



**STUDI RATIO MOL GUM ROSIN/ASAM FUMARAT DAN
KONSENTRASI KATALIS *P-TOLUENE SULFONIC ACID* (PTSA)
PADA ESTERIFIKASI *FUMARIC MODIFIED ROSIN ESTER***

**Skripsi
disusun sebagai salah satu syarat
untuk memperoleh gelar Sarjana Sains
Program Studi Kimia**

Oleh
Ferry Faila Shufa
4311415058

**JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS NEGERI SEMARANG
2020**

PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Dengan ini, saya

Nama : Ferry Faila Shufa

NIM : 4311415058

Program Studi : Kimia

menyatakan bahwa skripsi saya yang berjudul “Studi Ratio Mol Gum Rosin/Asam Fumarat dan Konsentrasi Katalis *p-Toluene Sulfonic Acid* (PTSA) pada Esterifikasi *Fumaric Modified Rosin Ester*” benar-benar karya saya sendiri bukan jiplakan dari karya orang lain atau pengutipan dengan cara-cara yang tidak sesuai dengan etika keilmuan yang berlaku baik sebagian atau seluruhnya. Pendapat atau temuan orang atau pihak lain yang terdapat dalam skripsi ini telah dikutip atau dirujuk berdasarkan kode etik ilmiah. Atas pernyataan ini, saya secara pribadi siap menanggung resiko/sanksi hukum yang dijatuhkan apabila ditemukan adanya pelanggaran terhadap etika keilmuan dalam karya ini.

Semarang, 11 Februari 2020



Ferry Faila Shufa

4311415058

PENGESAHAN

Skripsi berjudul Studi Ratio Mol Gum Rosin/Asam Fumarat dan Konsentrasi Katalis *p-Toluenesulfonic Acid* (PTSA) pada Esterifikasi *Fumaric Modified Rosin Ester* karya Ferry Faila Shufa 4311415058 ini telah dipertahankan dalam Ujian Skripsi FMIPA Universitas Negeri Semarang pada tanggal sidang dan disahkan oleh Panitia Ujian.

Semarang, 11 Februari 2020

Panitia



Ketua,
Dr. Sugianto, M.Si.

NIP. 196102191993031001

Sekretaris,

A handwritten signature in black ink, appearing to be 'Sigit Priatmoko', written over a circular stamp.

Dr. Sigit Priatmoko, M.Si.

NIP. 196504291991031001

Penguji I,

A handwritten signature in black ink, appearing to be 'Dante Alighiri', written over a circular stamp.

Dante Alighiri, S.Si, M.Sc.

NIP. 198506102015041003

Penguji II,

A handwritten signature in black ink, appearing to be 'F. Widhi Mahatmanti', written over a circular stamp.

Dr. F. Widhi Mahatmanti, S.Si., M.Si.

NIP. 196912171997022001

Penguji III/ Pembimbing

A handwritten signature in black ink, appearing to be 'Nanik Wijayati', written over a circular stamp.

Dr. Nanik Wijayati, M.Si.

NIP. 196910231996032002

MOTTO DAN PERSEMBAHAN

Motto

“Semuanya adalah kehendak Allah, tiada daya dan upaya melainkan dengan pertolongan-Nya (QS Al-Kahfi : 39)”

Persembahan

1. Kedua orangtua, kakak beserta keluarga.
2. Sahabat-sahabat tersayang (Elsa, Evalisa, Uswatun, Amallia, Bunnari, Hanif, Ghozali, Amrul).
3. Teman seperjuangan Naila, Amrul, Mei, Jannah.
4. Teman-teman Kimia angkatan 2015
5. Teman-teman KKN Octa, Halim dan Wachid.

PRAKATA

Puji syukur kehadiran Allah SWT, Yang Maha Esa atas nikmat dan karunia-Nya yang senantiasa tercurah sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Studi Ratio Mol Gum Rosin/Asam Fumarat dan Konsentrasi Katalis *p-Toluene Sulfonic Acid* (PTSA) pada Esterifikasi *Fumaric Modified Rosin Ester*” sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Program Studi Kimia.

Pada kesempatan ini, penulis mengucapkan terima kasih kepada :

1. Dekan FMIPA Universitas Negeri Semarang, yang telah memberikan kelancaran administrasi dalam menyelesaikan skripsi.
2. Ketua Jurusan Kimia, yang telah memberikan kemudahan pelayanan administrasi dalam penyusunan skripsi.
3. Ibu Dr. Nanik Wijayati, M.Si selaku dosen pembimbing yang dengan sabar memberikan bimbingan dan arahan kepada penulis dalam menyusun skripsi.
4. Bapak Dante Alighiri, S.Si, M.Sc dan Ibu Dr. F. Widhi Mahatmanti, S.Si.,M.Si selaku dosen penguji yang telah memberikan arahan dan masukannya.
5. Segenap Bapak dan Ibu Dosen di Jurusan Kimia yang telah memberikan dukungan dan ilmunya.
6. Segenap staf dan pegawai Perhutani Pine Chemical Industry Pemalang yang telah membantu dan memberi arahan.

Semoga skripsi ini dapat memberikan manfaat kepada peneliti khususnya dan pembaca pada umumnya, serta dapat memberikan sumbangan pemikiran pada perkembangan pendidikan selanjutnya.

Semarang, 12 Januari 2020

Penulis

ABSTRAK

Shufa, Ferry Faila. 2020. Studi Ratio Mol Gum Rosin/Asam Fumarat dan Konsentrasi Katalis *P-Toluene Sulfonic Acid* (PTSA) pada Esterifikasi *Fumaric Modified Rosin Ester*. Skripsi. Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Semarang. Pembimbing utama Dr. Nanik Wijayati, M.Si.

Kata kunci : Gum rosin, katalis, *fumaric modified rosin*, asam fumarat.

Gum rosin non modifikasi mempunyai beberapa kelemahan yaitu sifatnya yang cenderung mengkristal, mudah teroksidasi, dan mudah bereaksi dengan garam-garam logam berat. Gum rosin dapat dimodifikasi dengan cara memodifikasi ikatan rangkap dan gugus karboksil yang ada pada senyawa asam dalam rosin tersebut untuk memperbaiki sifat – sifatnya ke arah yang lebih baik. Dalam penelitian ini gum rosin direaksikan dengan asam fumarat dan gliserol, menggunakan variasi perbandingan ratio mol dan penambahan katalis PTSA. Tujuan penelitian ini untuk menganalisis pengaruh perbandingan ratio mol dan penambahan katalis pada esterifikasi gum rosin fumarat dan gliserol dan juga menganalisis sifat fisiko kimia pada produk *fumaric modified rosin ester* (FMRE). Analisis karakterisasi menggunakan GC-MS dan FTIR. Hasil total ester paling optimal diperoleh dari perbandingan ratio mol 1:1 dengan penambahan katalis 0,2% yaitu sebesar 35,96%. Modifikasi gum rosin pada penelitian ini telah meningkatkan kualitas sifat fisiko kimia dari gum rosin non modifikasi dapat dilihat dari meningkatnya titik lunak dan menurunnya bilangan asam.

ABSTRACT

Shufa, Ferry Faila. 2020. The Study Mole Ratio of Gum Rosin/Fumaric Acid and Concentration of Catalyst *p*-Toluenesulfonic Acid (PTSA) in Esterification of FMRE. Department of Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Semarang State University. The Supervisor Dr.Nanik Wijayati, M.Si.

Keyword : Gum rosin, catalyst, fumaric modified rosin, fumaric acid

Unmodified gum rosin has several disadvantages that it tends to crystallize, easily oxidized and easily to react with heavy metal. Gum rosin can be modified by modifying the double bonds and carboxyl group in the acid compound of rosin can be improved for better purpose. In this study gum rosin was reacted with fumaric acid and glycerol, using a variation of the mole ratio and the addition of PTSA catalyst. This study aims to analyze the effect of the mole ratio and the addition of catalyst to esterification of fumaric-gum rosin and glycerol and also to analyze the physicochemical properties of fumaric modified rosin ester (FMRE). Analysis of characterization by GC-MS and FTIR. The result shown that the most optimum of total ester is obtained from a the mole ratio 1:1 with the addition of 0,2% catalyst that is equal to 35,96%. Modification of gum rosin in this study has successfully improved the physicochemical quality from unmodified gum rosin can be seen from the increase in the softening point and decrease in acid value.

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI	Error! Bookmark not defined.
PENGESAHAN	ii
MOTTO DAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
ABSTRAK	vi
<i>ABSTRACT</i>	vii
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xii
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 DAN KERANGKA TEORITIS	4
2.1 Tinjauan Pustaka	4
2.2 Kerangka Teoritis	5
2.2.1 Pinus (<i>Pinus merkusii</i> Jungh. et de Vriese)	5
2.2.2 Gum rosin	8
2.2.3 Asam Fumarat	12
2.2.4 Gliserol	13
2.2.5 Katalis	15
2.2.6 Asam <i>p</i> -toluenasulfonat	16
2.2.7 Proses Esterifikasi	17
2.2.8 Produk Modifikasi Gum Rosin	18

BAB III METODOLOGI PENELITIAN.....	20
3.1 Tempat dan Waktu.....	20
3.2 Variabel Penelitian.....	20
3.3 Alat dan Bahan.....	20
3.4 Prosedur Kerja	21
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	25
4.1 Karakterisasi Bahan Baku.....	25
4.2 Sifat fisiko kimia FMRE.....	26
4.3 Analisis senyawa gum rosin menggunakan <i>Gas Chromatograph-Mass Spectrometer</i> (GC-MS).....	32
4.4 Analisis Senyawa pada FMRE dengan <i>Gas Chromatograph-Mass Spectrometer</i> (GC-MS).....	33
4.5 Analisis Senyawa pada FMRE dengan <i>Fourier TransformInfrared(FTIR)Spectrophotometer</i>	44
BAB V PENUTUP	46
5.1 Simpulan	46
5.2 Saran	46
DAFTAR PUSTAKA.....	47
LAMPIRAN	52

