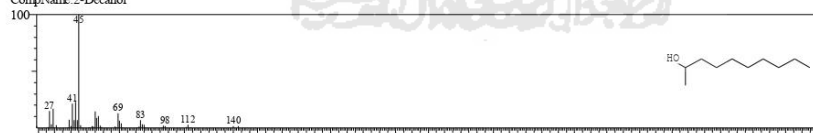
CompName: 2-Decanol (CAS) 2-Hydroxydecane \$\$



Hit# 5 Entry: 5218 Library: NIST12 LIB

SI90 Formula: C₁₀H₂₂O CAS: 1120-06-5 MolWeight: 158 RetIndex: 0

CompName: 2-Decanol

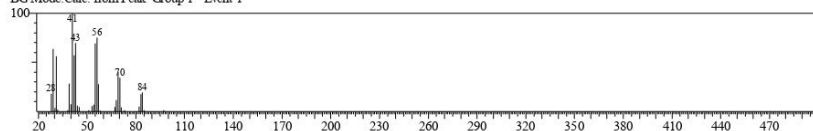


<< Target >>

Line# 3 R Time: 12.025(Scan# 1060) MassPeaks: 31

RawMode: Averaged 12.017-12.033(1059-1061) BasePeak: 41.05(328110)

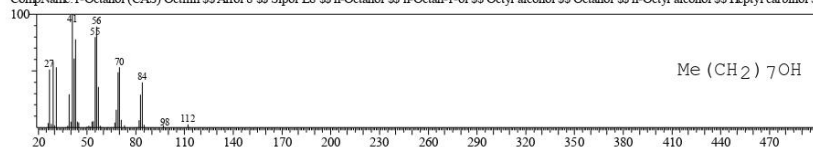
BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 16383 Library: WILEY229 LIB

SI95 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

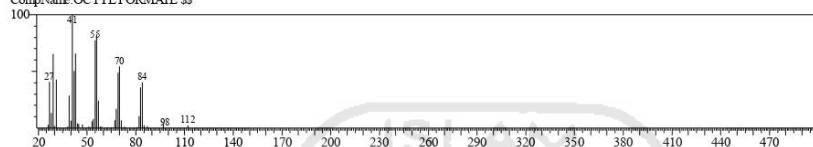
CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$\$ Alfol 8 \$\$ Sipol L8 \$\$ n-Octanol \$\$ n-Octan-1-ol \$\$ Octyl alcohol \$\$ Octanol \$\$ n-Octyl alcohol \$\$ Heptyl carbinol \$\$ Caprylic alcohol \$\$ 1-Hydroxyoctane \$\$ Octan-1



Hit# 2 Entry: 34441 Library: WILEY229 LIB

SI95 Formula: C₉H₁₈O₂ CAS: 112-32-3 MolWeight: 158 RetIndex: 0

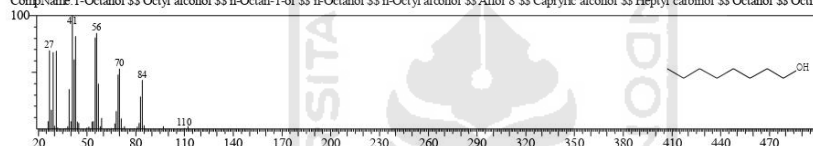
CompName: OCTYL FORMATE \$\$



Hit# 3 Entry: 5507 Library: NIST02 LIB

SI95 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

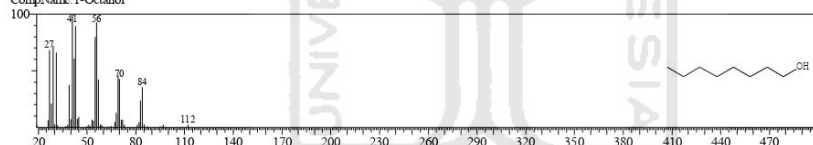
CompName: 1-Octanol \$\$ Octyl alcohol \$\$ n-Octan-1-ol \$\$ n-Octanol \$\$ n-Octyl alcohol \$\$ Alfol 8 \$\$ Caprylic alcohol \$\$ Heptyl carbinol \$\$ Octanol \$\$ Octilin \$\$ Sipol L8 \$\$ Alcohol c-8 \$\$ Capryl alcohol \$\$



Hit# 4 Entry: 3042 Library: NIST02 LIB

SI95 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

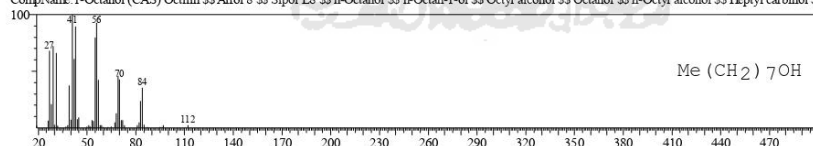
CompName: 1-Octanol



Hit# 5 Entry: 16385 Library: WILEY229 LIB

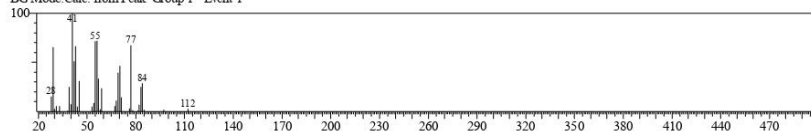
SI95 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$\$ Alfol 8 \$\$ Sipol L8 \$\$ n-Octanol \$\$ n-Octan-1-ol \$\$ Octyl alcohol \$\$ Octanol \$\$ n-Octyl alcohol \$\$ Heptyl carbinol \$\$ Caprylic alcohol \$\$ 1-Hydroxyoctane \$\$ Octan-1

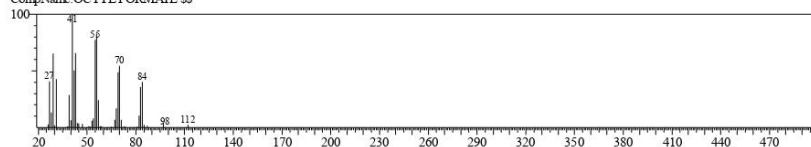


<< Target >>

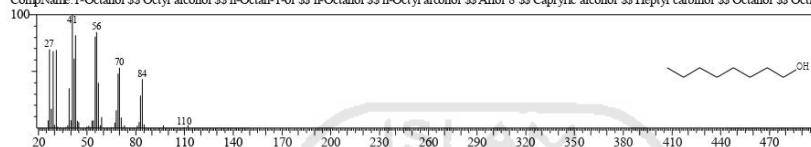
Line# 4 R Time: 19.558 (Scan# 1964) MassPeaks: 35
 RawMode: Averaged 19.550-19.567 (1963-1965) BasePeak: 41.05 (3279168)
 BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



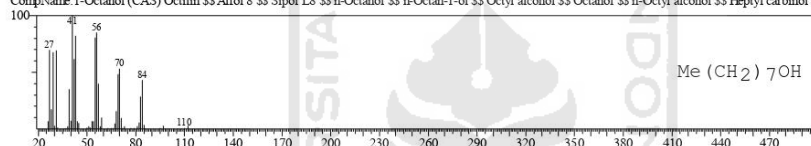
Hit# 1 Entry: 34441 Library: WILEY229 LIB
 SI91 Formula: C₉H₁₈O₂ CAS: 112-32-3 MolWeight: 158 RetIndex: 0
 CompName: OCTYL FORMATE \$



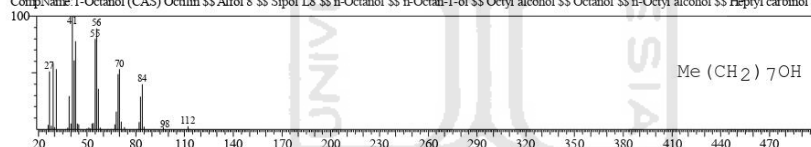
Hit# 2 Entry: 5507 Library: NIST02 LIB
 SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0
 CompName: 1-Octanol \$ Octyl alcohol \$ n-Octan-1-ol \$ n-Octanol \$ n-Octyl alcohol \$ Alfol 8 \$ Caprylic alcohol \$ Heptyl carbinol \$ Octanol \$ Octilin \$ Sipol L8 \$ Alcohol c-8 \$ Capryl alcohol \$



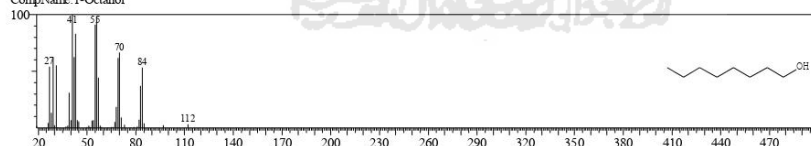
Hit# 3 Entry: 16386 Library: WILEY229 LIB
 SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0
 CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$ Alfol 8 \$ Sipol L8 \$ n-Octanol \$ n-Octan-1-ol \$ Octyl alcohol \$ Octanol \$ n-Octyl alcohol \$ Heptyl carbinol \$ Caprylic alcohol \$ 1-Hydroxyoctane \$ Octan-1



Hit# 4 Entry: 16383 Library: WILEY229 LIB
 SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0
 CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$ Alfol 8 \$ Sipol L8 \$ n-Octanol \$ n-Octan-1-ol \$ Octyl alcohol \$ Octanol \$ n-Octyl alcohol \$ Heptyl carbinol \$ Caprylic alcohol \$ 1-Hydroxyoctane \$ Octan-1

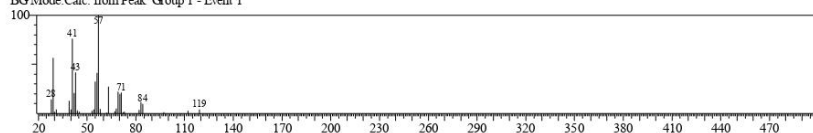


Hit# 5 Entry: 3043 Library: NIST12 LIB
 SI89 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0
 CompName: 1-Octanol



<< Target >>

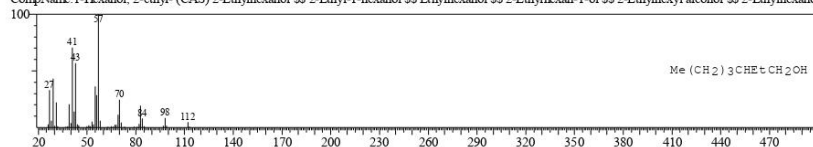
Line# 5 R Time: 26.642 (Scan#: 2814) Mass Peaks: 32
 Raw Mode: Averaged 26.633-26.650 (2813-2815) Base Peak: 57.10 (694006)
 BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 16454 Library: WILEY229 LIB

SI: 90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 104-76-7 MolWeight: 130 RetIndex: 0

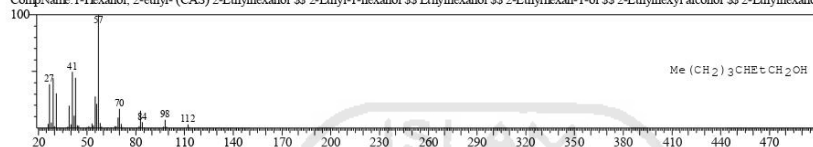
CompName: 1-Hexanol, 2-ethyl- (CAS) 2-Ethylhexanol \$\$ Ethylhexanol \$\$ 2-Ethylhexan-1-ol \$\$ 2-Ethylhexyl alcohol \$\$ 2-Ethylhexanol-1 \$\$



Hit# 2 Entry: 16458 Library: WILEY229 LIB

SI: 88 Formula: C₈H₁₈O CAS: 104-76-7 MolWeight: 130 RetIndex: 0

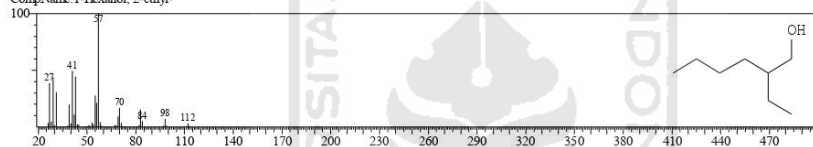
CompName: 1-Hexanol, 2-ethyl- (CAS) 2-Ethylhexanol \$\$ Ethylhexanol \$\$ 2-Ethylhexan-1-ol \$\$ 2-Ethylhexyl alcohol \$\$ 2-Ethylhexanol-1 \$\$



Hit# 3 Entry: 3054 Library: NIST12 LIB

SI: 88 Formula: C₈H₁₈O CAS: 104-76-7 MolWeight: 130 RetIndex: 0

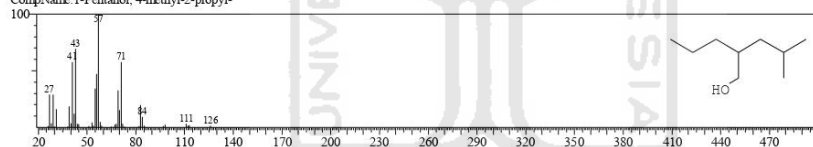
CompName: 1-Hexanol, 2-ethyl-



Hit# 4 Entry: 8543 Library: NIST62 LIB

SI: 88 Formula: C₉H₂₀O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0

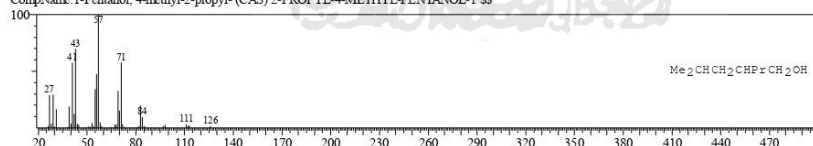
CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl-



Hit# 5 Entry: 24473 Library: WILEY229 LIB

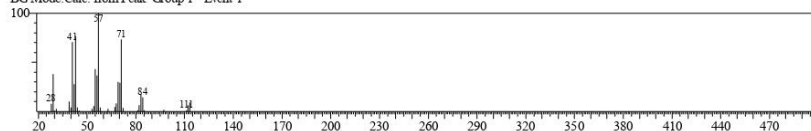
SI: 88 Formula: C₉H₂₀O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0

CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl- (CAS) 2-PROPYL-4-METHYL-PENTANOL-1 \$\$



<< Target >>

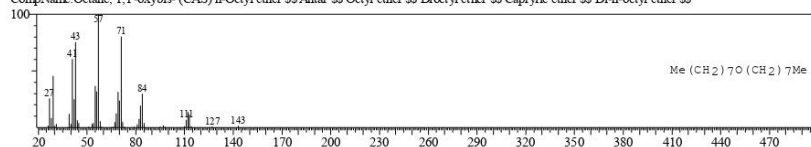
Line# 6 R Time: 35.792(Scan# 3912) MassPeaks: 33
 RawMode: Averaged 35.783-35.800(3911-3913) BasePeak: 57.10(6349427)
 BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit#1 Entry: 103317 Library: WILEY229 LIB

SI96 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

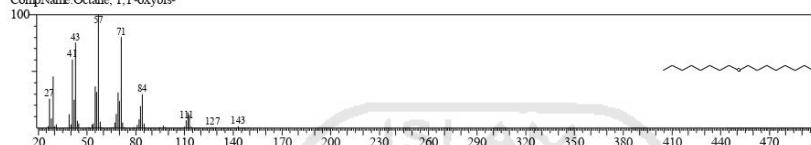
CompName: Octane, 1,1'-oxybis- (CAS) n-Octyl ether SS Octyl ether SS Dioctyl ether SS Caprylic ether SS Di-n-octyl ether SS