DAFTAR GAMBAR

Gambar		Halaman
Gambar 2.1	Struktur kimia asam- asam resin	9
Gambar 2.2	Struktur asam fumarat	13
Gambar 2.3	Struktur gliserol	14
Gambar 2.4	Pengaruh katalis terhadap laju reaksi	16
Gambar 2.5	Struktur asam <i>p</i> -toluenasulfonat.....	17
Gambar 2.6	Reaksi esterifikasi asam karboksilat dan alkohol	18
Gambar 4.1	Grafik titik lunak FMRE	27
Gambar 4.2	Reaksi bilangan asam	28
Gambar 4.3	Grafik bilangan asam FMRE.....	29
Gambar 4.4	Grafik warna FMRE	30
Gambar 4.5	Reaksi bilangan iod	31
Gambar 4.6	Grafik bilangan iod FMRE.....	31
Gambar 4.7	Grafik total ester FMRE	41
Gambar 4.8	Reaksi esterifikasi gum rosin dengan gliserol	42
Gambar 4.9	Spektrum abietat metil ester	42
Gambar 4.10	Pola fragmentasi abietat metil ester.....	42
Gambar 4.11	Reaksi esterifikasi FMRE.....	43
Gambar 4.12	Spektra FT-IR gum rosin dan FMRE	45

DAFTAR TABEL

Tabel		Halaman
Tabel 2.1	Komposisi asam resin pada berbagai jenis kayu pinus.....	10
Tabel 2.2	Komposisi asam resin pada gum rosin dari berbagai negara penghasil gum rosin	11
Tabel 2.3	Komposisi asam resin dari beberapa lokasi di Indonesia	11
Tabel 2.4	Klasifikasi khusus kualitas gum rosin	12
Tabel 2.5	Klasifikasi umum kualitas gum rosin	12
Tabel 2.6	Karakteristik gliserol.....	14
Tabel 3.1	Esterifikasi gum rosin fumarat dan gliserol dengan variasi ratio mol asam karboksilat dan variasi penambahan katalis..	21
Tabel 4.1	Sifat fisika dan kimia gumrosin	25
Tabel 4.2	Sifat fisika dan kimia FMRE	26
Tabel 4.3	Komponen penyusun gum rosin	33
Tabel 4.4	Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 1:1 0,1%	34
Tabel 4.5	Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 1:1 0,2%	35
Tabel 4.6	Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 1:1 0,3%	36
Tabel 4.7	Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 2:1 0,1%	37
Tabel 4.8	Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 2:1 0,2%	38
Tabel 4.9	Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 2:1 0,3%	38
Tabel 4.10	Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 3:1 0,1%	39
Tabel 4.11	Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 3:1 0,2%	40
Tabel 4.12	Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 3:1 0,3%	40
Tabel 4.13	<i>Yield</i> FMRE	43

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran	Halaman
Lampiran 1. Diagram kerja penelitian	52
Lampiran 2. Perhitungan penggunaan bahan	56
Lampiran 3. Perhitungan uji fisiko kimia	57
Lampiran 4. Presentase <i>yield</i> FMRE.....	62
Lampiran 5. Analisis FTIR	63
Lampiran 6. Analisis GC-MS	65
Lampiran 7. Dokumentasi.....	135

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Indonesia merupakan negara yang kaya akan sumber daya alam, salah satunya adalah sektor kehutanan. Sektor kehutanan memiliki hasil hutan berupa kayu, dan juga memiliki hasil hutan bukan kayu (HHBK) yang sangat beragam. Saat ini pemerintah Indonesia mengurangi produk hasil hutan kayu, dengan demikian pemerintah sedang memaksimalkan produk hasil hutan bukan kayu (Daryono, 2015). Pemanfaatan hasil hutan bukan kayu (HHBK) bertujuan selain untuk meningkatkan kesejahteraan masyarakat juga untuk mengoptimalkan sumber daya hutan itu sendiri. Industri hasil hutan bukan kayu (HHBK) tidak memerlukan teknologi yang canggih, namun mampu menghasilkan produk yang memiliki nilai ekonomi tinggi dan juga ramah lingkungan (Waluyo *et al.*, 2012).

Gum rosin yang diperoleh dari hasil sadapan pohon pinus, ekstraksi kayu pinus dan hasil sampingan dari pabrik *pulp* menggunakan bahan baku kayu pinus disebut sebagai gum rosin non modifikasi. Gum rosin non modifikasi mempunyai beberapa kelemahan yaitu sifatnya yang cenderung mengkristal, pada udara terbuka mudah teroksidasi oleh oksigen karena sifat ketidakjenuhannya dan juga mudah bereaksi dengan garam-garam logam berat dalam vernis (Kirk dan Othmer, 2007). Pada penelitian Wiyono tahun 2002 telah dilakukan penelitian pembuatan gum rosin modifikasi, yaitu gum rosin maleat dengan berbagai presentase asam maleat. Bahan baku yang digunakan dalam penelitian tersebut adalah gum rosin. Di tinjau dari titik lunak dan warnanya, didapatkan hasil yang menunjukkan bahwa gum rosin modifikasi ini mempunyai titik lunak lebih tinggi daripada gum rosin non modifikasi. Dalam penelitian tersebut, pembuatan gum rosin maleat dilakukan setelah melalui proses penyulingan getah pinus, yaitu mengolah menjadi gum rosin. Selanjutnya, gum rosin yang dihasilkan diolah lebih lanjut menjadi gum rosin maleat (Wiyono, 2007).

Seperti halnya gum rosin, getah pinus mengandung sejumlah besar asam-asam resin seperti asam abietat, asam livopimarat, polustrat, neoabietat,

dehidroabietat, tetrahidro abietat, dan asam pimarat. Dalam proses pembuatan gum rosin fumarat atau gum rosin maleat, ikatan rangkap pada asam levopimarat dalam getah bereaksi dengan asam fumarat atau anhidrida asam maleat. Reaksi ini berlangsung sampai semua asam sudah dikonversi ke dalam asam levopimarat dan asam ini bereaksi dengan asam fumarat atau anhidrida asam maleat (Wiyono *et al.*, 2007).

Pada penelitian Wiyono *et al.* (2007) telah dilakukan pembuatan gum rosin modifikasi yang direaksikan dengan asam fumarat dilakukan dengan berbagai variasi yaitu waktu reaksi, suhu reaksi, dan ratio mol. Ditinjau dari hasil identifikasi dengan GC-MS menunjukkan adanya tiga puncak dari *gum rosin modified*. Penelitian yang telah dilakukan oleh Purnavita *et al.* (2017), pembuatan gum rosin modifikasi yang direaksikan menggunakan asam laktat dilakukan dengan variasi penambahan katalis yang bertujuan untuk mengetahui pengaruh penambahan katalis pada produk yang dihasilkan. Dari kelemahan – kelemahan pada gum rosin non modifikasi, perlu dilakukan penelitian lebih lanjut untuk mendapatkan produk gum rosin yang lebih baik lagi. Gum rosin dapat dimodifikasi dengan cara memodifikasi ikatan rangkap dan gugus karboksil yang ada pada senyawa asam dalam rosin tersebut untuk memperbaiki sifat – sifatnya ke arah yang lebih baik. Gum rosin dapat direaksikan dengan asam fumarat dan gliserol membentuk FMRE.

Namun demikian, reaksi esterifikasi pada gum rosin diperlukan temperatur tinggi diatas 200 °C untuk mencapai reaksi yang diinginkan dalam membentuk FMRE. Oleh karena itu, perlu dilakukan kajian lebih lanjut untuk optimasi ratio mol gum rosin dan asam fumarat dan penambahan katalis untuk membantu dan mempercepat reaksi agar berjalandibawah temperatur 200 °C. Dalam penelitian ini bertujuan untuk meningkatkan kualitas gum rosin dengan memodifikasi gugus karboksil pada gum rosin menjadi ester. Namun, dalam asam-asam resin masih terdapat gugus fungsi aktif lain yaitu gugus alkena. Sehingga, sebelum dilakukan reaksi esterifikasi dibuat *adduct* dengan asam fumarat untuk melindungi gugus alkena tersebut agar reaksi lebih spesifik pada gugus karboksil dalam gum rosin.

Dalam penelitian ini senyawa alkohol yang digunakan dalam proses esterifikasi adalah gliserol. Gliserol diharapkan, selain berfungsi sebagai sumber gugus ester, juga berfungsi sebagai pelarut karena mempunyai titik didih lebih tinggi dibandingkan senyawa alkohol pada umumnya yaitu titik didihnya 290 °C. Kemudian, katalis yang digunakan adalah asam *p*-toluenasulfonat karena merupakan senyawa organik kuat, satu juta lebih kuat dari asam benzoat dan bersifat non-oksidator.

1.2 Rumusan Masalah

Rumusan masalah penelitian ini adalah :

1. Berapa perbandingan optimal ratio mol antara gum rosin dan asam fumarat untuk menghasilkan produk FMRE?
2. Berapa katalis PTSA optimal untuk menghasilkan FMRE?
3. Bagaimana kualitas fisiko kimia FMRE yang dihasilkan?

1.3 Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk :

1. Untuk menganalisis perbandingan optimal ratio mol antara gum rosin dan asam fumarat untuk menghasilkan produk FMRE.
2. Untuk menganalisis katalis PTSA optimal untuk menghasilkan FMRE.
3. Untuk menganalisis kualitas FMRE yang dihasilkan dilihat dari sifat fisiko kimia

1.4 Manfaat Penelitian

Manfaat yang ingin dicapai dalam penelitian ini adalah :

1. Memberikan informasi perbandingan ratio mol terbaik antara gum rosin dan asam fumarat untuk menghasilkan produk FMRE.
2. Meningkatkan kualitas produk gum rosin dan memperluas penggunaan dari modifikasi gum rosin.

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA DAN KERANGKA TEORITIS

2.1 Tinjauan Pustaka

Penelitian yang dilakukan Purnavita tahun 2017, melakukan modifikasi gum rosin dengan asam laktat dan gliserol untuk mengetahui penurunan bilangan asam *yield* poliester dengan variasi ratio mol gum rosin : asam laktat, dan untuk mengetahui pengaruh katalis dalam reaksi. Rasio gum rosin dan asam laktat yang berbeda memberikan pengaruh terhadap *yield* poliester yang dihasilkan. Rasio (%:%) gum rosin dan asam laktat adalah 50:50 mampu menghasilkan *yield* poliester yang cukup tinggi (72,28%) dibandingkan dengan rasio 75:25 dan 25:75. Penambahan asam laktat yang semakin banyak juga dapat menurunkan bilangan asam. Rasio (%:%) gum rosin dan asam laktat adalah 50:50 mampu menurunkan bilangan asam 105,3KOH/g dari gum rosin awal yaitu 158,0KOH/g. Katalis yang digunakan adalah katalis SnCl₂. Katalis SnCl₂ merupakan jenis katalis yang sering digunakan untuk mempercepat reaksi polimerisasi poliester.

Reaksi polimerisasi pembentukan poliester dari campuran gum rosin-asam laktat dengan gliserol dipengaruhi oleh jumlah katalis yang ditambahkan. Reaksi polimerisasi yang tidak menggunakan katalis menghasilkan produk poliester dengan bilangan asam tertinggi yaitu 92,22 KOH/g dibandingkan dengan reaksi yang menggunakan penambahan katalis 0,025% dan 0,050%. Semakin banyak jumlah katalis yang ditambahkan (0,050%) menghasilkan bilangan asam terendah. Hal ini menunjukkan bahwa reaksi berjalan paling sempurna karena sisa asam yang tidak bereaksi lebih sedikit. Reaksi yang paling sempurna diperoleh pada penambahan katalis sebanyak 0,050% dengan memberikan hasil vernis poliester dengan bilangan asam terendah (62,12%), *yield* terbesar (72,28%), dan *drying time* terendah (32 jam). Penambahan katalis juga berfungsi untuk menurunkan suhu reaksi. Suhu reaksi untuk membentuk poliester dengan menggunakan katalis dapat diturunkan dari 280°C menjadi 220°C. Reaksi polimerisasi yang dilakukan pada suhu tinggi dapat memicu

warna gelap pada produk poliester akibat reaksi oksidasi antara oksigen yang terkandung di dalam udara dengan ikatan rangkap pada asam karboksilat.

Sutanti *et al.* (2017) melakukan esterifikasi gum rosin dengan gliserol tanpa katalis dengan variasi minyak linseed oil dan minyak biji karet pada pembuatan vernis. Proses pembuatan vernis dilakukan dengan menggunakan metode esterifikasi tanpa katalis pada suhu 230 °C – 250 °C selama 4 jam. Vernis yang dihasilkan dianalisa kadar gliserol bebas, dan bilangan asam, sedangkan hasil aplikasinya dianalisa drying time, gloss level, daya rekat, hardness, serta pengamatan warna secara organoleptis. Hasil penelitian menunjukkan bahwa rasio 50% : 50% dan 60% : 40% menghasilkan vernis dengan karakter yang hampir sama dan lebih baik dibandingkan dengan rasio yang lain.

Khadafi *et al.* (2014) melakukan pengolahan gum rosin menjadi bahan pendarihan sebagai aditif pada pembuatan kertas. Penelitian ini bertujuan untuk membuat dari rosin emulsi dari gum rosin serbuk sebagai aditif pada pembuatan kertas. Gum rosin kualitas WW dan X dilakukan reaksi saponifikasi menggunakan soda pada suhu dibawah 100 °C. Modifikasi rosin dilakukan dengan reaksi fortifikasi menjadi rosin terfortifikasi dengan penambahan senyawa anhidrat maleat.

Prasetyo *et al.* (2012) mensintesis produk turunan gliserol atau konversi gliserol melalui proses esterifikasi adalah *glycerol ester maleic rosin*. Pembuatan *glycerol ester maleic rosin* dilakukan dengan mereaksikan asam maleat (dari gum rosin) dengan gliserol melalui proses esterifikasi dan fortifikasi. Ester gliserol gum rosin maleat memiliki titik lunak yang tinggi dan bilangan asam yang rendah. Pembuatan produk turunan gliserol ini dimaksudkan agar produk mempunyai nilai ekonomi yang lebih tinggi. Secara umum penggunaan produk adalah pada cat termoplastik untuk jalan, perekat tahan panas, dan formulasi tinta cetak.

2.2 Kerangka Teoritis

2.2.1 Pinus (*Pinus merkusii* Jungh. et de Vriese)

Negara Indonesia merupakan negara yang akan sumber daya alam termasuk dalam sektor kehutanan. Salah satu spesies tanaman yang tersebar di

seluruh hutan Indonesia adalah pohon pinus. Selain batang pohon pinus, produk yang dapat dihasilkan dan dikembangkan dari pohon pinus adalah getahnya. Getah pinus dapat diolah dengan cara didestilasi agar mendapatkan produk berupa gum rosin sebagai residu dan minyak terpentin sebagai hasil destilatnya (Kasmudjo, 2010). Produk gum rosin dapat digunakan dalam berbagai bidang industri antara lain industri kertas, sabun, detergen, kosmetik, cat, vernis, semir, perekat, karet, insektisida, sedangkan terpentin digunakan dalam industri parfum, farmasi, kimia, *desinfektant* dan *denaturant* (Satil *et al.*, 2011; Sharma dan Lecha, 2013). Berikut merupakan klasifikasi dari tanaman pinus :

Kingdom	: Plantae
Divisi	: Spermatophyta
Sub Divisi	: Gymnospermae
Kelas	: Dicotyledonae
Ordo	: Coniferales
Famili	: Pinaceae
Genus	: Pinus
Spesies	: <i>Pinus merkusii</i> Jungh. at de Vriese

Pinus pertama kali ditemukan dengan nama tusam di daerah Sipirok, Tapanuli Selatan oleh seorang ahli botani dari Jerman FR Junghunh pada tahun 1841. Spesies ini tergolong spesies yang cepat tumbuh dan tidak membutuhkan persyaratan tempat tumbuh secara khusus, merupakan salah satu spesies pinus yang menyebar alami ke Selatan khatulistiwa sampai melewati 2 °LS. Tanda-tanda khusus dari pohon pinus adalah tidak berbanir, kulit luar kasar berwarna coklat kelabu sampai tua, tidak mengelupas dan berbalur lebar serta dalam (Siregar, 2005). *Pinus merkusii* menyebar di kawasan Asia Tenggara antara lain di Laos, Kamboja, Thailand, Burma, Filipina, Vietnam dan Indonesia. Pohon pinus yang tumbuh di pulau Hainan China diperkirakan merupakan hasil penanaman. Pohon pinus tumbuh pada ketinggian 30-1800 mdpl pada berbagai tanah dan juga iklim, serta menyebar pada 23°LU–2 °LS dengan suhu rata – rata 19–28 °C. Pohon pinus tumbuh di Indonesia pertama kali terdapat di Sumatera yaitu di Aceh, Tapanuli dan Kerinci (Hidayat dan Hansen, 2001).

Pohon pinus memiliki ciri-ciri antara lain pohon besar, batang lurus menjulang ke atas, dan silindris. Pohon pinus dapat tumbuh mencapai 30 m dan memiliki diameter batang berkisar antara 60-80 cm, sedangkan jika sudah tua dapat tumbuh mencapai 45 m dan berdiameter 140 cm (Hidayat dan Hansen, 2001). Sifat yang menonjol dari pohon pinus ialah dapat tumbuh pada semua jenis tanah, pada tanah yang kurang subur, pada tanah yang berpasir dan juga tanah yang berbatu, namun pada tanah yang becek tidak dapat tumbuh dengan baik. Selain itu, pohon pinus memiliki daya toleransi luas dalam pertumbuhannya dan dapat tumbuh cukup baik pada padang alang-alang (Martawijaya *et al.*, 1989). Pohon pinus merupakan salah satu jenis tanaman yang cepat tumbuh dengan daur berkisar antara 20-35 tahun. Pada umur tersebut, kadar selulosanya mencapai titik tertinggi yaitu 51,57-54,67% dari batang kering. Pohon pinus yang digunakan untuk bahan *pulp* yaitu yang memiliki riap 18 m³/ha per tahun dengan daur 10-15 tahun, sedangkan yang digunakan untuk kayu pertukangan, pinus yang memiliki tiap 16 m³/ha per tahun dengan daur 30 tahun (Suhendang, 1990).

Salah satu manfaat yang dapat diperoleh dari pohon pinus yaitu dari getah yang dihasilkan dari kulitnya. Indonesia merupakan penghasil getah pinus terbesar ke-3 di dunia setelah China dan Brazil (Sukadaryati, 2014). Getah pinus dapat diproduksi jika pohon pinus mencapai umur 10 tahun, dengan produksi per tahun mencapai 0,4 ton per hektar (Perhutani, 2012). Getah pinus mulai disadap sejak abad 15 di Amerika dan digunakan untuk menambal perahu yang retak atau bocor (Satil *et al.*, 2011). Penyadapan pinus merupakan kegiatan yang cocok bagi negara-negara yang memiliki tegakan pinus untuk mendapatkan biomassa getah yang memberikan manfaat ekonomi dan sosial (Correa *et al.*, 2011). Dalam pelaksanaan penyadapan getah pinus belakangan ini, dengan cara melukai kulit batang dan jaringan dibawahnya yang disertai dengan atau tanpa penggunaan stimulan kimia (Correa *et al.*, 2017). Getah pinus disadap untuk berbagai keperluan lainnya selain kayu. Pohon pinus yang sudah dapat menghasilkan getah berkisar antara 30-60 Kg, resin murni 20-40 Kg, dan minyak terpentin 7-14 Kg per tahun (Hidayat dan Hansen, 2001).