Hit#2 Entry: 9015 Library: NIST12 LIB

SI95 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

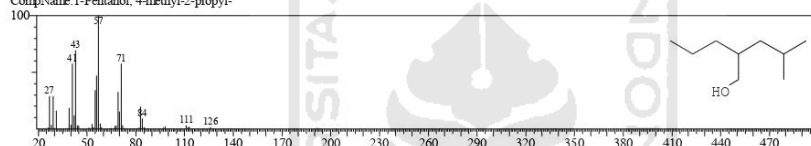
CompName: Octane, 1,1'-oxybis-



Hit#3 Entry: 8543 Library: NIST62 LIB

SI92 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0

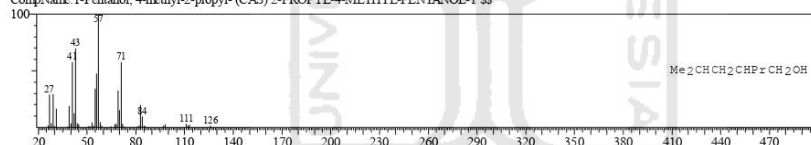
CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl-



Hit#4 Entry: 24473 Library: WILEY229 LIB

SI92 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0

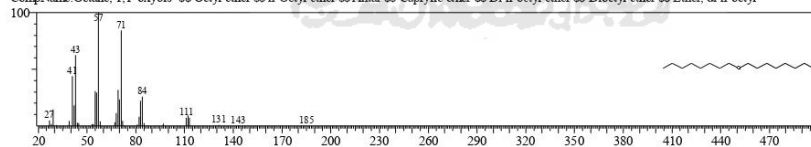
CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl- (CAS) 2-PROPYL-4-METHYL-PENTANOL-1 SS



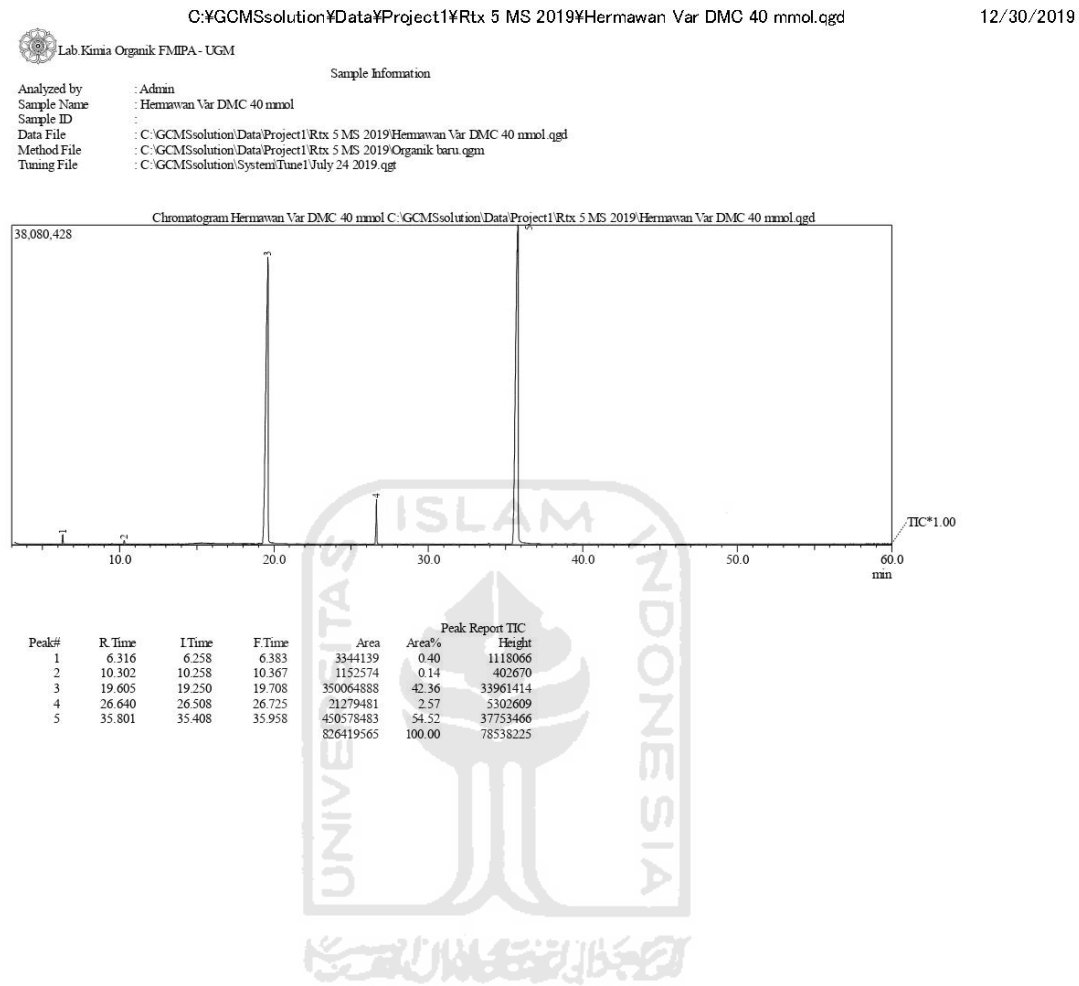
Hit#5 Entry: 32426 Library: NIST62 LIB

SI92 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

CompName: Octane, 1,1'-oxybis- SS Octyl ether SS n-Octyl ether SS Antar SS Caprylic ether SS Di-n-octyl ether SS Dioctyl ether SS Ether, di-n-octyl-



2. DMC 40 mmol



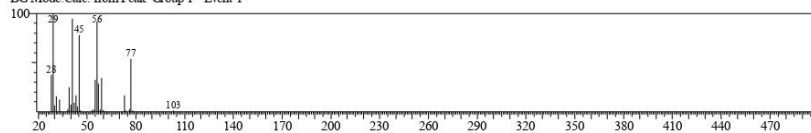
Library

<< Target >>

Line# 1 R Time: 6.317 (Scan# 375) MassPeaks: 28

RawMode: Averaged 6.308-6.325 (374-376) BasePeak: 29.05 (151754)

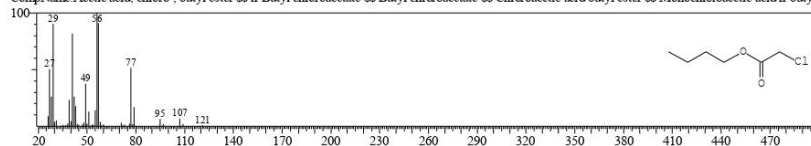
BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 9608 Library: NIST12 LIB

SI: 83 Formula: C6H11ClO2 CAS: 590-02-3 MolWeight: 150 RetIndex: 0

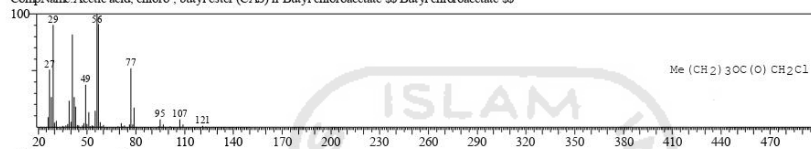
CompName: Acetic acid, chloro-, butyl ester \$\$ n-Butyl chloroacetate \$\$ Butyl chloroacetate \$\$ Chloroacetic acid butyl ester \$\$ Monochloroacetic acid n-butyl ester \$\$ Chloroacetic acid n-butyl ester



Hit# 2 Entry: 27206 Library: WILEY229 LIB

SI: 83 Formula: C6H11ClO2 CAS: 590-02-3 MolWeight: 150 RetIndex: 0

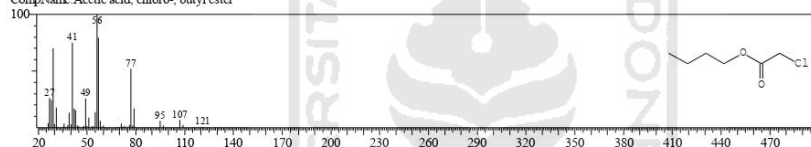
CompName: Acetic acid, chloro-, butyl ester (CAS) n-Butyl chloroacetate \$\$ Butyl chloroacetate \$\$



Hit# 3 Entry: 4458 Library: NIST12 LIB

SI: 82 Formula: C6H11ClO2 CAS: 590-02-3 MolWeight: 150 RetIndex: 0

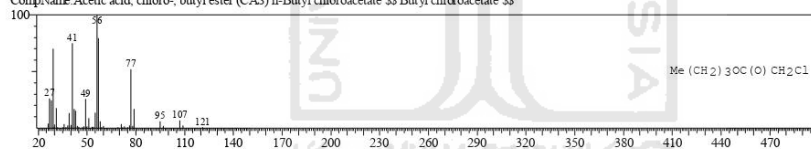
CompName: Acetic acid, chloro-, butyl ester



Hit# 4 Entry: 27205 Library: WILEY229 LIB

SI: 82 Formula: C6H11ClO2 CAS: 590-02-3 MolWeight: 150 RetIndex: 0

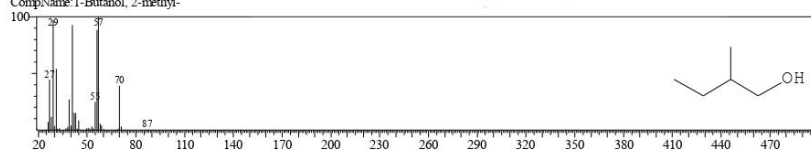
CompName: Acetic acid, chloro-, butyl ester (CAS) n-Butyl chloroacetate \$\$ Butyl chloroacetate \$\$



Hit# 5 Entry: 710 Library: NIST12 LIB

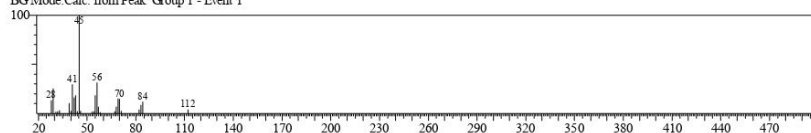
SI: 81 Formula: C5H12O CAS: 137-32-6 MolWeight: 88 RetIndex: 0

CompName: 1-Butanol, 2-methyl-



<< Target >>

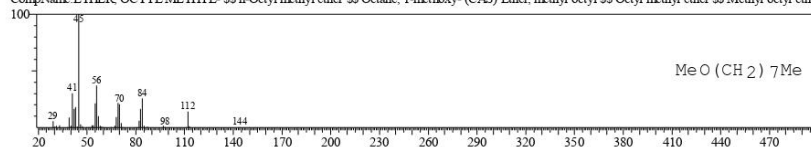
Line# 2 R Time: 10.300 (Scan# 853) MassPeaks: 28
 RawMode: Averaged 10.292-10.308 (852-854) BasePeak: 45.05 (102698)
 BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 24474 Library: WILEY229 LIB

SI: 92 Formula: C₉H₂₀O CAS: 929-56-6 MolWeight: 144 RetIndex: 0

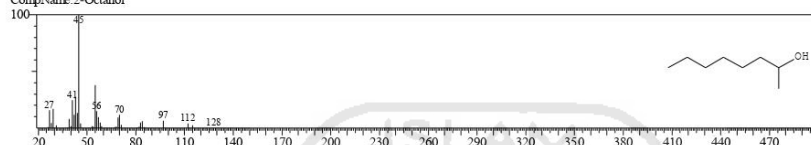
CompName: ETHER, OCTYL METHYL- \$\$ n-Octyl methyl ether \$\$ Octane, 1-methoxy- (CAS) Ether, methyl octyl \$\$ Octyl methyl ether \$\$ Methyl octyl ether \$\$ 1-Methoxyoctane \$\$



Hit# 2 Entry: 3052 Library: NIST12 LIB

SI: 89 Formula: C₈H₁₈O CAS: 123-96-6 MolWeight: 130 RetIndex: 0

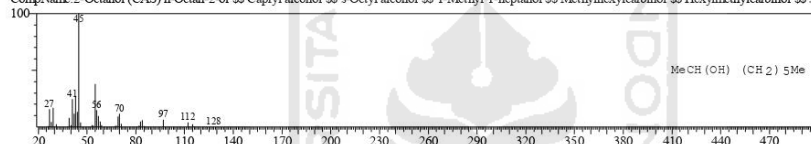
CompName: 2-Octanol



Hit# 3 Entry: 16397 Library: WILEY229 LIB

SI: 89 Formula: C₈H₁₈O CAS: 123-96-6 MolWeight: 130 RetIndex: 0

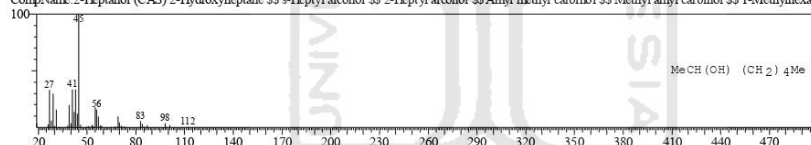
CompName: 2-Octanol (CAS) n-Octan-2-ol \$\$ Capryl alcohol \$\$ s-Octyl alcohol \$\$ 1-Methyl-1-heptanol \$\$ Methylheptyl carbinol \$\$ Hexylmethylcarbinol \$\$ sec-Caprylic alcohol \$\$ beta-Octyl alcohol \$\$ 1-Me



Hit# 4 Entry: 10566 Library: WILEY229 LIB

SI: 89 Formula: C₇H₁₆O CAS: 543-49-7 MolWeight: 116 RetIndex: 0

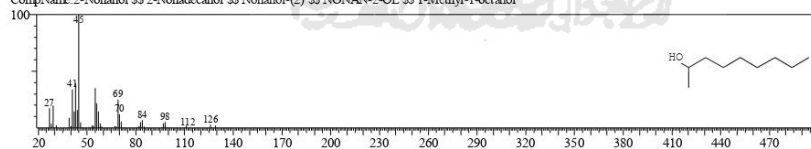
CompName: 2-Heptanol (CAS) 2-Hydroxyheptane \$\$ s-Heptyl alcohol \$\$ 2-Heptyl alcohol \$\$ Amyl methyl carbinol \$\$ Methyl amyl carbinol \$\$ 1-Methylhexanol \$\$



Hit# 5 Entry: 8514 Library: NIST62 LIB

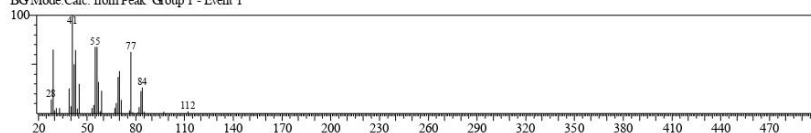
SI: 89 Formula: C₉H₂₀O CAS: 628-99-9 MolWeight: 144 RetIndex: 0

CompName: 2-Nonanol \$\$ 2-Nonadecanol \$\$ Nonanol-(2) \$\$ NONAN-2-OL \$\$ 1-Methyl-1-octanol

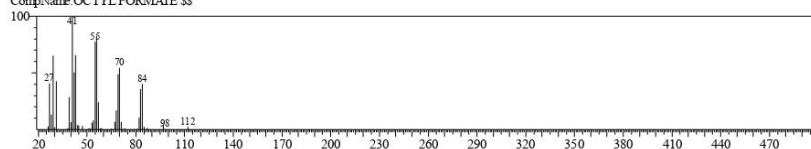


<< Target >>

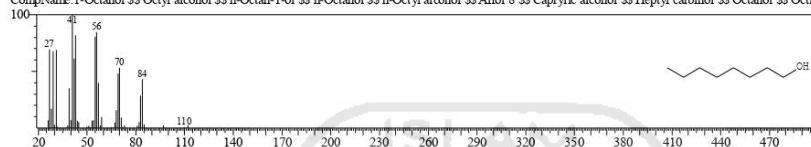
Line# 3 R Time: 19.608(Scan# 1970) MassPeaks: 34
 RawMode: Averaged 19.600-19.617(1969-1971) BasePeak: 41.05(3991611)
 BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



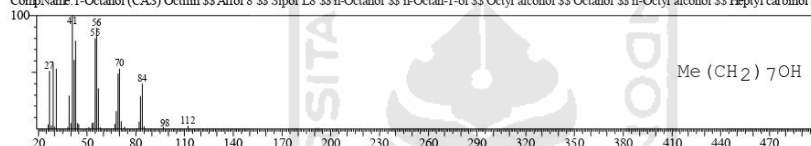
Hit# 1 Entry: 34441 Library: WILEY229 LIB
 SI: 91 Formula: C₉H₁₈O₂ CAS: 112-32-3 MolWeight: 158 RetIndex: 0
 CompName: OCTYL FORMATE \$



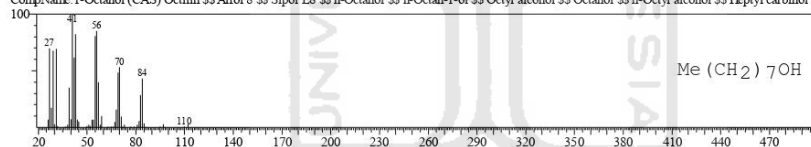
Hit# 2 Entry: 5507 Library: NIST02 LIB
 SI: 90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0
 CompName: 1-Octanol \$ Octyl alcohol \$ n-Octan-1-ol \$ n-Octanol \$ n-Octyl alcohol \$ Alfol 8 \$ Caprylic alcohol \$ Heptyl carbinol \$ Octanol \$ Octilin \$ Sipol L8 \$ Alcohol c-8 \$ Capryl alcohol \$



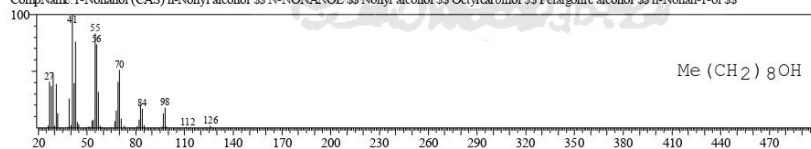
Hit# 3 Entry: 16383 Library: WILEY229 LIB
 SI: 90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0
 CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$ Alfol 8 \$ Sipol L8 \$ n-Octanol \$ n-Octan-1-ol \$ Octyl alcohol \$ Octanol \$ n-Octyl alcohol \$ Heptyl carbinol \$ Caprylic alcohol \$ 1-Hydroxyoctane \$ Octan-1



Hit# 4 Entry: 16386 Library: WILEY229 LIB
 SI: 90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0
 CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$ Alfol 8 \$ Sipol L8 \$ n-Octanol \$ n-Octan-1-ol \$ Octyl alcohol \$ Octanol \$ n-Octyl alcohol \$ Heptyl carbinol \$ Caprylic alcohol \$ 1-Hydroxyoctane \$ Octan-1

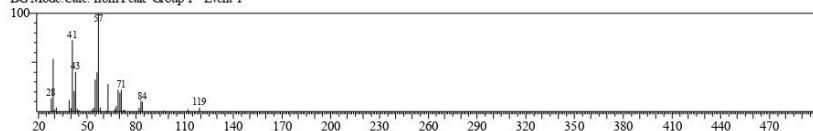


Hit# 5 Entry: 24424 Library: WILEY229 LIB
 SI: 89 Formula: C₉H₂₀O CAS: 143-08-8 MolWeight: 144 RetIndex: 0
 CompName: 1-Nonanol (CAS) n-Nonyl alcohol \$ N-NONANOL \$ Nonyl alcohol \$ Octylcarbinol \$ Pelargonic alcohol \$ n-Nonan-1-ol \$

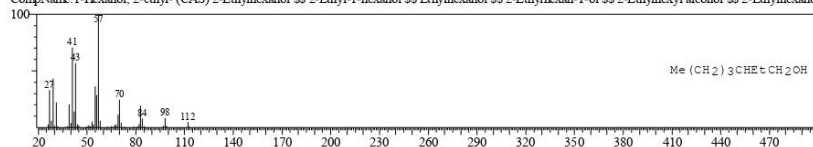


<< Target >>

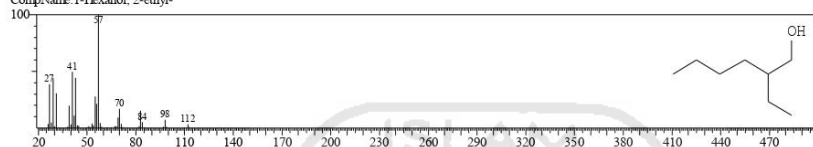
Line# 4 R Time: 26.642 (Scan#: 2814) Mass Peaks: 32
 Raw Mode: Averaged 26.633-26.650 (2813-2815) Base Peak: 57.10 (900718)
 BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



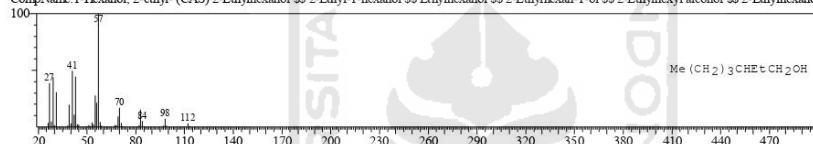
Hit# 1 Entry: 16454 Library: WILEY229 LIB
 SI: 90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 104-76-7 MolWeight: 130 RetIndex: 0
 CompName: 1-Hexanol, 2-ethyl- (CAS) 2-Ethylhexanol \$\$ Ethylhexanol \$\$ 2-Ethylhexan-1-ol \$\$ 2-Ethylhexyl alcohol \$\$ 2-Ethylhexanol-1 \$\$



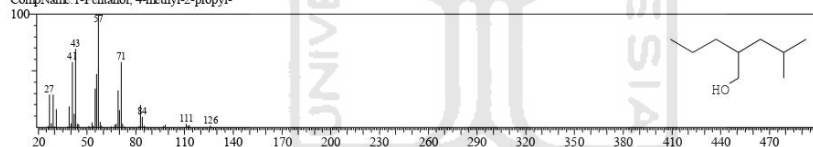
Hit# 2 Entry: 3054 Library: NIST12 LIB
 SI: 88 Formula: C₈H₁₈O CAS: 104-76-7 MolWeight: 130 RetIndex: 0
 CompName: 1-Hexanol, 2-ethyl-



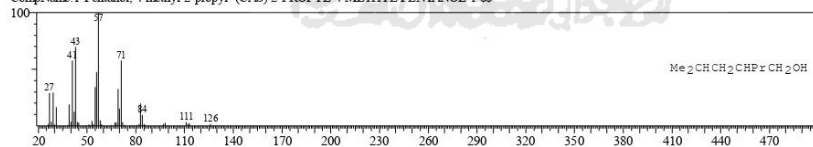
Hit# 3 Entry: 16458 Library: WILEY229 LIB
 SI: 88 Formula: C₈H₁₈O CAS: 104-76-7 MolWeight: 130 RetIndex: 0
 CompName: 1-Hexanol, 2-ethyl- (CAS) 2-Ethylhexanol \$\$ Ethylhexanol \$\$ 2-Ethylhexan-1-ol \$\$ 2-Ethylhexyl alcohol \$\$ 2-Ethylhexanol-1 \$\$



Hit# 4 Entry: 8543 Library: NIST62 LIB
 SI: 88 Formula: C₉H₂₀O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0
 CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl-

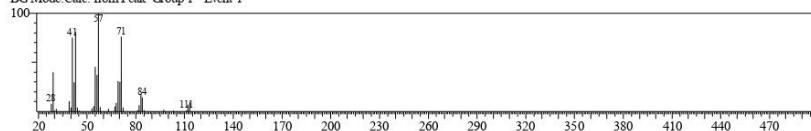


Hit# 5 Entry: 24473 Library: WILEY229 LIB
 SI: 88 Formula: C₉H₂₀O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0
 CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl- (CAS) 2-PROPYL-4-METHYL-PENTANOL-1 \$\$

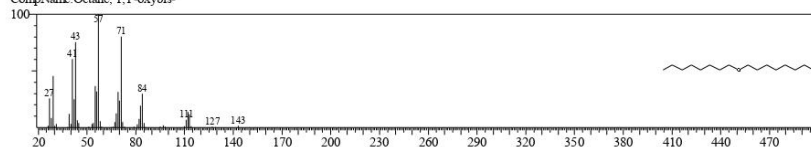


<< Target >>

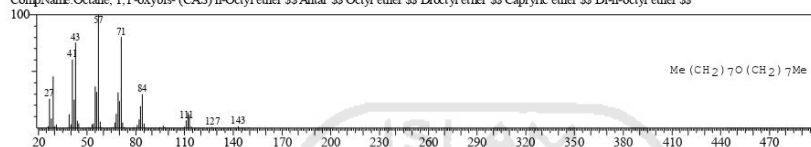
Line# 5 R Time: 35.800(Scan#: 3913) MassPeaks: 34
 RawMode: Averaged 35.792-35.808(3912-3914) BasePeak: 57.10(5503408)
 BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



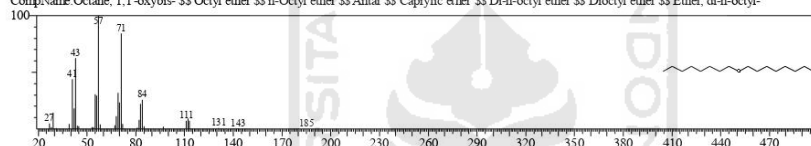
Hit# 1 Entry: 9015 Library: NIST12 LIB
 SI: 95 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0
 CompName: Octane, 1,1'-oxybis-



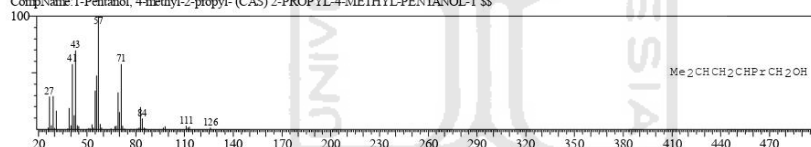
Hit# 2 Entry: 103317 Library: WILEY229 LIB
 SI: 95 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0
 CompName: Octane, 1,1'-oxybis- (CAS) n-Octyl ether \$S\$ Antiar \$S\$ Octyl ether \$S\$ Dioctyl ether \$S\$ Caprylic ether \$S\$ Di-n-octyl ether \$S\$



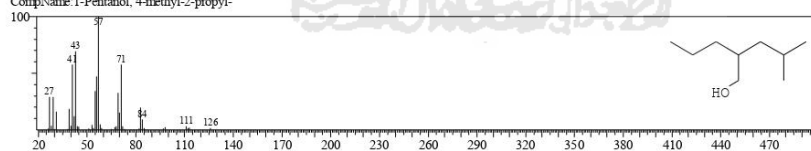
Hit# 3 Entry: 32426 Library: NIST62 LIB
 SI: 92 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0
 CompName: Octane, 1,1'-oxybis- \$S\$ Octyl ether \$S\$ n-Octyl ether \$S\$ Antiar \$S\$ Caprylic ether \$S\$ Di-n-octyl ether \$S\$ Dioctyl ether \$S\$ Ether, di-n-octyl-



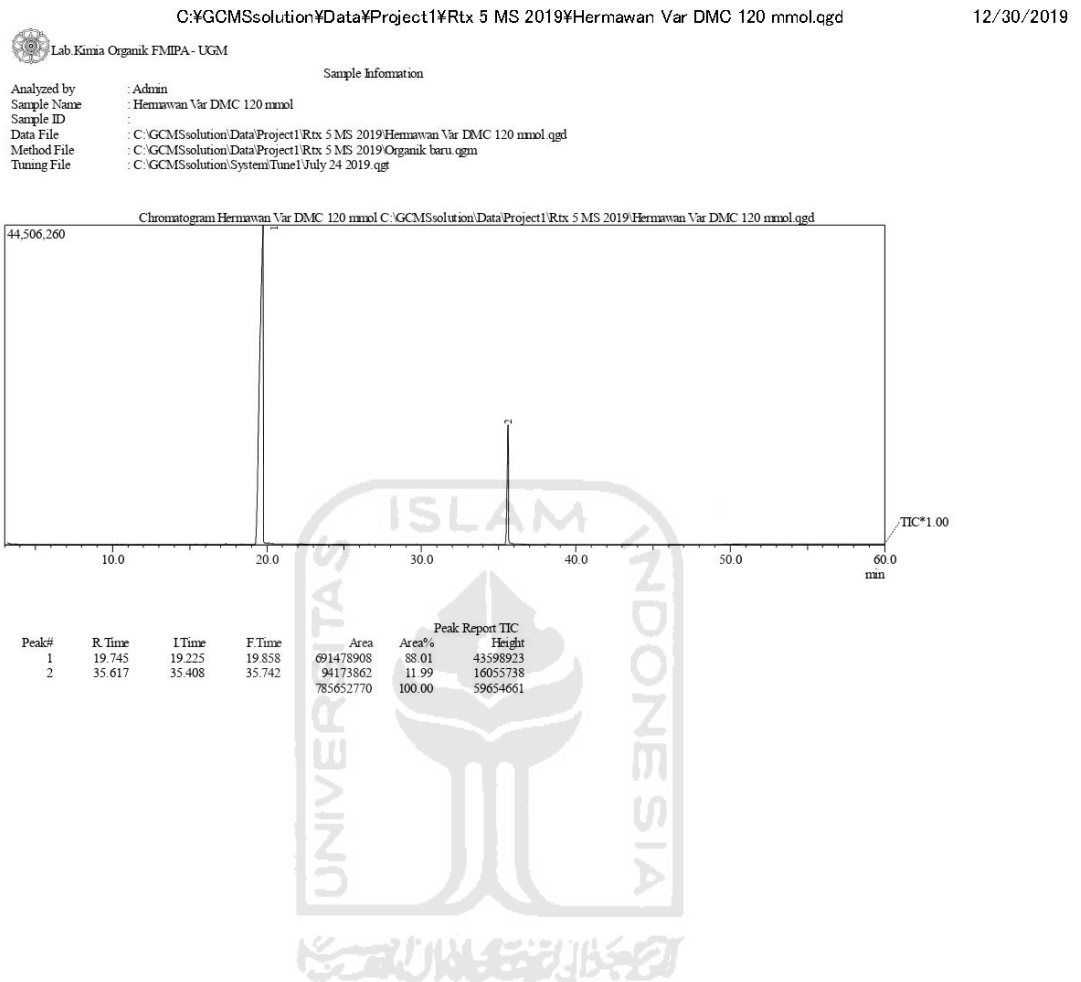
Hit# 4 Entry: 24473 Library: WILEY229 LIB
 SI: 92 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0
 CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl- (CAS) 2-PROPYL-4-METHYL-PENTANOL-1 \$S\$