Hasil hutan bukan kayu (HHBK) yang berupa getah pinus dapat menghasilkan produk berupa gum rosin dan minyak terpentin yang bernilai jual tinggi. Minyak yang mengandung senyawa terpena merupakan salah satu isomer hidrokarbon tak jenuh dari $C_{10}H_{16}$ terutama α -pinena dan β -pinena. Produksi getah pinus di Indonesia tidak hanya dimonopoli oleh Perum Perhutani yang mengelola hutan di Pulau Jawa namun juga oleh perusahaan swasta. BUMN dan perusahaan swasta telah melakukan pengelolaan hutan pinus untuk memproduksi getah, misalnya di Sulawesi dengan areal hutan pinus 130.000 ha dan di Sumatera 335.000 ha. Dalam penelitian yang telah dilakukan di Filipina, ekstrak etil alkohol dari *Pinus merkusii* menunjukkan aktivitas antikanker. Hal ini menunjukkan bahwa *Pinus merkusii* juga bermanfaat dalam dunia kesehatan (Orwa *et al.*, 2009).

2.2.2 Gum rosin

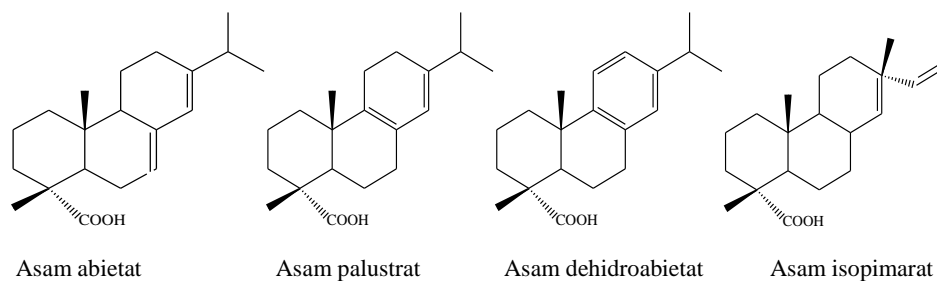
Gum rosin adalah hasil olahan destilasi uap getah sadapan batang pinus (oleoresin) selain minyak terpentin. Gum rosin berbentuk padatan berwarna kuning kecoklatan, sedangkan minyak terpentin berwujud cairan dan tak berwarna. Gum rosin merupakan asam organik *alkyl tricyclic* tak jenuh yang berasal dari derivat alam. Komponen utama dari gum rosin adalah asam abietat dan asam pimarit yang memiliki sifat amfipatik yaitu mempunyai gugus karboksil yang bersifat hidrofilik dan molekul *tricyclic* yang bersifat hidrofobik (Wiyono, 2007). Indonesia merupakan salah satu produsen gum rosin terbesar ketiga setelah China dan Brazil dengan volume produksi mencapai 60.000 ton per tahun. Gum rosin dapat dimanfaatkan sebagai bahan baku yang memiliki nilai tambah agar nilai jual ekspor dari produk gum rosin menjadi lebih meningkat (Fachrodji, 2010).

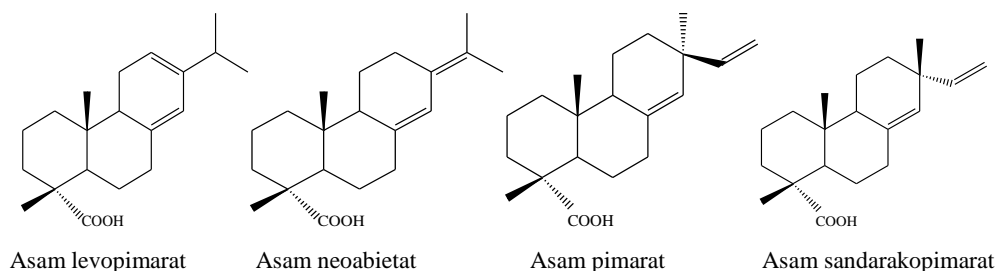
Produk gum rosin dapat digunakan dalam berbagai bidang industri antara lain industri kertas, sabun, detergen, kosmetik, cat, vernis, semir, perekat, karet, insektisida (Satil *et al.*, 2011; Sharma dan Lecha, 2013). Kegunaan gum rosin sebagai bahan baku perekat, berfungsi untuk *tackifier*, pemacu perekatan (*adhesion promoter*) atau pemacu kekentalan (*viscosity promoter*) untuk memperbaiki sifat-sifat produk akhir (Coppin *et al.*, 1995). Dalam industri kertas,

gum rosin ini digunakan sebagai bahan pendarih (*sizing agent*) untuk memperbaiki sifat kertas. Bahan pendarih (*sizing agent*) pada kertas berfungsi sebagai daya tahan lembaran kertas terhadap sebaran dan penetrasi dari air (Boer dan Ella, 2001).

Gum rosin merupakan senyawa kompleks yang dapat larut dalam pelarut organik, yang terdiri dari 80-90% asam-asam resin dan sekitar 10% komponen netral. Asam-asam resin secara garis besar dibagi menjadi dua (Gambar 2.1), yaitu asam abietat dan asam pimarat. Jenis asam resin yang termasuk dalam asam abietat adalah asam abietat, asam levopimarat, asam neoabietat, asam palustrat, asam dehidroabietat, asam tetraabietat. Asam abietat mudah terisomer oleh panas dan juga mudah teroksidasi oleh oksigen diudara, asam levopimarat yang jumlahnya lebih sedikit, mudah terisomer menjadi asam lainnya oleh pengaruh panas dan juga sangat reaktif. Jenis asam resin yang termasuk dalam asam pimarat antara lain asam pimarat, asam isopimarat, asam $\Delta^{8,9}$ isopimarat. Jenis ini lebih stabil dibandingkan dengan asam-asam lainnya yang terdapat dalam gum rosin. Asam resin yang terdapat dalam gum rosin memiliki rumus empiris yang sama yaitu $C_{20}H_{30}O_2$ (Krik dan Othmer, 2007).

Asam-asam resin yang tidak termasuk dalam jenis asam abietat maupun asam pimarat dikelompokkan dalam jenis asam lain, seperti asam elliotinoat, asam sandarakopimarat, dan asam merkusat. Distribusi jenis-jenis asam resin tersebut berbeda-beda tergantung dari jenis resin atau gum rosin, jenis kayu, dan lokasi atau tempat tumbuh (Tabel 2.1 dan Tabel 2.2) dari kayu tersebut.





Gambar 2.1 Struktur kimia asam-asam resin (Kalberg dan Hagvall2018)

Tabel 2.1 Komposisi asam resin pada berbagai jenis kayu pinus (%)

Jenis pinus	1	2	3	4	5	6	7	8	9
<i>Pinus elliotti</i> Engelm.	3,4	5,5	1,8	25	23	7,2	19	16	-
<i>Pinus palustris</i> Mill.	0	4,8	1,6	35	16	8,6	18	15	1,0
<i>Pinus taeda</i> L.	0	5,4	0,9	10	0,9	8,1	69	4,7	1,0
<i>Pinus ponderosa</i> Dougl.	0	9,3	1,7	27	12	14	22	13	1,0
<i>Pinus halepensis</i> Miller	0	0	1,6	31	8,9	3,6	45	11	-
<i>Pinus brutia</i> Tenora	0	0	1,4	32	10	4,8	40	12	-
<i>Pinus pinaster</i> Aiton	0	8,9	2,0	26	9,7	5,7	26	19	2,7
<i>Pinus caribaea</i> Morelet	0	6,9	2,3	27	18	9,0	19	17	0,8
<i>Pinus merkusii</i> Jungh. et de Vriese	0	0,2	7,8	18,5	16	3,6	28,9	6,0	19*

*) termasuk asam merkusat yaitu jenis asam resin yang hanya dimiliki oleh kayu *Pinus merkusii* dari Indonesia.

Keterangan : 1 asam elliotionat, 2 asam pimarat, 3 asam sandarakopimarat. 4 asam levopimarat dan palustrat, 5 asam isopimarat, 6 asam dehidroabietat, 7 asam abietat, 8 asam neoabietat, 9 asam lain.

Di Indonesia komposisi asam resin pada getah pinus cukup beragam di beberapa lokasi dapat dilihat pada Tabel 2.3. Selain berbagai jenis asam resin diatas, gum rosin mengandung komponen netral yang jumlahnya relatif sedikit (10%) dibandingkan kandungan asam resin. Meskipun jumlah dari komponen netral relatif sedikit, hal ini dapat berpengaruh terhadap sifat-sifat gum rosin yang dihasilkan, yaitu berpengaruh terhadap titik leleh dan sifat kristalinitas. Sifat kristalinitas pada gum rosin terbentuk secara lambat, namun dapat menyebabkan beberapa masalah, misalnya penyumbatan pada saluran pipa dan pada alat proses penyaringan. Jika tidak dihambat akan menyebabkan meningkatnya viskositas dan mengurangi stabilitas produk (Kutsek, 2005).

Pada mulanya gum rosin digunakan lebih banyak dalam bentuk gum rosin non modifikasi, seperti pada tinta cetak, varnis, pengisi pada pabrik kertas (*sizing agent*), dan perekat. Namun sekarang di Industri, lebih tertarik dengan gum rosin modifikasi karena dari segi kualitas, gum rosin modifikasi jauh lebih baik daripada gum rosin non modifikasi. Gum rosin non modifikasi memiliki kelemahan-kelemahan untuk penggunaannya, misalnya sering terjadi kristalisasi, terjadi proses oksidasi, bereaksi dengan logam-logam berat terutama pada penggunaan varnis (Sutanti *et al.*, 2017).

Tabel 2.2 komposisi asam resin pada gum rosin dari berbagai negara (%).