Hit# 5 Entry: 8543 Library: NIST62 LIB
 SI: 92 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0
 CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl-



3. DMC 120 mmol



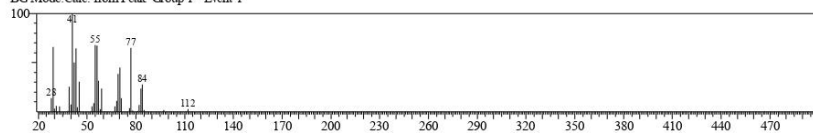
Library

<< Target >>

Line# 1 R Time: 19.742 (Scan#: 1986) MassPeaks: 35

RawMode: Averaged 19.733-19.750 (1985-1987) BasePeak: 41.05 (5149729)

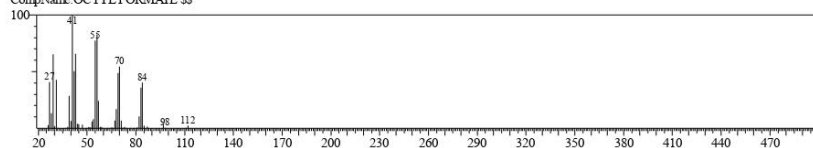
BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 34441 Library: WILEY229 LIB

SI 91 Formula: C₉H₁₈O₂ CAS: 112-32-3 MolWeight: 158 RetIndex: 0

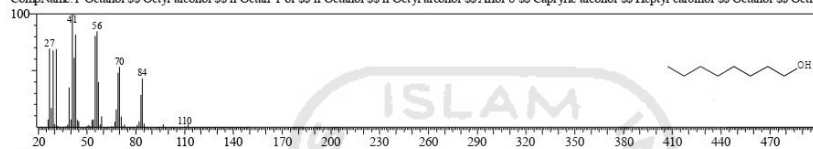
CompName: OCTYL FORMATE \$S



Hit# 2 Entry: 5507 Library: NIST62 LIB

SI 90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

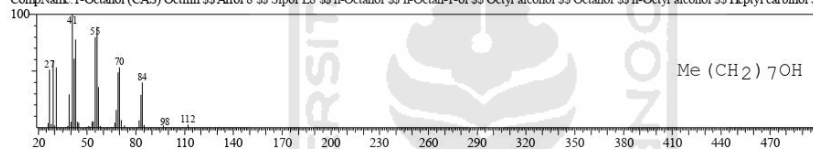
CompName: 1-Octanol \$S Octyl alcohol \$S n-Octan-1-ol \$S n-Octanol \$S n-Octyl alcohol \$S Alfol 8 \$S Caprylic alcohol \$S Heptyl carbinol \$S Octanol \$S Octilin \$S Sipol L8 \$S Alcohol c-8 \$S Capryl alcohol \$S



Hit# 3 Entry: 16383 Library: WILEY229 LIB

SI 90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

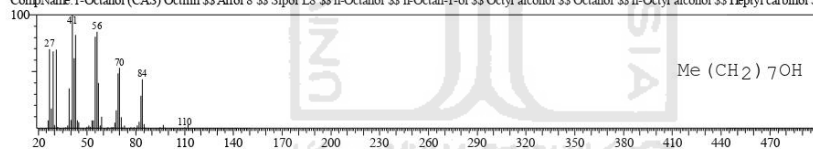
CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$S Alfol 8 \$S Sipol L8 \$S n-Octanol \$S n-Octan-1-ol \$S Octyl alcohol \$S Octanol \$S n-Octyl alcohol \$S Heptyl carbinol \$S Caprylic alcohol \$S 1-Hydroxyoctane \$S Octan-1



Hit# 4 Entry: 16386 Library: WILEY229 LIB

SI 90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

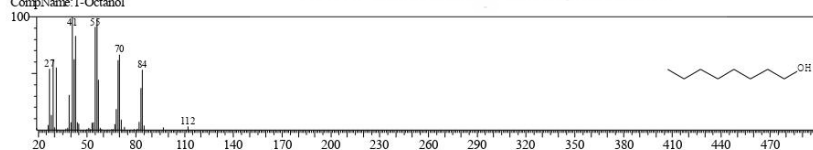
CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$S Alfol 8 \$S Sipol L8 \$S n-Octanol \$S n-Octan-1-ol \$S Octyl alcohol \$S Octanol \$S n-Octyl alcohol \$S Heptyl carbinol \$S Caprylic alcohol \$S 1-Hydroxyoctane \$S Octan-1



Hit# 5 Entry: 3043 Library: NIST12 LIB

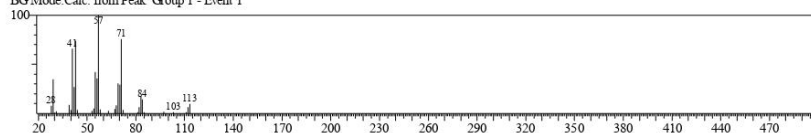
SI 89 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

CompName: 1-Octanol



<< Target >>

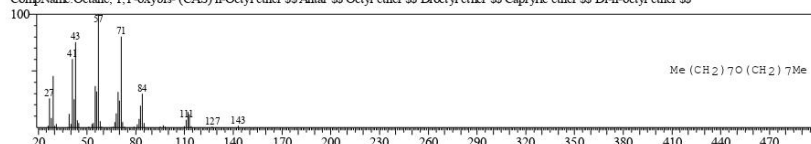
Line# 2 R Time: 35.617 (Scan# 3891) MassPeaks: 33
 RawMode: Averaged 35.608-35.625 (3890-3892) BasePeak: 57.10 (2503596)
 BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 103317 Library: WILEY229 LIB

SI96 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

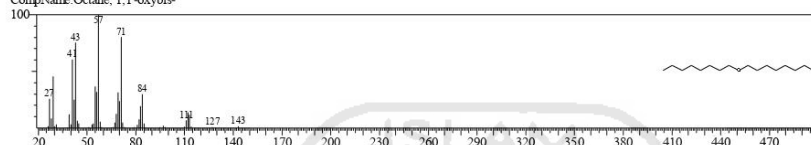
CompName: Octane, 1,1'-oxybis- (CAS) n-Octyl ether \$S\$ Antar \$S\$ Octyl ether \$S\$ Dioctyl ether \$S\$ Caprylic ether \$S\$ Di-n-octyl ether \$S\$



Hit# 2 Entry: 9015 Library: NIST12 LIB

SI96 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

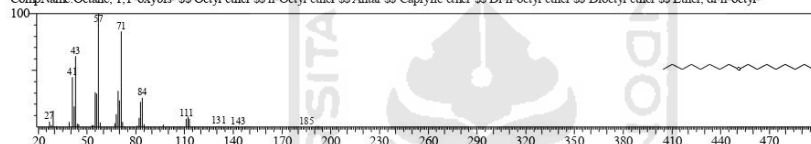
CompName: Octane, 1,1'-oxybis-



Hit# 3 Entry: 32426 Library: NIST62 LIB

SI93 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

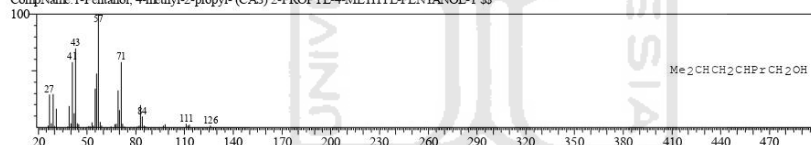
CompName: Octane, 1,1'-oxybis- \$S\$ Octyl ether \$S\$ n-Octyl ether \$S\$ Antar \$S\$ Caprylic ether \$S\$ Di-n-octyl ether \$S\$ Dioctyl ether \$S\$ Ether, di-n-octyl-



Hit# 4 Entry: 24473 Library: WILEY229 LIB

SI93 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0

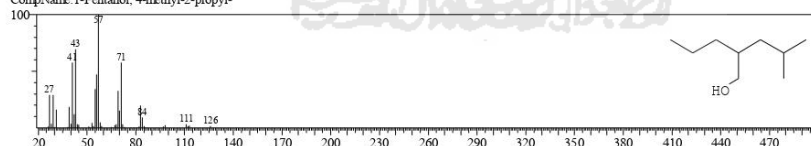
CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl- (CAS) 2-PROPYL-4-METHYL-PENTANOL-1 \$S\$



Hit# 5 Entry: 8543 Library: NIST62 LIB

SI93 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0

CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl-



4. DMC 160 mmol

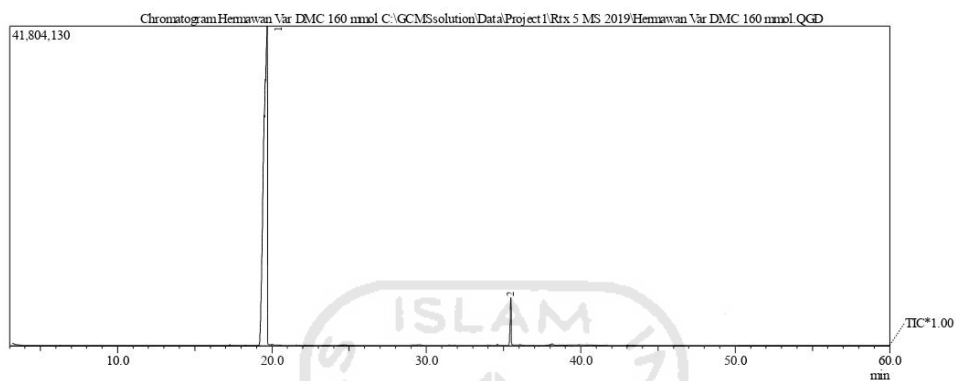
C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Hermawan Var DMC 160 mmol.QGD

1/15/2020

Lab Kimia Organik FMIPA - UGM

Sample Information

Analyzed by : Admin
 Sample Name : Hermawan Var DMC 160 mmol
 Sample ID :
 Data File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Hermawan Var DMC 160 mmol.QGD
 Method File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Organik baru.qgm
 Tuning File : C:\GCMSsolution\SystemTune1\July 24 2019.qgt



Peak#	R Time	I Time	F Time	Area	Area%	Height
1	19.686	19.158	19.808	706759931	96.33	41285384
2	35.470	35.325	35.592	26890703	3.67	6013420
				733650634	100.00	47298804

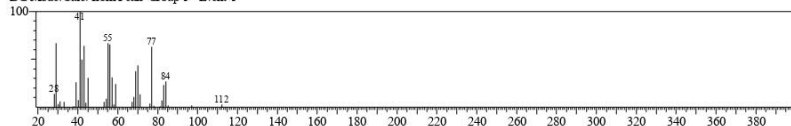
Library

<< Target >>

Line# 1 R Time: 19.683 (Scan# 1979) MassPeaks: 35

RawMode: Averaged 19.675-19.692 (1978-1980) BasePeak: 41.05 (4872447)

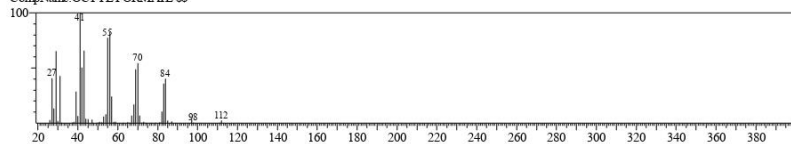
BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 34441 Library: WILEY229 LIB

SE 91 Formula: C₉H₁₈O₂ CAS: 112-32-3 MolWeight: 158 RetIndex: 0

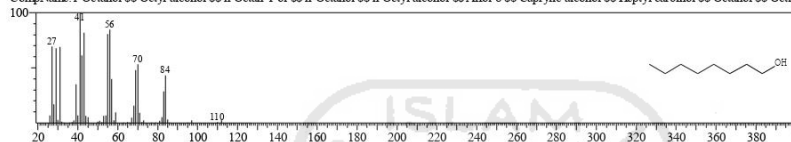
CompName: OCTYL FORMATE



Hit# 2 Entry: 5507 Library: NIST62 LIB

SE 90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

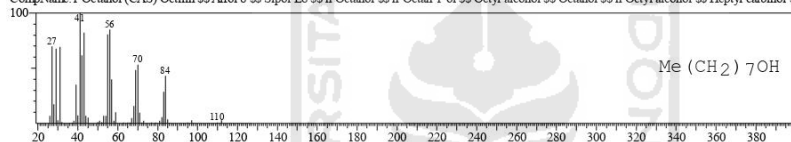
CompName: 1-Octanol \$\$ Octyl alcohol \$\$ n-Octan-1-ol \$\$ n-Octanol \$\$ n-Octyl alcohol \$\$ Alfol 8 \$\$ Caprylic alcohol \$\$ Heptyl carbinol \$\$ Octanol \$\$ Octilin \$\$ Sipol L8 \$\$ Alcohol c-8 \$\$ Capryl alcohol \$\$ n-Hept



Hit# 3 Entry: 16386 Library: WILEY229 LIB

SE 90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

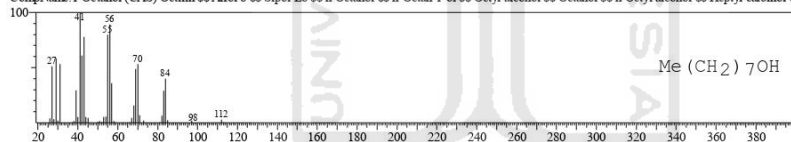
CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$\$ Alfol 8 \$\$ Sipol L8 \$\$ n-Octanol \$\$ n-Octan-1-ol \$\$ Octyl alcohol \$\$ Octanol \$\$ n-Octyl alcohol \$\$ Heptyl carbinol \$\$ Caprylic alcohol \$\$ 1-Hydroxyoctane \$\$ Octan-1-ol \$\$



Hit# 4 Entry: 16383 Library: WILEY229 LIB

SE 90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

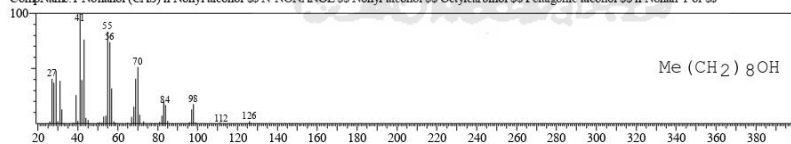
CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$\$ Alfol 8 \$\$ Sipol L8 \$\$ n-Octanol \$\$ n-Octan-1-ol \$\$ Octyl alcohol \$\$ Octanol \$\$ n-Octyl alcohol \$\$ Heptyl carbinol \$\$ Caprylic alcohol \$\$ 1-Hydroxyoctane \$\$ Octan-1-ol \$\$



Hit# 5 Entry: 24424 Library: WILEY229 LIB

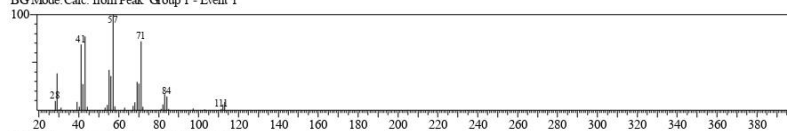
SE 89 Formula: C₉H₂₀O CAS: 143-08-8 MolWeight: 144 RetIndex: 0

CompName: 1-Nonanol (CAS) n-Nonyl alcohol \$\$ N-NONANOL \$\$ Nonyl alcohol \$\$ Octylcarbinol \$\$ Pelargonic alcohol \$\$ n-Nonan-1-ol \$\$



<< Target >>

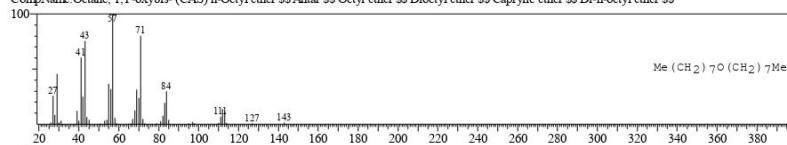
Line# 2 R Time: 35.467 (Scan# 3873) MassPeaks: 33
 RawMode Averaged 35.458-35.475 (3872-3874) BasePeak: 57.10 (913709)
 BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 103317 Library: WILEY229 LIB

SI 95 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

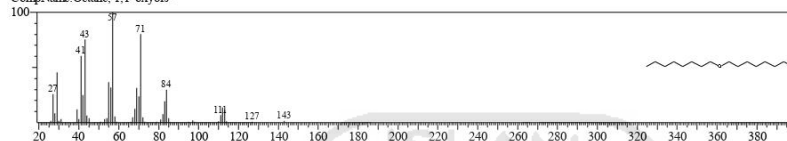
CompName: Octane, 1,1'-oxybis- (CAS) n-Octyl ether \$S\$ Antar \$S\$ Octyl ether \$S\$ Dioctyl ether \$S\$ Caprylic ether \$S\$ Di-n-octyl ether \$S\$



Hit# 2 Entry: 9015 Library: NIST12 LIB

SI 95 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

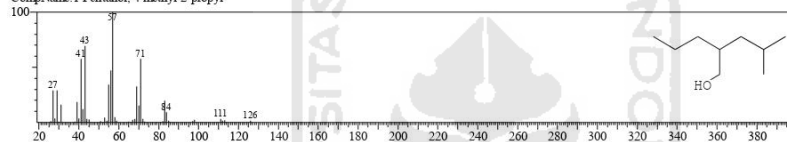
CompName: Octane, 1,1'-oxybis-



Hit# 3 Entry: 8543 Library: NIST62 LIB

SI 92 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0

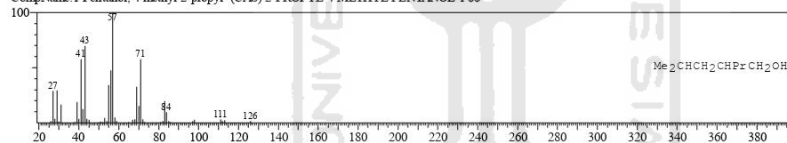
CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl-



Hit# 4 Entry: 24473 Library: WILEY229 LIB

SI 92 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0

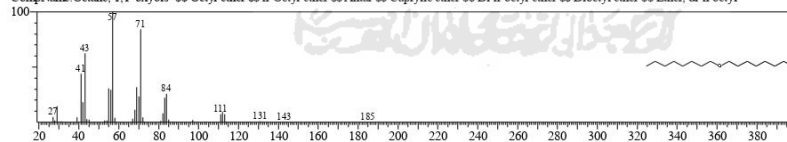
CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl- (CAS) 2-PROPYL-4-METHYL-PENTANOL-1 \$S\$



Hit# 5 Entry: 32426 Library: NIST62 LIB

SI 92 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

CompName: Octane, 1,1'-oxybis- \$S\$ Octyl ether \$S\$ n-Octyl ether \$S\$ Antar \$S\$ Caprylic ether \$S\$ Di-n-octyl ether \$S\$ Dioctyl ether \$S\$ Ether, di-n-octyl-



Lampiran 4. Hasil GCMS Variasi Jenis Basa

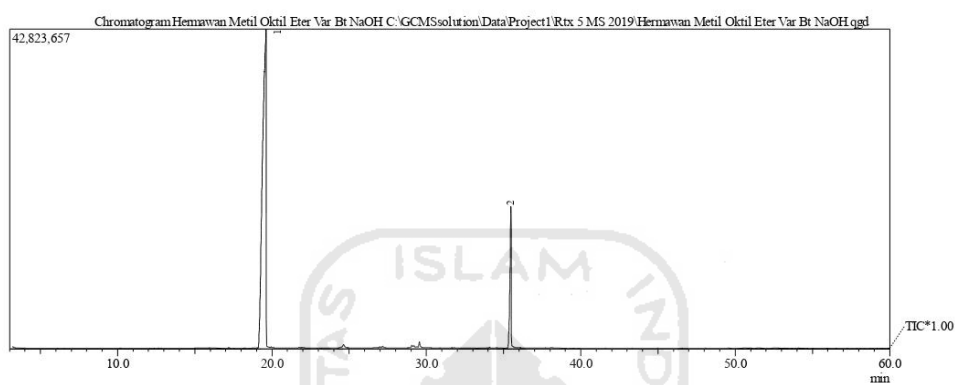
1. NaOH

C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Hermawan Metil Oktil Eter Var Bt NaOH.qgd 2/10/2020

Lab Kimia Organik FMIPA - UGM

Sample Information

Analyzed by : Admin
 Sample Name : Hermawan Metil Oktil Eter Var Bt NaOH
 Sample ID :
 Data File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Hermawan Metil Oktil Eter Var Bt NaOH.qgd
 Method File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Organik baru.qsm
 Tuning File : C:\GCMSsolution\System\Tune1\July 24 2019.qgt



Peak#	R Time	I Time	F Time	Area	Area%	Height
1	19.603	19.092	19.725	692489701	57.18	42367079
2	35.471	35.258	35.592	101818713	12.82	18527853
				794308414	100.00	60894932

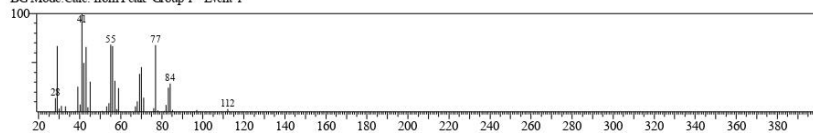
Library

<< Target >>

Line# 1 R Time: 19.600(Scan#: 1969) MassPeaks: 36

RawMode: Averaged 19.592-19.608(1968-1970) BasePeak: 41.05(4892637)

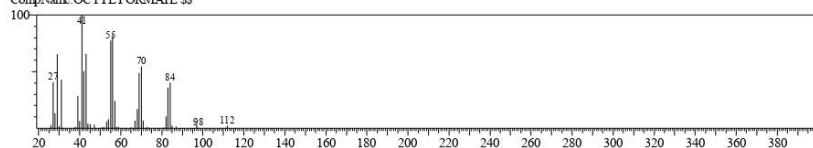
BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 34441 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₉H₁₈O₂ CAS: 112-32-3 MolWeight: 158 RetIndex: 0

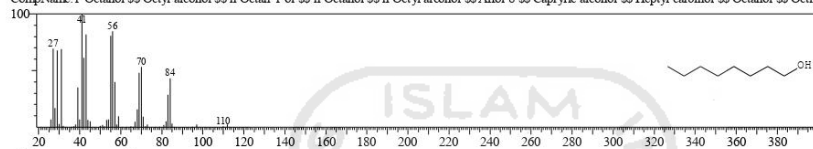
CompName: OCTYL FORMATE \$



Hit# 2 Entry: 5507 Library: NIST62 LIB

SI90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

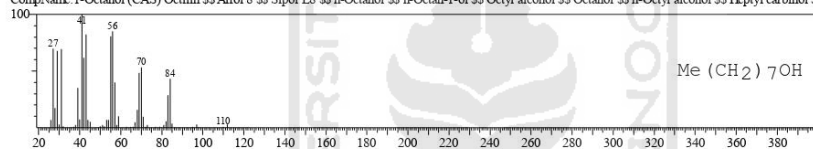
CompName: 1-Octanol \$ Octyl alcohol \$ n-Octan-1-ol \$ n-Octanol \$ n-Octyl alcohol \$ Alfol 8 \$ Caprylic alcohol \$ Heptyl carbinol \$ Octanol \$ Octilin \$ Sipol L8 \$ Alcohol c-8 \$ Capryl alcohol \$



Hit# 3 Entry: 16386 Library: WILEY229 LIB

SI90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

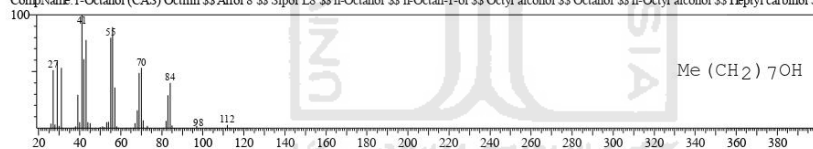
CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$ Alfol 8 \$ Sipol L8 \$ n-Octanol \$ n-Octan-1-ol \$ Octyl alcohol \$ Octanol \$ n-Octyl alcohol \$ Heptyl carbinol \$ Caprylic alcohol \$ 1-Hydroxyoctane \$ Octan-1



Hit# 4 Entry: 16383 Library: WILEY229 LIB

SI90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

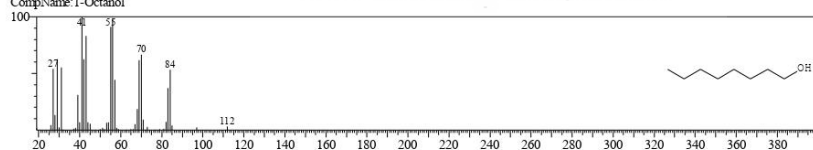
CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$ Alfol 8 \$ Sipol L8 \$ n-Octanol \$ n-Octan-1-ol \$ Octyl alcohol \$ Octanol \$ n-Octyl alcohol \$ Heptyl carbinol \$ Caprylic alcohol \$ 1-Hydroxyoctane \$ Octan-1



Hit# 5 Entry: 3043 Library: NIST12 LIB

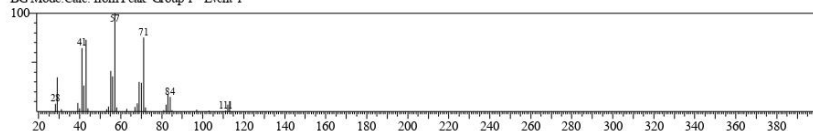
SI89 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

CompName: 1-Octanol

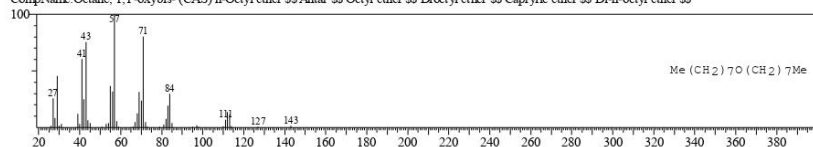


<< Target >>

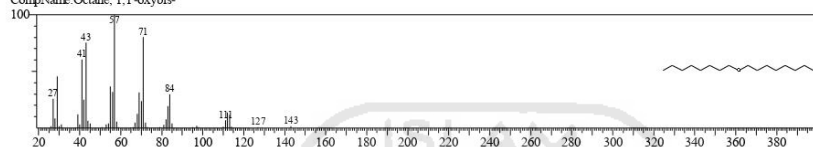
Line# 2 R Time: 35.475(Scan# 3874) MassPeaks: 32
 RawMode: Averaged 35.467-35.483(3873-3875) BasePeak: 57.05(2751591)
 BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



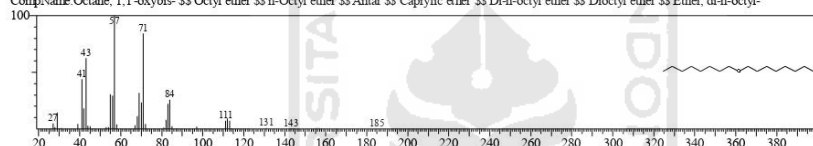
Hit# 1 Entry: 103317 Library: WILEY229 LIB
 SI: 96 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0
 CompName: Octane, 1,1'-oxybis- (CAS) n-Octyl ether \$S\$ Antar \$S\$ Octyl ether \$S\$ Dioctyl ether \$S\$ Caprylic ether \$S\$ Di-n-octyl ether \$S\$



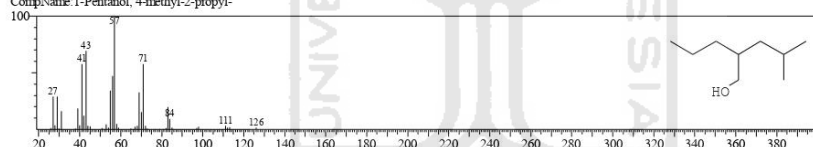
Hit# 2 Entry: 9015 Library: NIST12 LIB
 SI: 96 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0
 CompName: Octane, 1,1'-oxybis-



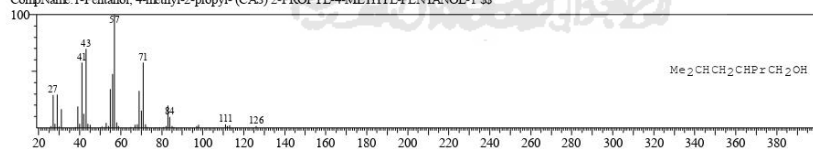
Hit# 3 Entry: 32426 Library: NIST62 LIB
 SI: 93 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0
 CompName: Octane, 1,1'-oxybis- \$S\$ Octyl ether \$S\$ n-Octyl ether \$S\$ Antar \$S\$ Caprylic ether \$S\$ Di-n-octyl ether \$S\$ Dioctyl ether \$S\$ Ether, di-n-octyl-



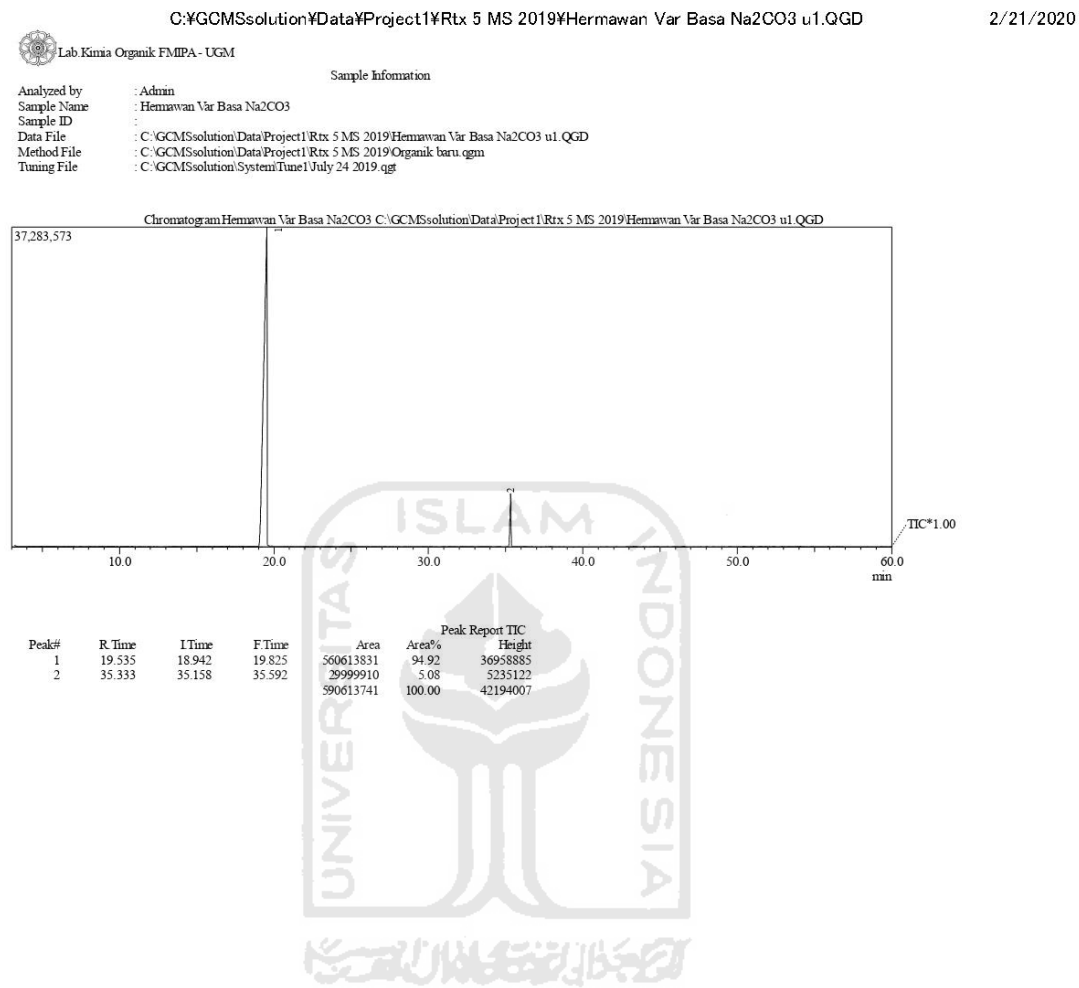
Hit# 4 Entry: 8543 Library: NIST62 LIB
 SI: 93 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0
 CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl-