Jenis asam resin	Indonesia	Cina	Meksiko	Portugal	Brazil
Asam Pimarcat	0,2	8,3	5,4	8,6	4,0
Asam Sandarakopimarcat	7,8	2,3	1,3	1,9	2,0
Asam Palustrat	18,5	13,1	23,4	21,5	12,3
Asam Isopimarcat	16,0	1,5	12,4	4,5	15,9
Asam Abietat	28,9	48,4	12,8	26,3	36,1
Asam Dehidroabietat	3,6	4,5	5,4	5,9	3,1
Asam Neoabietat	6,0	12,4	10,3	18,1	12,8
Asam Dihidroabietat	0	0,8	0,6	0	0,4
Asam Merkusat	6,5	0	0	0	0

(Moyers, 1989)

Tabel 2.3 Komposisi asam resin dari beberapa lokasi di Indonesia (%)

Jenis Asam Resin	Jawa Barat	Jawa Timur	Sumatera Utara
Asam Pimarcat	-	-	-
Asam Sandarakopimarcat	12,2	11,7	11
Asam Isopimarcat	17,9	17,6	18,8
Asam Palustrat	9,7	17,2	12,7
Asam Dehidroabietat	27,7	15,6	11,6
Asam Abietat	17	24	33,8
Asam Neoabietat	1,3	1,5	2,5
Asam Dihidroabietat	14,2	12,3	9,7

(Wiyono, 2007)

Kualitas gum rosin dibedakan menjadi dua kelompok yaitu klasifikasi khusus dan umum. Klasifikasi khusus kualitas gum rosin antara lain penilaian warna, titik lunak, kadar abu, kadar kotoran, dan komponen yang menguap. Dari klasifikasi khusus, kualitas gum rosin dibagi empat yaitu mutu utama, pertama, kedua, dan ketiga, dapat dilihat pada Tabel 2.4. Untuk klasifikasi umum gum

rosin, antara lain bilangan asam, bilangan iod, dan bilangan penyabunan, dapat dilihat pada Tabel 2.5 (SNI, 2011).

Tabel 2.4 Klasifikasi khusus kualitas gum rosin

No	Jenis Uji	SatuanPersyaratanMutu				
		U	P	D	T	
1.	Warna					
	a. Metode Lovibond	X	WW	WG	N	
	b. Metode Gardner	≤6	≤7	≤8	≤9	
2.	Titik Lunak	°C	≥78	≥78	≥76	≥74
3.	Kadar Kotoran	%	≤0,02	≤0,05	≤0,07	≤0,10
4.	Kadar Abu	%	≤0,01	≤0,04	≤0,05	≤0,08
5.	Komponen Menguap	%	≤2	≤2	≤2,5	≤3

Keterangan :

Kualitas

U (Utama) : Kualitas utama X (Extra) : kuning jernih
P (Pertama) : Kualitas pertama WW (Water White) : kuning
D (Kedua) : Kualitas kedua WG (Window Glass) : kuning kecoklatan
T (ketiga) : Kualitas ketiga N (Nancy) : kecoklatan
(SNI, 2011)

Tabel 2.5 Klasifikasi umum kualitas gum rosin

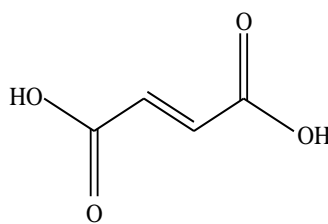
No	Jenis Uji	Persyaratan
1	Bilangan Asam	160-190
2	Bilangan Penyabunan	170-220
3	Bilangan Iod	5-25

(SNI, 2011)

2.2.3 Asam Fumarat

Asam fumarat merupakan senyawa kimia yang memiliki rumus kimia $\text{HO}_2\text{CCH}=\text{CHCO}_2\text{H}$ (Gambar 2.2). Senyawa ini berbentuk kristal dan merupakan isomer asam dikarboksilat tak jenuh asam maleat, dan memiliki rasa seperti buah-bauhan. Sifat-sifat kimia dari asam fumarat bisa dilihat dari gugus fungsinya. Asam fumarat termasuk asam lemah yang dapat membentuk ester, dapat mengalami reaksi adisi pada ikatan rangkapnya, dan juga merupakan dienofil yang baik. Asam fumarat berbentuk kristal putih yang mempunyai rumus molekul $\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4$. Proses produksi asam fumarat ini menggunakan bahan baku butena. Asam fumarat juga dapat dibuat dari fermentasi jus apel menggunakan jamur *Rizhopus nigricans* (Podgorska, 2004).

Asam fumarat juga dapat digunakan sebagai bahan awal untuk reaksi polimerisasi dan esterifikasi (Liu *et al.*, 2015). Asam fumarat merupakan asam dikarboksilat tak jenuh yang memiliki empat atom karbon dan banyak digunakan dalam industri makanan. Karena memiliki 2 ikatan karboksilat, asam fumarat digunakan dalam berbagai aplikasi industri. Seperti pembuatan resin sintesis, polimer yang dapat terbiodegradasi, dan produksi zat antara untuk sintesis kimia (Ding *et al.*, 2011).



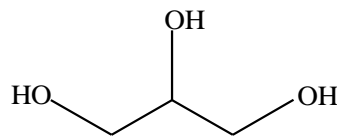
Gambar 2.2 Struktur Asam Fumarat (Ilica *et al.*, 2018)

Asam fumarat (FA) atau asam (*E*)-butanedioat adalah senyawa kristal dan merupakan isomer asam dikarboksilat tak jenuh asam maleat. Asam fumarat merupakan isomer *trans* dari asam butadioat dengan bentuk kristal berwarna putih yang memiliki titik leleh 300 °C, dengan pemanasan sampai 300 °C, asam fumarat berubah menjadi anhidrida maleat, kristal asam fumarat tidak mudah larut dalam air. Garam dan ester asam fumarat banyak digunakan dalam industri makanan, farmasi, kimia, dan menarik perhatian karena dapat dikonversi menjadi obat-obatan terapi serta merupakan bahan awal untuk polimerisasi dan esterifikasi. FA terutama diproduksi secara petrokimia dari anhidrida maleat (Guoqiang *et al.*, 2012).

2.2.4 Gliserol

Gliserol adalah suatu trihidroksi alkohol yang terdiri atas 3 atom karbon. Setiap atom karbon memiliki gugus hidroksil (-OH). Satu molekul gliserol dapat mengikat satu, dua, tiga molekul asam lemak dalam bentuk ester, yang disebut monogliserida, digliserida dan trigliserida. Gliserol memiliki susunan molekul $C_3H_8O_3$ (Gambar 2.3). Gliserol merupakan bahan kimia murni, namun di dalam perdagangan disebut gliserin. Dalam kondisi murni, gliserol bersifat tidak

beracun, tidak berwarna, tidak berbau, berasa manis dan mempunyai viskositas yang tinggi. Gliserol ini larut dalam air karena adanya tiga gugus –OH. Gliserol dapat larut dalam alkohol dan juga dapat larut dalam pelarut tertentu seperti eter dan etil asetat, namun tidak dapat larut dalam hidrokarbon (Wardani, 2007). Gliserol merupakan produk samping dalam produksi biodiesel, hal ini menjadikan gliserol sebagai bahan baku menjanjikan berbiaya rendah dalam produksi bahan kimia dan bernilai tambah. Banyak penggunaannya yang dikembangkan untuk transformasi gliserol dengan berbagai proses katalitik seperti hidrogenolisis, oksidasi, transesterifikasi, dehidrasi, dan esterifikasi (Sun *et al.*, 2016).



Gambar 2.3 Struktur Gliserol (Kalberg dan Hagvall 2018)

Gliserol memiliki berbagai kegunaan, hal ini dapat ditunjukkan dengan adanya keragaman jenis produk berbahan baku gliserol yang saat ini beredar secara luas dipasaran seperti dalam pembuatan pernis, tinta, permen dan sebagainya (Wardani, 2007). Gliserol juga digunakan untuk penghalus krim cukur, sabun, dalam obat batuk dan sirup atau untuk pelembab (Hart, 1983; Atun dan Fadliyani, 2015).

Tabel 2.6 Karakteristik gliserol

Nama IUPAC	Propan 1,2,3 triol
Nama lain	Gliserin, 1,2,3 propanetriol, 1,2,3 tritidroksiopropana, gliserol, glisil alkohol
Rumus kimia	$C_3H_5(OH)_3$
Berat molekul	92,093882 g/mol
Densitas	1,261 g/mL
Viskositas	1,5 Pa.s
Titik leleh	17,8 °C
Titik nyala	290 °C

(Yurida *et al.*, 2013)

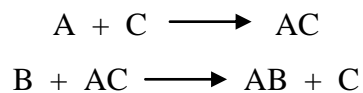
Proses esterifikasi gliserol adalah salah satu metode yang banyak digunakan untuk memproduksi produk turunan gliserol. Dalam reaksi esterifikasi dihasilkan bermacam-macam ester yang mempunyai banyak kegunaan dan

bernilai lebih tinggi. Produk dari konversi gliserol ini bersifat ramah lingkungan dan terbarukan karena bukan merupakan turunan dari minyak bumi (Prasetyo *et al.*, 2012). Tabel 2.6 merupakan karakteristik dari gliserol.

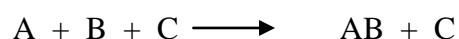
2.2.5 Katalis

Katalis adalah suatu zat yang dapat mempercepat laju reaksi pada suhu tertentu, tanpa mengalami perubahan atau terpakai oleh reaksi itu sendiri. Suatu katalis berperan dalam reaksi tetapi bukan sebagai pereaksi atau produk. Katalis memungkinkan reaksi berlangsung lebih cepat atau memungkinkan reaksi pada suhu lebih rendah akibat perubahan yang dipicu pereaksi. Katalis menyediakan suatu jalur pilihan dengan energi yang lebih rendah. Katalis mengurangi energi yang dibutuhkan untuk berlangsungnya reaksi (Purnami *et al.*, 2015). Katalis dibagi menjadi dua jenis, yaitu homogen dan heterogen. Katalis homogen adalah katalis yang fasenya asam dengan fase dari reaktan, sedangkan heterogen adalah katalis yang fasenya berbeda dengan fase reaktan (Sugiyarto, 2012).