Hit# 5 Entry: 24473 Library: WILEY229 LIB
 SI: 93 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0
 CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl- (CAS) 2-PROPYL-4-METHYL-PENTANOL-1 \$S\$



2. Na₂CO₃



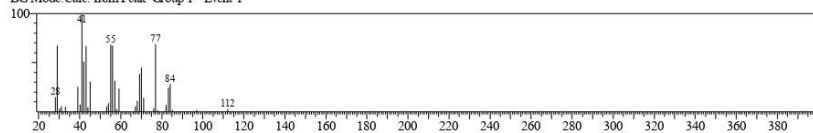
Library

<< Target >>

Line# 1 R Time: 19.533(Scan# 1961) MassPeaks: 35

RawMode: Averaged 19.525-19.542(1960-1962) BasePeak: 41.05(4256989)

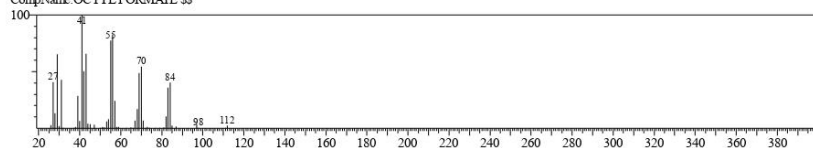
BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 34441 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₉H₁₈O₂ CAS: 112-32-3 MolWeight: 158 RetIndex: 0

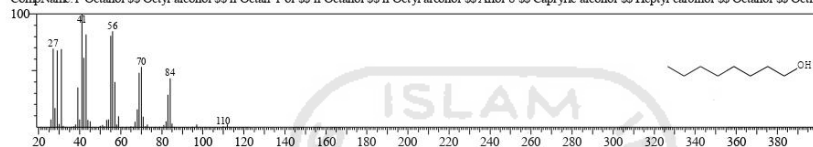
CompName: OCTYL FORMATE



Hit# 2 Entry: 5507 Library: NIST62 LIB

SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

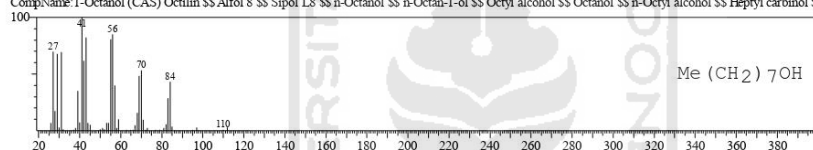
CompName: 1-Octanol



Hit# 3 Entry: 16386 Library: WILEY229 LIB

SI90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

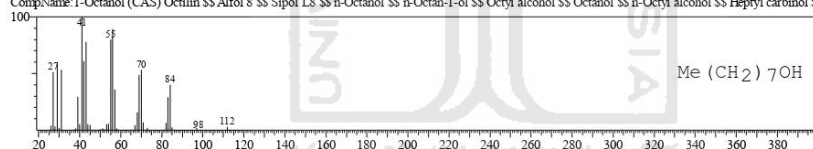
CompName: 1-Octanol



Hit# 4 Entry: 16383 Library: WILEY229 LIB

SI90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

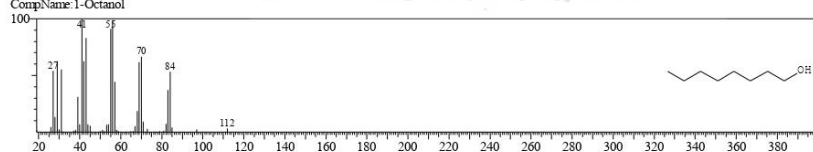
CompName: 1-Octanol



Hit# 5 Entry: 3043 Library: NIST12 LIB

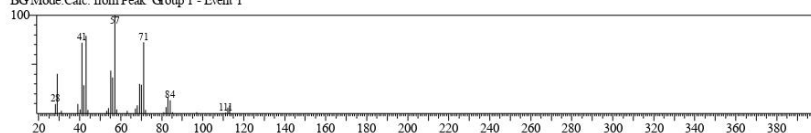
SI89 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

CompName: 1-Octanol

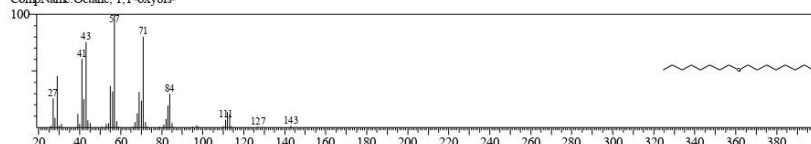


<< Target >>

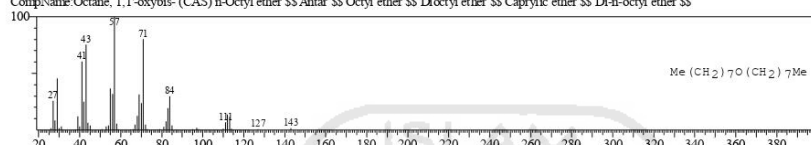
Line# 2 R Time: 35.333(Scan# 3857) MassPeaks: 32
 RawMode: Averaged 35.325-35.342(3856-3858) BasePeak: 57.10(890192)
 BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



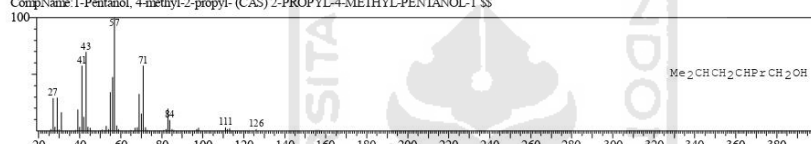
Hit# 1 Entry: 9015 Library: NIST12 LIB
 SI95 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0
 CompName: Octane, 1,1'-oxybis-



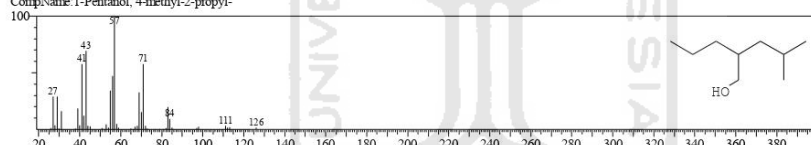
Hit# 2 Entry: 103317 Library: WILEY229 LIB
 SI95 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0
 CompName: Octane, 1,1'-oxybis- (CAS) n-Octyl ether \$S\$ Antar \$S\$ Octyl ether \$S\$ Dioctyl ether \$S\$ Caprylic ether \$S\$ Di-n-octyl ether \$S\$



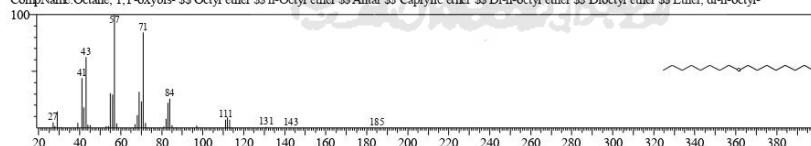
Hit# 3 Entry: 24473 Library: WILEY229 LIB
 SI92 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0
 CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl- (CAS) 2-PROPYL-4-METHYL-PENTANOL-1 \$S\$



Hit# 4 Entry: 8543 Library: NIST62 LIB
 SI92 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0
 CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl-



Hit# 5 Entry: 32426 Library: NIST62 LIB
 SI92 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0
 CompName: Octane, 1,1'-oxybis- \$S\$ Octyl ether \$S\$ n-Octyl ether \$S\$ Antar \$S\$ Caprylic ether \$S\$ Di-n-octyl ether \$S\$ Dioctyl ether \$S\$ Ether, di-n-octyl-



Lampiran 5. Hasil GCMS Variasi Waktu Refluks

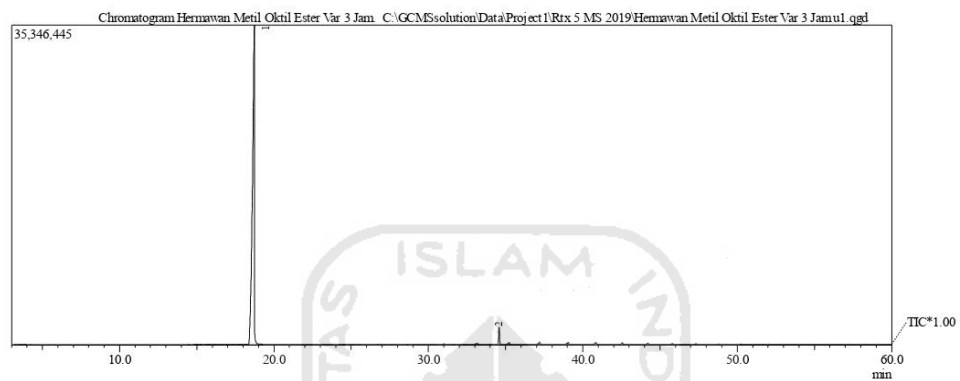
1. Refluks 3 Jam

C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Hermawan Metil Oktil Ester Var 3 Jam u1.qgd 11/13/2020

Lab Kimia Organik FMIPA - UGM

Sample Information

Analyzed by : Admin
 Sample Name : Hermawan Metil Oktil Ester Var 3 Jam
 Sample ID :
 Data File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Hermawan Metil Oktil Ester Var 3 Jam u1.qgd
 Method File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Organik baru.qgm
 Tuning File : C:\GCMSsolution\System1\Tune1\jun 30 2020.qgd



Peak#	R Time	I Time	F Time	Area	Area%	Height
1	18.721	18.367	18.850	310838889	97.71	35093053
2	34.581	34.483	34.658	7297612	2.29	1878323
				318186501	100.00	36971376

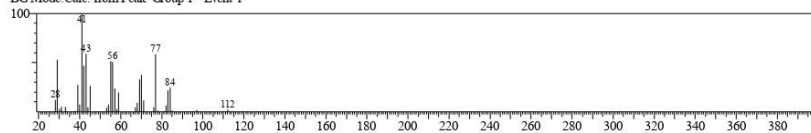
Library

<< Target >>

Line# 1 R Time: 18.725 (Scan# 1864) MassPeaks: 35

RawMode: Averaged 18.717-18.733 (1863-1865) BasePeak: 41.05 (4314123)

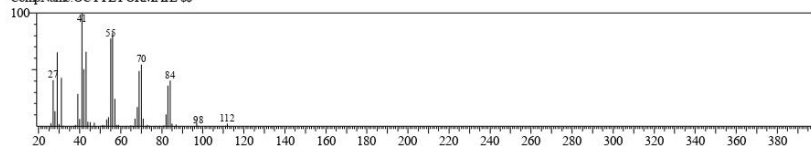
BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 34441 Library: WILEY229 LIB

SI: 89 Formula: C₉H₁₈O₂ CAS: 112-32-3 MolWeight: 158 RetIndex: 0

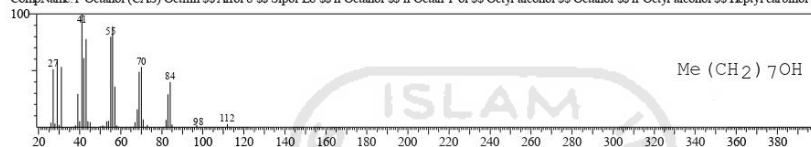
CompName: OCTYL FORMATE \$



Hit# 2 Entry: 16383 Library: WILEY229 LIB

SI: 88 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

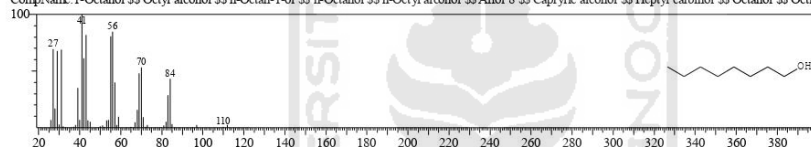
CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin \$ \$ Alfol 8 \$ \$ Sipol L8 \$ \$ n-Octanol \$ \$ n-Octan-1-ol \$ \$ Octyl alcohol \$ \$ Octanol \$ \$ n-Octyl alcohol \$ \$ Heptyl carbinol \$ \$ Caprylic alcohol \$ \$ 1-Hydroxyoctane \$ \$ Octan-1



Hit# 3 Entry: 5507 Library: NIST62 LIB

SI: 88 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

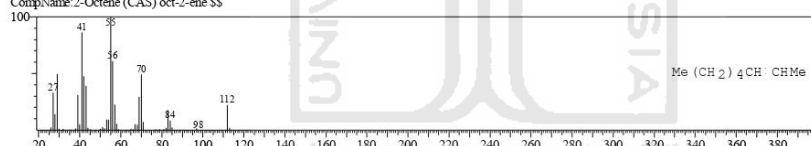
CompName: 1-Octanol (CAS) Octyl alcohol \$ \$ n-Octan-1-ol \$ \$ n-Octanol \$ \$ n-Octyl alcohol \$ \$ Alfol 8 \$ \$ Caprylic alcohol \$ \$ Heptyl carbinol \$ \$ Octanol \$ \$ Octilin \$ \$ Sipol L8 \$ \$ Alcohol c-8 \$ \$ Capryl alcohol \$ \$



Hit# 4 Entry: 8668 Library: WILEY229 LIB

SI: 88 Formula: C₈H₁₆ CAS: 111-67-1 MolWeight: 112 RetIndex: 0

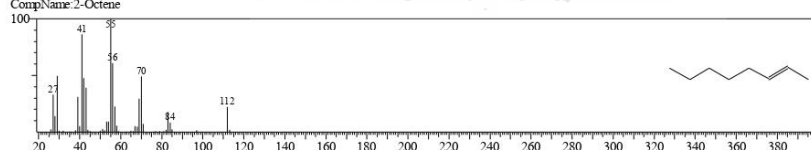
CompName: 2-Octene (CAS) oct-2-ene \$



Hit# 5 Entry: 1763 Library: NIST12 LIB

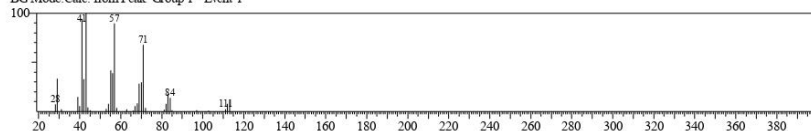
SI: 88 Formula: C₈H₁₆ CAS: 111-67-1 MolWeight: 112 RetIndex: 0

CompName: 2-Octene



<< Target >>

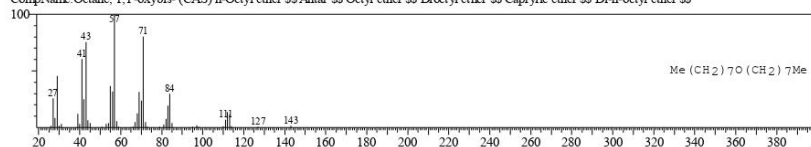
Line# 2 R Time: 34.583 (Scan# 3767) Mass Peaks: 34
 Raw Mode: Averaged 34.575-34.592 (3766-3768) Base Peak: 43.05 (255607)
 BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 103317 Library: WILEY229 LIB

SI93 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

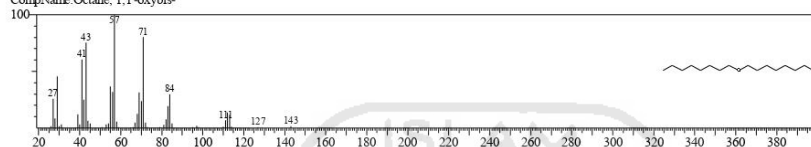
CompName: Octane, 1,1'-oxybis- (CAS) n-Octyl ether SS Antar SS Octyl ether SS Dioctyl ether SS Caprylic ether SS Di-n-octyl ether SS



Hit# 2 Entry: 9015 Library: NIST12 LIB

SI93 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

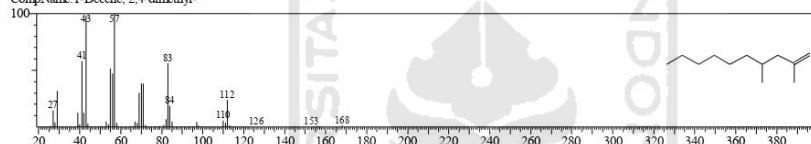
CompName: Octane, 1,1'-oxybis-



Hit# 3 Entry: 14795 Library: NIST62 LIB

SI91 Formula: C12H24 CAS: 55170-80-4 MolWeight: 168 RetIndex: 0

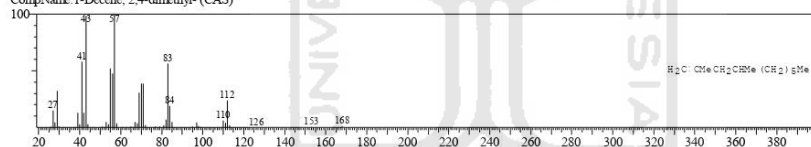
CompName: 1-Decene, 2,4-dimethyl-



Hit# 4 Entry: 42258 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C12H24 CAS: 55170-80-4 MolWeight: 168 RetIndex: 0

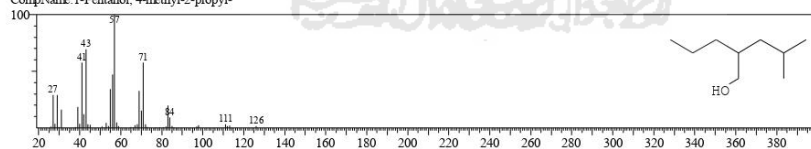
CompName: 1-Decene, 2,4-dimethyl- (CAS)



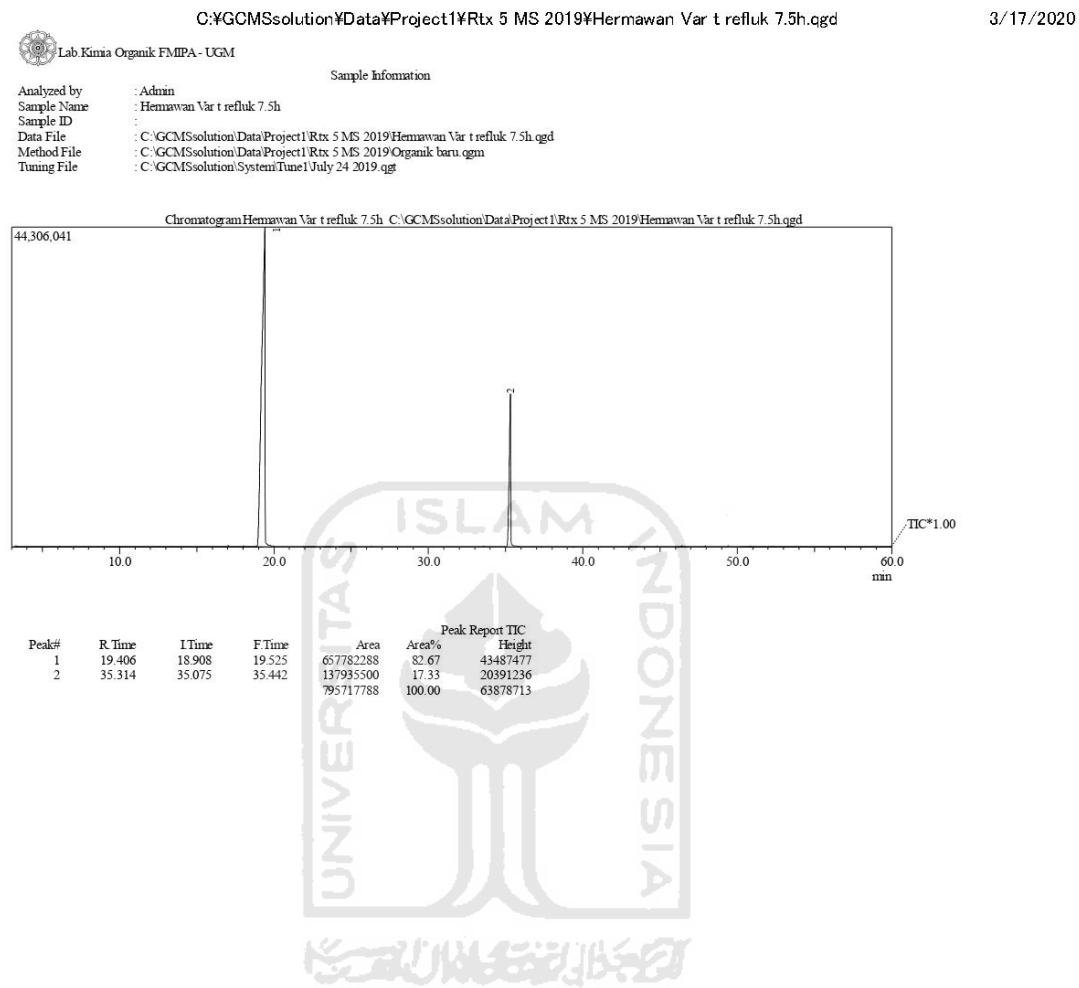
Hit# 5 Entry: 8543 Library: NIST62 LIB

SI90 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0

CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl-



2. Refluks 7,5 Jam



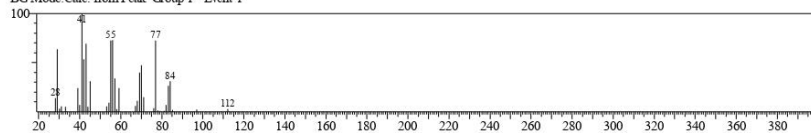
Library

<< Target >>

Line# 1 R Time: 19.408(Scan#: 1946) MassPeaks: 35

RawMode: Averaged 19.400-19.417(1945-1947) BasePeak: 41.05(4911741)

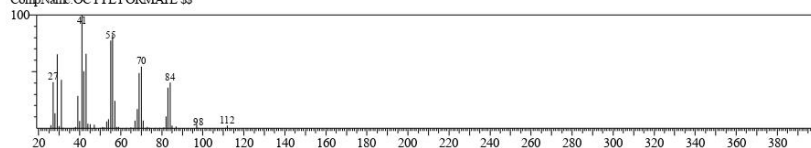
BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 34441 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₉H₁₈O₂ CAS: 112-32-3 MolWeight: 158 RetIndex: 0

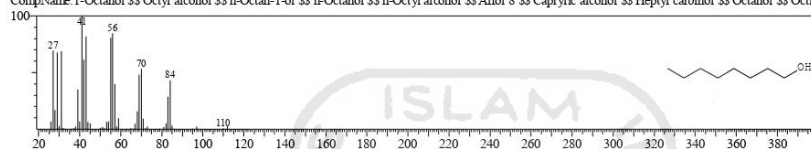
CompName: OCTYL FORMATE



Hit# 2 Entry: 5507 Library: NIST62 LIB

SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

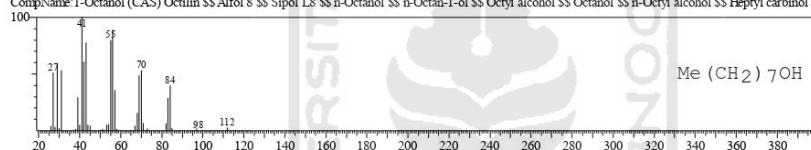
CompName: 1-Octanol



Hit# 3 Entry: 16383 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

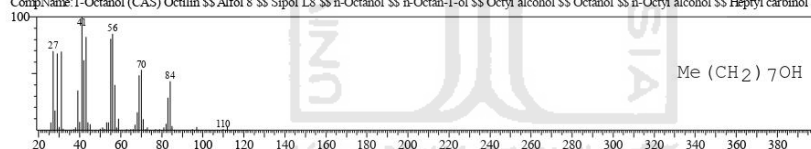
CompName: 1-Octanol



Hit# 4 Entry: 16386 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

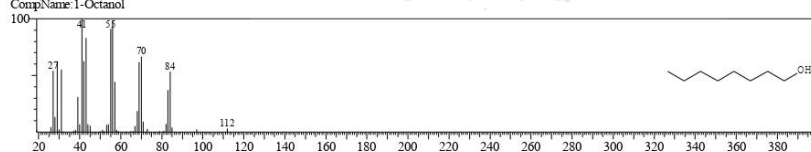
CompName: 1-Octanol



Hit# 5 Entry: 3043 Library: NIST12 LIB

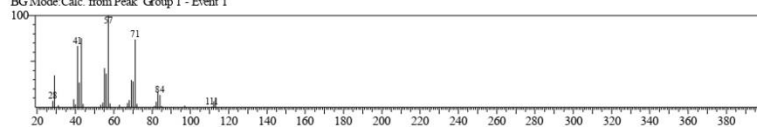
SI90 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

CompName: 1-Octanol



<< Target >>

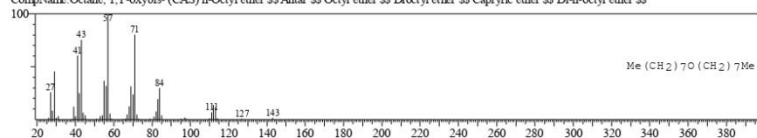
Line# 2 R-Time 35.317(Scan# 3855) MassPeaks 31
 RawMode: Averaged 35.308-35.325(3854-3856) BasePeak: 57.10(3166232)
 BGMode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 103317 Library: WILEY229.LIB

SI 95 Formula: C₁₆H₃₄O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

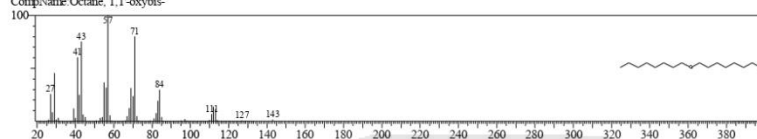
CompName: Octane, 1,1'-oxybis- (CAS) n-Octyl ether SS: Antiar SS: Octyl ether SS: Dioctyl ether SS: Caprylic ether SS: Di-n-octyl ether SS



Hit# 2 Entry: 9015 Library: NIST12.LIB

SI 95 Formula: C₁₆H₃₄O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

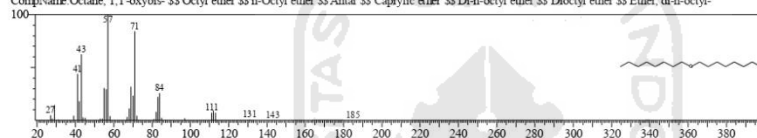
CompName: Octane, 1,1'-oxybis-



Hit# 3 Entry: 32426 Library: NIST62.LIB

SI 93 Formula: C₁₆H₃₄O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

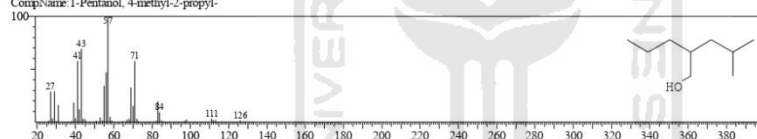
CompName: Octane, 1,1'-oxybis- SS: Octyl ether SS: n-Octyl ether SS: Antiar SS: Caprylic ether SS: Di-n-octyl ether SS: Dioctyl ether SS: Ether, di-n-octyl-



Hit# 4 Entry: 8543 Library: NIST62.LIB

SI 93 Formula: C₉H₂₀O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0

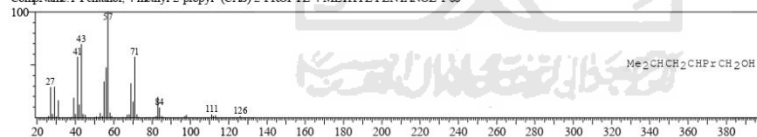
CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl-



Hit# 5 Entry: 24473 Library: WILEY229.LIB

SI 93 Formula: C₉H₂₀O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0

CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl- (CAS) 2-PROPYL-4-METHYL-PENTANOL-1



3. Refluks 10 Jam

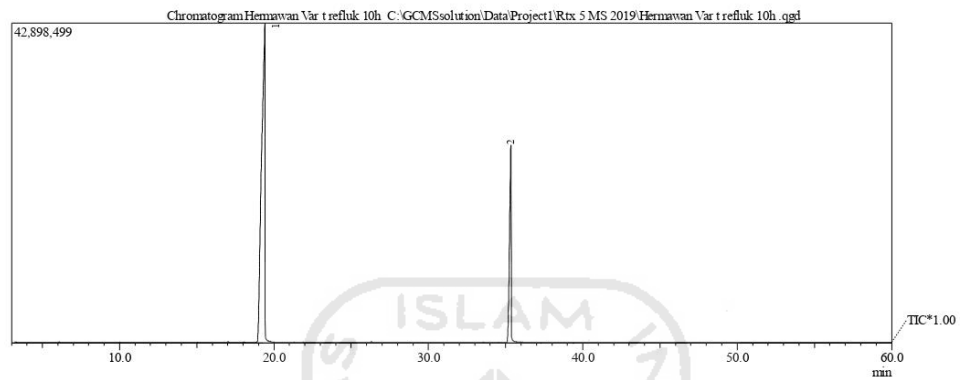
3/17/2020

C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Hermawan Var t refluks 10h .qgd