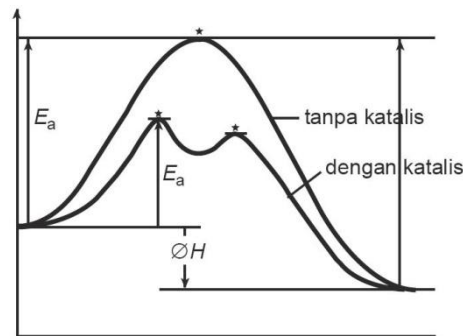
Contoh sederhana untuk katalis heterogen yaitu bahwa katalis menyediakan suatu permukaan dimana pereaksi-pereaksi untuk sementara terjepit. Ikatan yang berada dalam substrat menjadi lemah sehingga memadai terbentuknya produk baru. Ikatan antara produk dan katalis lebih lemah, sehingga akhirnya terlepas. Katalis homogen umumnya bereaksi dengan satu atau lebih pereaksi untuk membentuk suatu perantara kimia yang selanjutnya bereaksi membentuk produk akhir reaksi, dalam suatu proses yang memulihkan katalisnya. Berikut ini merupakan skema umum reaksi katalitik, C melambangkan katalisnya:



Meskipun katalis (C) bereaksi pada reaksi 1, namun selanjutnya dihasilkan kembali oleh reaksi 2, sehingga untuk reaksi keseluruhan menjadi :



(Purnami *et al.*, 2015).



Gambar 2.4 Pengaruh katalis terhadap laju reaksi (Silberberg, 2008)

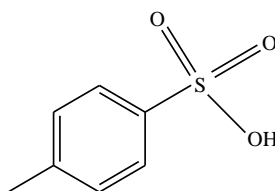
Aktivitas katalis merupakan suatu kemampuan yang dimiliki katalis untuk mempercepat tercapainya kesetimbangan. Aktivitas katalis dinyatakan dalam Ton yaitu menyatakan banyaknya reaktan yang terkonversi atau produk yang dihasilkan dari sejumlah reaktan awal yang digunakan dalam waktu tertentu dan per berat katalis. Selektivitas reaksi adalah bagian dari reaktan yang dikonversikan untuk membentuk produk yang diinginkan terhadap reaktan yang terkonversi dari sebuah reaksi (Fatimah, 2013).

2.2.6 Asam *p*-toluenasulfonat

Asam *p*-toluenasulfonat atau *p*-toluenesulfonic acid (PTSA) atau disingkat dengan TsOH merupakan senyawa organik yang memiliki rumus $\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{SO}_3\text{H}$ (Gambar 2.5). Asam *p*-toluenasulfonat berbentuk padatan berwarna putih yang dapat larut dalam air, alkohol dan juga pelarut organik polar lainnya. Seringkali PTSA ini merujuk pada senyawa monodiratnya $\text{TsOH}\cdot\text{H}_2\text{O}$. Asam *p*-toluenasulfonat merupakan senyawa organik kuat, satu juta lebih kuat dari asam benzoat. Asam *p*-toluenasulfonat merupakan salah satu asam kuat yang berupa zat padat, sehingga mudah ditimbang. Selain itu, berbeda dengan asam mineral kuat lainnya (terutama asam nitrat, asam sulfat, dan asam perklorat), asam *p*-toluenasulfonat bersifat non-oksidator (Baghernejad, 2011).

Dalam skala industri, Asam *p*-toluenasulfonat dibuat dari sulfonasi toluena sulfonasi toluena. Asam *p*-toluenasulfonat berhidrasi dengan cepat. Umumnya terdapat pula sebagian kecil asam benzenasulfonat dan asam sulfat yang dihasilkan. Ketidakh murnian ini dapat dipisahkan dengan rekristalisasi dari asam

klorida, kemudian diikuti dengan pengeringan azeotropik. Asam *p*-toluenasulfonat berguna dalam sintesis organik sebagai katalis asam yang larut dalam pelarut organik. Contoh penggunaannya adalah asetilasi aldehida, esterifikasi asam karboksilat, dan transesterifikasi ester. Penggunaan katalis organik banyak digunakan dalam sintesis organik, karena memiliki banyak keunggulan seperti kemampuan beraksi dengan substrat asam kondisi reaksi yang lebih ringan, dan selektivitas. Asam *p*-toluenasulfonat merupakan katalis organik banyak digunakan dalam sintesis organik karena harganya yang murah kemudahan penanganan dalam isolasi (Mousavidan Maghsoodlou, 2014).



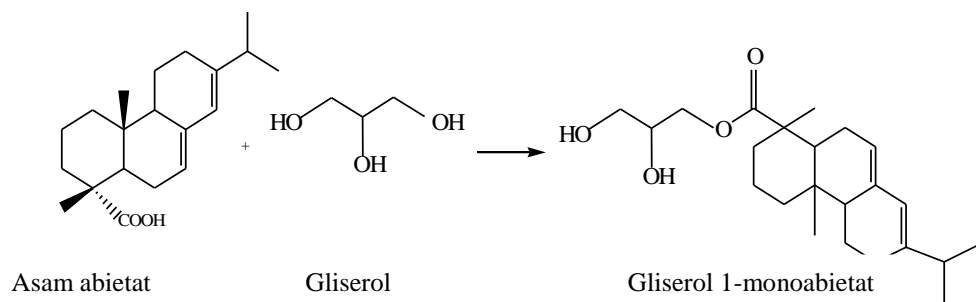
Gambar 2.5 Struktur Asam *p*-toluenasulfonat (Alva *et al.*, 2016)

2.2.7 Proses Esterifikasi

Reaksi esterifikasi adalah reaksi antara asam karboksilat dengan alkohol yang menghasilkan ester dan melepaskan molekul oksigen (Prasetyo *et al.*, 2012). Reaksi esterifikasi dapat dilakukan dengan atau tanpa menggunakan katalis dalam reaksi. Katalis yang digunakan pada reaksi esterifikasi pada umumnya adalah katalis asam. Jika reaksi dilakukan tanpa menggunakan katalis, reaksi esterifikasi dapat dilakukan pada suhu diatas 250 °C. Reaksi esterifikasi pada gum rosin dapat dilakukan pada suhu optimal 280 °C. Reaksi esterifikasi merupakan suatu reaksi yang dapat dibalik (reversible) (Solomons dan Fryhle, 2011). Secara umum, rosin atau derivat rosin diproses menjadi ester gum karena struktur alami dari gugus karboksil memerlukan suhu tinggi.

Metode esterifikasi dilakukan untuk memproduksi karboksil ester (RCOOR'). Metode yang paling umum digunakan untuk menghasilkan ester yaitu reaksi asam karboksilat dan alkohol dengan melepas molekul air. Ester juga dapat dibentuk dengan reaksi lain termasuk menggunakan asam anhidrat, asam klorida, amida, nitrat, eter, aldehida, hidrogenasi alkohol dan keton (Kirk dan Othmer, 2007). Reaksi esterifikasi menggunakan katalis homogen memiliki keuntungan

yaitu aktivitas dan selektivitasnya tinggi. Namun sulit dipisahkan dari campuran reaksi dan kurang stabil pada suhu tinggi (Aziz *et al.*, 2011). Mekanisme reaksi esterifikasi merupakan reaksi substitusi asil nukleofil dengan katalisator asam. Gugus karbonil dari asam karboksilat tidak cukup kuat sebagai elektrofil untuk diserang oleh alkohol. Katalisator asam akan memprotonasi gugus karbonil dengan mengaktifkannya ke arah penyerangan nukleofil. Pelepasan proton akan menghasilkan hidrat dari ester, kemudian terjadi transfer proton.



Gambar 2.6 Reaksi esterifikasi (Kalberg dan Hagvall, 2018)

2.2.8 Produk Modifikasi Gum Rosin

Pemanfaatan derivat gum rosin dapat digunakan untuk produk *food grade* dan *non food grade*, namun secara umum penggunaan gum rosin lebih kearah produk *non food grade*. Pada prinsip pengolahan derivat gum rosin *food grade* dan *non food grade* adalah sama hanya berbeda pada kualitas gum rosin yang digunakan. Derivat gum rosin *food grade* menggunakan gum rosin dengan kualitas X dan bahan kimia yang digunakan juga mempunyai kemurnian yang tinggi. Undang-Undang Keamanan Pangan Republik Rakyat China (2009) menjelaskan bahwa zat tambahan yang terkandung dalam makanan harus ada dalam daftar yang ada pada Standar Keamanan Pangan Nasional. Gum rosin tidak ada dalam daftar tersebut. Penggunaan gum rosin tidak diizinkan dalam pengolahan makanan. Namun masih digunakan secara diam-diam di beberapa perusahaan kecil pengolahan unggas karena kinerjanya yang luar biasa dan biaya yang rendah (Zhu *et al.*, 2014).

Gum rosin ester adalah salah satu turunan atau modifikasi gum rosin, gum rosin akan direaksikan dengan senyawa alkohol yang akan membentuk senyawa ester. Dalam membentuk gum rosin ester, ada beberapa cara yang dilakukan, yaitu

dengan interaksi langsung antara gum rosin dengan alkohol saling tukar posisi ester dan cara lain seperti dengan mereaksikan gum rosin dan fenol, monobutil eter, dieter glikol dan sebagainya. Gum rosin ester merupakan produk yang diperoleh dari esterifikasi rosin dan derivat gum rosin seperti gum rosin maleat, gum rosin fumarat, gum rosin polimerisasi, gum rosin dispropionasi, gum rosin dehidrogenasi, dan gum rosin hidrogenasi. Gum rosin ester digunakan untuk bahan substitusi dalam pembuatan pernis dengan sifat tahan air yang baik. Berkaitan dengan kualitasnya, beberapa sifat yang digunakan sebagai cara untuk menentukan kualitas gum rosin ester antara lain sifat penampakan dan warna, titik lunak, dan bilangan asam (Zhen, 2013).

Esterifikasi gum rosin merupakan salah satu cara untuk mendapatkan kualitas produk yang diinginkan. Hasil esterifikasi gum rosin menunjukkan ketahanan oksidasi yang baik, kerapuhan yang rendah, stabilitas termal yang tinggi, dan warna terang. Selain itu, gum rosin ester dapat menghasilkan titik lunak yang lebih tinggi dibandingkan gum rosin awal. Jika direaksikan dengan metanol, etilen glikol, atau terutama gliserol, ester yang terbentuk dapat digunakan dalam berbagai aplikasi, seperti perekat, penetralisir dalam industri kertas, fluks solder, perekat, dan lain-lain (Wang *et al.*, 2016).

BAB III

METODOLOGI PENELITIAN

3.1 Tempat dan Waktu

Penelitian ini dilakukan di Laboratorium Kimia Organik dan Riset Jurusan Kimia FMIPA UNNES dan Laboratorium *Pehutani Pine Chemical Industry* (PPCI) Pemalang. Adapun waktu pelaksanaannya yaitu mulai bulan Maret sampai bulan Oktober 2019.

3.2 Variabel Penelitian

3.2.1 Variabel Bebas

Variabel bebas yaitu variabel yang akan diteliti pengaruhnya terhadap variabel terikat. Variabel bebas dalam penelitian ini adalah perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat yaitu 1:1, 2:1, dan 3:1 dan variasi penambahan katalis PTSA 0,1%, 0,2%, dan 0,3%

3.2.2 Variabel Terikat

Variabel terikat adalah variabel yang menjadikan titik pusat penelitian. Variabel terikat dalam penelitian ini adalah sifat fisiko kimia produk FMRE, total ester produk FMRE.

3.2.3 Variabel Terkendali

Variabel terkendali adalah faktor-faktor lain yang dapat mempengaruhi hasil reaksi yang dikendalikan agar tidak mempengaruhi variabel bebas. Variabel terkendali dalam penelitian ini adalah temperatur, berat gum rosin, berat asam fumarat, berat katalis PTSA, berat gliserol

3.3 Alat dan Bahan

3.3.1 Alat

Alat yang digunakan dalam kegiatan penelitian ini adalah erlenmeyer *pyrex*, labu leher tiga, mortar dan alu, gelas kimia 250 mL, *hot plate*, *magnetic stirrer*, *softening point ring and ball apparatus*, klem dan statif, termometer raksa, timbangan analitik, corong, buret 50 mL, pipet ukur 25 mL, gelas ukur 250 mL,

pipet tetes, pengaduk kaca, kondensor, pompa air, wadah untuk mencetakan gum rosin, FTIR (*Fourier Transform Infrared*) Shimadzu Instrument Spectrum One 8400S dan GC-MS (*Gas Chromatograph-Mass Spectrometer*) Agilent 7890A MS 5975C FL MSD.

3.3.2 Bahan

Bahan baku utama yang digunakan dalam penelitian ini adalah gum rosin kualitas WW. Bahan kimia yang digunakan untuk pengolahan produk derivat dan pengujian adalah asam fumarat *Merck*, PTSA (*p-toluene sulfonic acid*) *Merck*, gliserol, etanol teknis, larutan standar kalium hidroksida (KOH) 0,5 N, indikator *phenolphthalein* 1% dalam alkohol 95% *grade pro analyst*, toluena, etanol netral, natrium tiosulfat *Merck*, KI 10 %, amilum, larutan kloroform *Merck*, larutan reagen WIJS *Merck*, dan aquades.

3.4 Prosedur Kerja

3.4.1 Karakterisasi Bahan Baku

Penelitian pendahuluan dilakukan dengan mengkarakterisasi bahan baku yang akan digunakan melalui beberapa pengujian yaitu diantaranya warna, titik lunak (*Softening Point*), bilangan asam, dan bilangan iod.

3.4.2 Sintesis FMRE dengan variasi perbandingan Ratio Mol dan Konsentrasi katalis

Tabel 3.1 Esterifikasi gum rosin fumarat dan gliserol dengan variasi ratio mol asam karboksilat dan variasi penambahan katalis

Esterifikasi	Gum rosin : asam fumarat (mol)	Gliserol (%)	PTSA (%)
1	1:1	12	0,1
2	1:1	12	0,2
3	1:1	12	0,3
4	2:1	12	0,1
5	2:1	12	0,2
6	2:1	12	0,3
7	3:1	12	0,1
8	3:1	12	0,2
9	3:1	12	0,3

(Purnavita *et al.*, 2017) dengan modifikasi

Dalam 100 mL labu alas bulat berleher tiga yang dilengkapi dengan pengaduk magnet, gum rosin dan asam fumarat dipanaskan sampai 100 °C, dan ditambahkan dengan katalis asam yaitu asam *p*-toluenasulfonat (PTSA) dan ditambahkan gliserol 12% dilakukan pada suhu reaksi yaitu pada suhu 180 °C, reaksi berlangsung selama 4 jam. Dilakukan variasi seperti pada Tabel 3.1.

3.4.3 Yield

Perhitungan *yield* produk FMRE yang dihasilkan dari penelitian ini dapat dihitung dengan rumus sebagai berikut:

$$Yield = \frac{\text{Berat sintesis gum rosin}}{\text{Berat teoritis gum rosin}} \times 100\%$$

3.4.4 Pengujian Sifat fisiko kimia FMRE

Pengujian sifat fisiko kimia FMRE dilakukan berdasarkan SNI 7636 : 2011 meliputi pengujian warna dengan *Coloumeter Lico 620*, pengujian titik lunak, pengujian bilangan asam, dan pengujian bilangan iod.

a. Warna

Pengujian warna dilakukan dengan metode Gardner. Sampel diuji sesuai Instruction Manual Gardner Liquid Color Standard. Cara kerjanya yaitu melarutkan gum rosin pada toluena dengan perbandingan 1:1, kemudian di cek dengan alat *Colourmeter Lico 620*.

b. Titik Lunak

Pengujian titik lunak berdasarkan SNI 7636 : 2011 dilakukan dengan menggunakan *softening point ring and ball apparatus*. Sampel uji yang telah dibuat serbuk halus dicairkan pada suhu rendah, masukkan ke dalam ring selanjutnya permukaan diratakan dan biarkan beberapa waktu hingga mengeras. Letakkan ring yang berisi sampel uji pada ring holder dan letakkan bola baja diatas contoh uji tersebut. Setelah itu *beaker glass* volume 1000 mL diisi aquades sampai ketinggian 800 mL, masukan ring beserta bola baja dan termometer ke

dalam *beaker glass*. Pemanasan dilakukan sampai gum rosin tersebut melunak dan bola baja menyentuh plat dasar. Titik lunak adalah suhu rata-rata dari hasil pembacaan pada waktu bola baja turun menyentuh plat dasar.

c. Bilangan Asam

Pengujian bilangan asam berdasarkan SNI 7636 : 2011 dilakukan dengan dengan cara menimbang sampel uji gum gosin yang telah dibuat serbuk halus sebanyak ± 4 gram dalam erlenmeyer 250 mL yang sudah diketahui beratnya, kemudian ditambahkan etanol netral sebanyak 100 mL dan ditambah indikator *phenophthalein* sebanyak 3 tetes. Titik akhir titrasi dicapai apabila terjadi perubahan warna mennjadi merah muda. Bilangan asam dihitung dengan menggunakan rumus sebagai berikut:

$$AV = \frac{V \text{ KOH} \times N \text{ KOH} \times 56,1}{W}$$

Keterangan : V : volume larutan KOH yang diperlukan (mL)

N : normalitas kalium hidroksida (0,1 N)

W : berat contoh uji (g)

56,1 : berat molekul KOH.

d. Bilangan Iod

Pengujian bilangan iod dilakukan dengan menimbang sampel gum rosin yang telah dibuat serbuk halus sebanyak 1 gram kemudian ditambah dengan 20 mL larutan kloroform dan larutan Wijs 25 mL dengan menggunakan pipet pipet ukur 25 mL, simpan larutan di tempat yang gelap selama ± 30 menit. Setelah ± 30 menit, ditambahkan KI 10 % kemudian diencerkan dengan 100 mL aquades. Titrasi larutan sampel dengan larutan standard natrium tiosulfat 0,1 N sampai 10 ml, kemudian tambahkan 1-2 mL indikator amilum. Lanjutkan titrasi hingga warna biru hilang.

Bilangan iod dapat dihitung dengan rumus:

$$IV = \frac{(V_2 - V_1) \times 12,69}{W}$$

Keterangan : V_1 : volume titrasi contoh uji (mL).

V_2 : volume titrasi blanko (mL).

N : normalitas $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$.

W : berat contoh uji, dinyatakan dalam gram.

12,69: bobot setara bilangan iod.

3.4.5 Karakterisasi Kimia

Karakterisasi kimia produk FMRE dengan menggunakan *Fourier Transform Infrared (FTIR) Spectrophotometer*. FTIR digunakan untuk mengetahui gugus fungsi suatu senyawa organik yang terkandung dalam sampel. Kemudian, untuk menganalisis asam resin seperti asam abietat dan asam dehidroabietat dengan menggunakan GC-MS (*Gas Chromatograph-Mass Spectrometer*). Analisis GC-MS dilakukan untuk mengetahui senyawa-senyawa yang terkandung dalam produk hasil esterfikasi gum rosin dan kemungkinan struktur dari senyawa tersebut.

BAB IV

HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1 Karakterisasi Bahan Baku

Gum rosin merupakan resin yang terbentuk secara alami yang diperoleh dari pohon pinus. Gum rosin terdiri dari asam-asam resin seperti asam resin tipe abietat yang memiliki ikatan rangkap terkonjugasi dan asam resin tipe pimarat dengan ikatan non-konjugasi (Kaith *et al.*, 2016). Asam abietat memiliki ikatan ganda dan gugus karboksil terkonjugasi. Asam pimarat merupakan bentuk dehidro dari asam abietat. Gugus karboksil dan ikatan rangkap dalam asam dapat menghasilkan banyak jenis garam dan senyawa yang dimodifikasi untuk tujuan yang lebih baik. Gum rosin telah digunakan diberbagai bidang seperti bahan pengawet petrokimia, elektroda untuk sel surya, dan sebagai penenang untuk menghilangkan ion logam (Jindal *et al.*, 2017). Di industri gum rosin digunakan sebagai *sizing agent* pada kertas, tinta cetak, sabun, kosmetik, perekat, pengemulsi, dan persediaan medis (Liu *et al.*, 2019).