Lab Kimia Organik FMIPA - UGM

Sample Information

Analyzed by : Admin
 Sample Name : Hermawan Var t refluks 10h
 Sample ID :
 Data File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Hermawan Var t refluks 10h .qgd
 Method File : C:\GCMSsolution\Data\Project1\Rtx 5 MS 2019\Organik baru.qgm
 Tuning File : C:\GCMSsolution\SystemTune1\July 24 2019.qgt



Peak#	R Time	I Time	F Time	Area	Area%	Height
1	19.402	18.908	19.525	656363195	77.46	42166713
2	35.340	35.075	35.458	190997614	22.54	25931839
				847360809	100.00	68098572

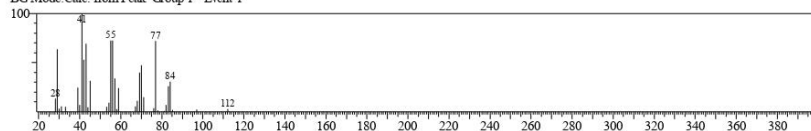
Library

<< Target >>

Line# 1 R Time: 19.400 (Scan#: 1945) MassPeaks: 34

RawMode: Averaged 19.392-19.408 (1944-1946) BasePeak: 41.05 (4730555)

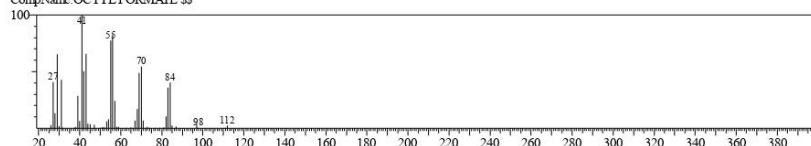
BG Mode: Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 34441 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₉H₁₈O₂ CAS: 112-32-3 MolWeight: 158 RetIndex: 0

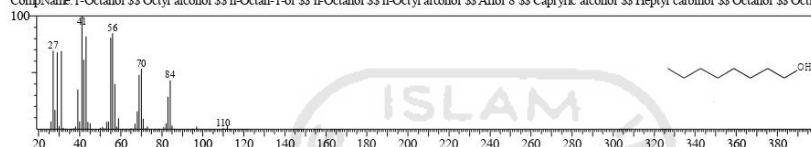
CompName: OCTYL FORMATE



Hit# 2 Entry: 5507 Library: NIST62 LIB

SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

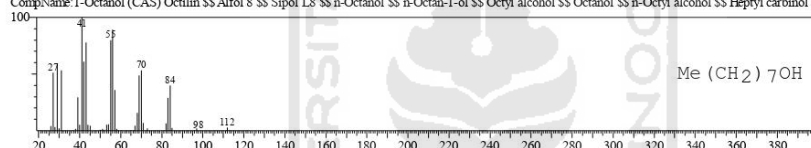
CompName: 1-Octanol



Hit# 3 Entry: 16383 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

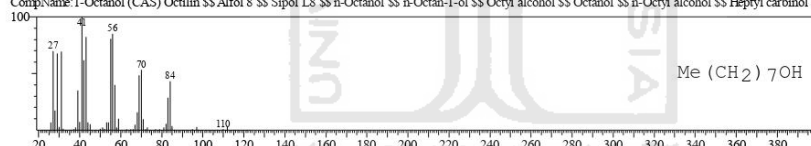
CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin



Hit# 4 Entry: 16386 Library: WILEY229 LIB

SI91 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

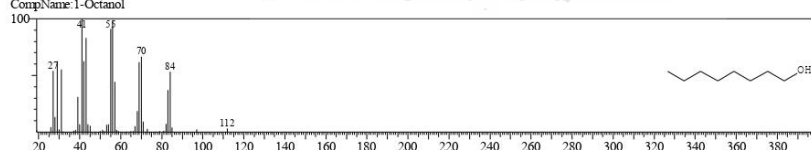
CompName: 1-Octanol (CAS) Octilin



Hit# 5 Entry: 3043 Library: NIST12 LIB

SI89 Formula: C₈H₁₈O CAS: 111-87-5 MolWeight: 130 RetIndex: 0

CompName: 1-Octanol

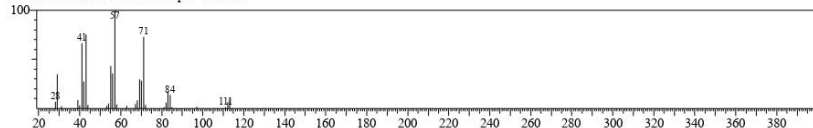


<< Target >>

Line# 2 R Time: 35.342 (Scan# 3858) MassPeaks: 31

RawMode: Averaged 35.333-35.350 (3857-3859) BasePeak: 57.05 (4017030)

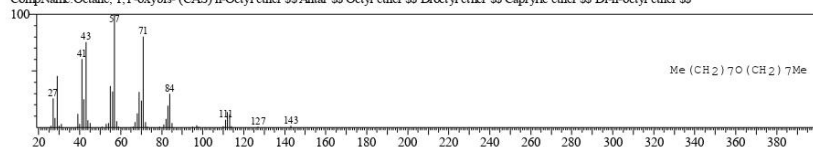
BG Mode Calc. from Peak Group 1 - Event 1



Hit# 1 Entry: 103317 Library: WILEY229 LIB

SI: 95 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

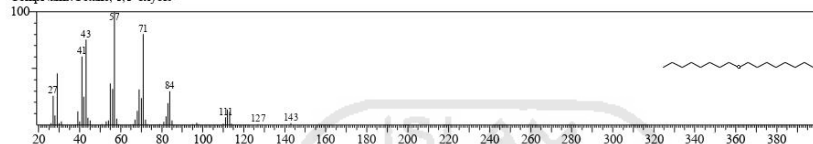
CompName: Octane, 1,1'-oxybis- (CAS) n-Octyl ether \$S\$ Antar \$S\$ Octyl ether \$S\$ Dioctyl ether \$S\$ Caprylic ether \$S\$ Di-n-octyl ether \$S\$



Hit# 2 Entry: 9015 Library: NIST12 LIB

SI: 95 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

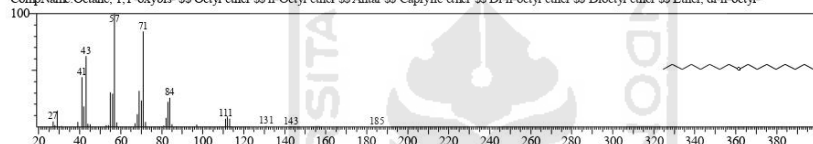
CompName: Octane, 1,1'-oxybis-



Hit# 3 Entry: 32426 Library: NIST62 LIB

SI: 95 Formula: C16H34O CAS: 629-82-3 MolWeight: 242 RetIndex: 0

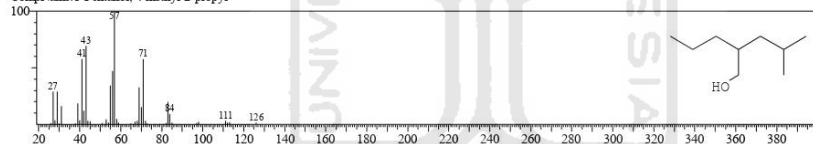
CompName: Octane, 1,1'-oxybis- \$S\$ Octyl ether \$S\$ n-Octyl ether \$S\$ Antar \$S\$ Caprylic ether \$S\$ Di-n-octyl ether \$S\$ Dioctyl ether \$S\$ Ether, di-n-octyl-



Hit# 4 Entry: 8543 Library: NIST62 LIB

SI: 95 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0

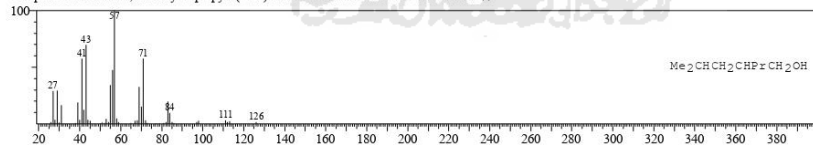
CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl-



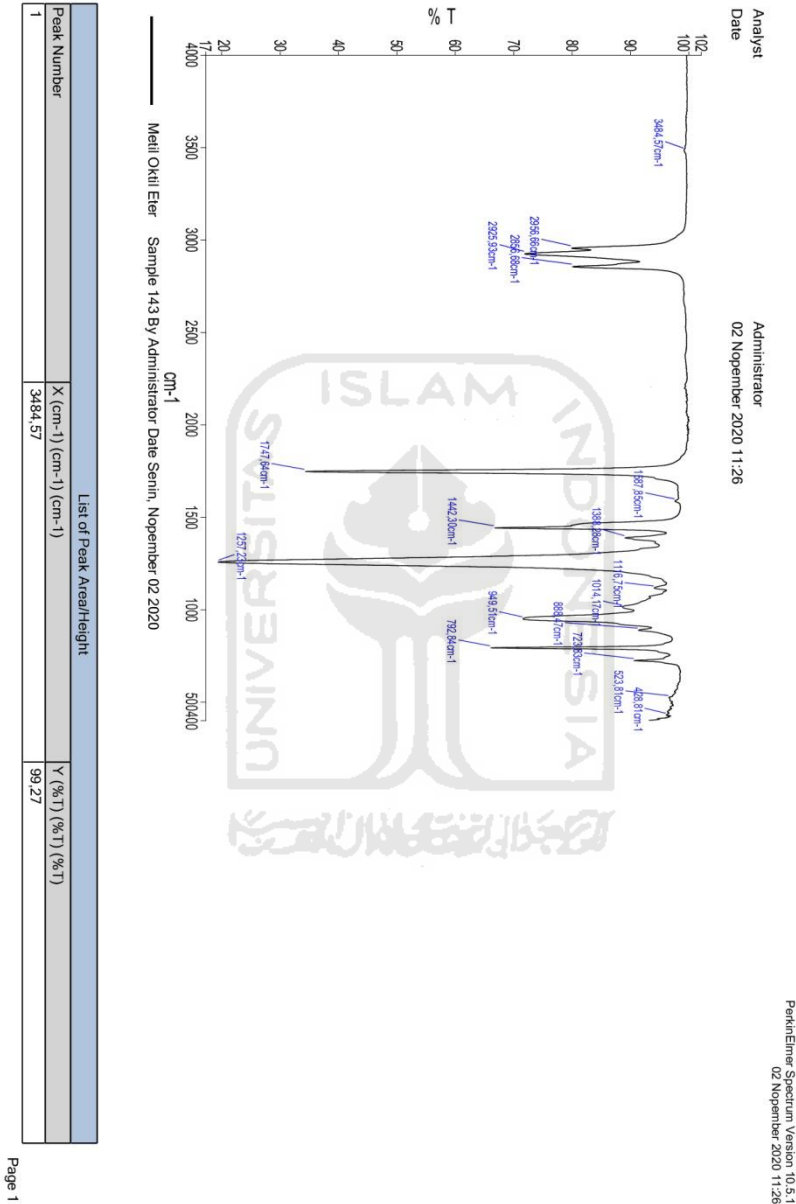
Hit# 5 Entry: 24473 Library: WILEY229 LIB

SI: 95 Formula: C9H20O CAS: 54004-41-0 MolWeight: 144 RetIndex: 0

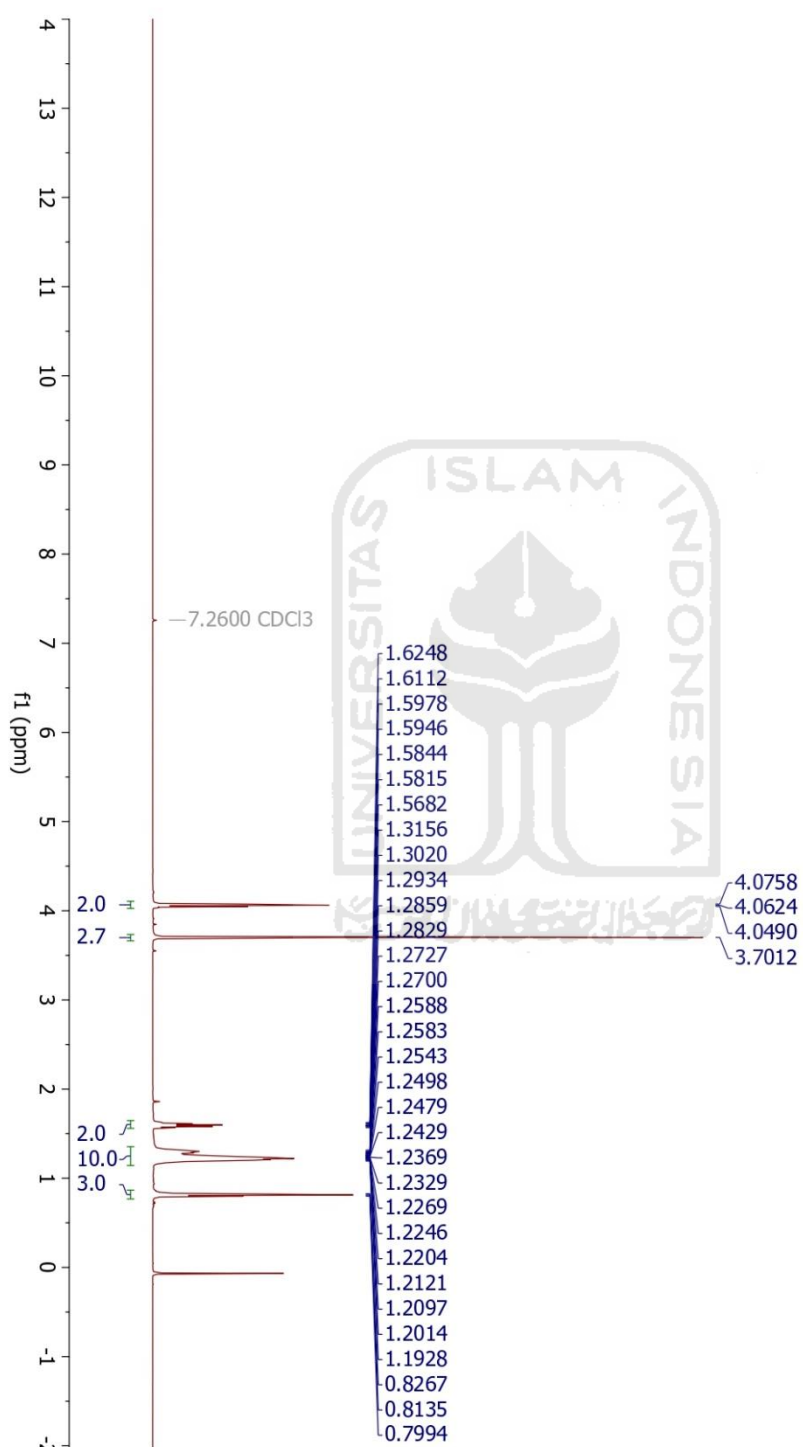
CompName: 1-Pentanol, 4-methyl-2-propyl- (CAS) 2-PROPYL-4-METHYL-PENTANOL-1 \$S\$



Lampiran 6. Hasil FTIR (Variasi DMC 120 mmol)



Lampiran 7. Hasil ^1H -NMR (Variasi DMC 160 mmol)



Hermawan-melilokteter_1H