Gum rosin juga digunakan dalam produk kemasan makanan. Namun pada tahun 2009, Undang-Undang Keamanan Pangan Republik Rakyat China (2009) menjelaskan bahwa zat tambahan yang terkandung dalam makanan harus ada dalam daftar yang ada pada Standar Keamanan Pangan Nasional. Gum rosin tidak ada dalam daftar tersebut. Penggunaan gum rosin tidak diizinkan dalam pengolahan makanan. Namun masih digunakan secara diam-diam di beberapa perusahaan kecil pengolahan unggas karena kinerjanya yang luar biasa dan biaya yang rendah (Zhu *et al.*, 2014). Sifat fisika dan kimia gumrosin awal yang sudah diuji dapat dilihat pada Tabel 4.1.

Tabel 4.1 Sifat fisika dan kimia gumrosin

Jenis uji	Hasil	SNI
Warna	6,6	≤ 7
Titik lunak ($^{\circ}\text{C}$)	78	≥ 78
Bilangan Asam (mg KOH/g)	189,36	160-190
Bilangan Iod (mg Iod/g)	24,47	5-25

Hasil karakterisasi gumrosin pada Tabel 4.1 diatas yang dibandingkan dengan standar kualitas gum rosin yang ada yaitu sesuai SNI 7636 : 2011, dapat dilihat bahwa hasil analisa bahan baku gumrosin yang digunakan sudah memenuhi standar kualitas gum rosin yaitu sesuai dengan rentang standar gumrosin, untuk warna gum rosin 6,6 dan sesuai dengan standar gum rosin ≤ 7 yang masuk dalam karakteristik WW, titik lunak gumrosin berada pada suhu 78°C , sedangkan titik lunak berdasarkan standar gum rosin yaitu sebesar $\geq 78^{\circ}\text{C}$. Titik lunak menyatakan adanya kadar terpenin yang terkandung pada gum rosin. Makin kecil kadar terpenin yang tersisa, makin tinggi titik lunak gum rosin (Wiyonoet *al.*, 2007).

Data bilangan asam yang diperoleh pada gum rosin WW yaitu sebesar 189,36 mg KOH/g sudah memenuhi standar gum rosin yaitu 160-190. Menurut Wiyonoet *al.*(2007) bilangan asam ditentukan untuk mengetahui jumlah asam bebas yang terkandung dalam bahan. Nilai bilangan iod gum rosin WW yang dihasilkan sebesar 24,47 mg Iod/g hal ini sudah sesuai dengan standar yaitu 5-25. Bilangan iod sering digunakan untuk menentukan jumlah ketidakjenuhan dalam asam lemak. Ketidakjenuhan tersebut berada dalam bentuk ikatan rangkap, yang bereaksi dengan senyawa iod. Semakin tinggi bilangan iod, semakin tinggi pula ikatan C=C yang ada (Thomas, 2002).

4.2 Sifat fisiko kimia FMRE

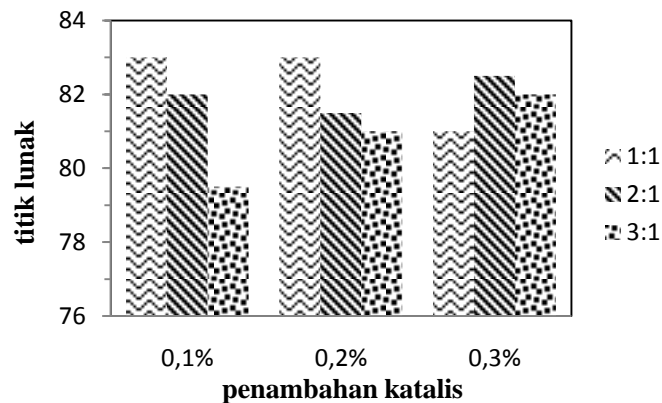
Sifat fisika dan kimia FMRE yang sudah diuji dapat disajikan pada Tabel 4.2.

Tabel 4.2 Sifat fisika dan kimia FMRE

Ratio mol	PTSA (%)	Nilai Mutu				
		Warna	Titik lunak ($^{\circ}\text{C}$)	Bilangan asam (mg KOH/g)	Bilangan iod (mg Iod/g)	kelarutan dalam toluena 1:1
1:1	0,1	11,4	83	183,497	31,407	Larut
1:1	0,2	11,2	83	183,764	29,237	Larut
1:1	0,3	11,5	81	185,287	30,665	Larut
2:1	0,1	11,9	82	179,932	32,101	Larut
2:1	0,2	17,4	81,5	174,403	30,062	Larut
2:1	0,3	11,7	82,5	181,407	30,329	Larut
3:1	0,1	11,9	79,5	174,062	32,219	Larut
3:1	0,2	11,6	81	170,249	32,664	Larut
3:1	0,3	12	82	174,227	31,782	Larut

4.2.1 Titik lunak

Titik lunak merupakan suhu saat gum rosin mulai melunak yang diukur dengan cincin dan bola (*softening ring and ball apparatus*) yang dinyatakan dalam derajat celcius (SNI, 2011). Titik lunak gum rosin berkisar antara 70-80°C, semakin tinggi titik lunak kualitas gumrosinakan semakin baik (FAO, 1995). Titik lunak menunjukkan salah satu sifat khas gum rosin dan tingkat kemasakannya. Tingkat kemasakannya berhubungan erat dengan kadar terpentin yang tersisa dalam gum rosin, dimana makin tinggi titik lunak gum rosin maka semakin kecil kadar terpentin yang ada didalamnya (Wiyonoet *al.*, 2007).



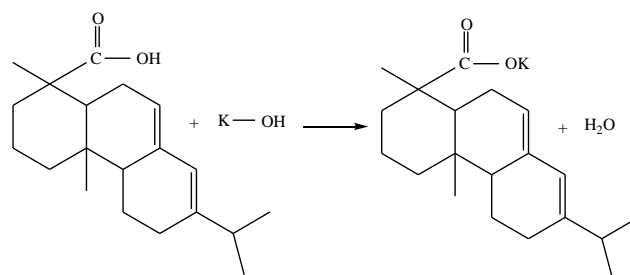
Gambar 4.1 Grafik titik lunak FMRE

Dari data yang telah diperoleh terlihat pada Tabel 4.2, menunjukkan bahwa titik lunak FMRE yang dihasilkan berkisar antara 79-85°C. Nilai titik lunak tertinggi diperoleh dari variasi ratio mol 1:1 dengan katalis 0,1% dan variasi ratio mol 1:1 dengan katalis 0,2% yaitu 83°C dan titik lunak terendah diperoleh dari variasi 3:1 dengan katalis 0,1% yaitu 79,5°C, dari data diatas dapat disimpulkan bahwa semakin banyak asam fumarat yang ditambahkan, titik lunak akan semakin tinggi. Titik lunak produk yaitu FMRE lebih tinggi daripada titik lunak gum rosin biasa hal ini disebabkan karena FMRE mempunyai gugus karboksil lebih banyak dibandingkan dengan asam levopimarit yang terdapat pada gum rosin, berat molekul yang dihasilkan lebih besar dibandingkan asam levopimarit sehingga dapat meningkatkan titik lunaknya. Menurut Harold (1990)

menyatakan bahwa semakin panjang rantai C dapat meningkatkan titik lunaknya. Gum rosin modifikasi memiliki titik lunak dan bilangan asam yang lebih tinggi dikarenakan oleh bertambahnya gugus fungsinya (Kirk dan Othmer, 2007). Gambar 4.1 merupakan grafik titik lunak FMRE dari berbagai variasi ratio mol dan penambahan katalis.

4.2.2 Bilangan asam

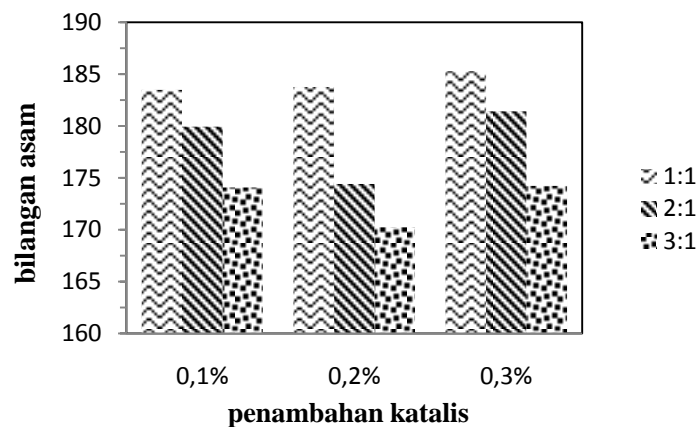
Bilangan asam adalah banyaknya kalium hidroksida (KOH) dalam miligram yang diperlukan untuk menetralkan satu gram asam resin yang terkandung dalam senyawa gum rosin (SNI, 2011). Dari data hasil yang diperoleh pada Tabel 4.2, menunjukkan bahwa bilangan asam FMRE berkisar antara 170-185 mg KOH/g. Bilangan asam terendah diperoleh pada variasi 3:1 dengan katalis 0,2% yaitu 170,249 mg KOH/g dan bilangan asam tertinggi diperoleh variasi 3:1 dengan katalis 0,3% yaitu 185,287 mg KOH/g. Data pada Tabel 4.2 menunjukkan bahwa bilangan asam produk FMRE lebih rendah dibandingkan bilangan asam gumrosin hal ini disebabkan karena gugus karbonil pada gum rosin telah bereaksi dengan gliserol membentuk suatu ester. Dengan ikatan ester, atom H sebagai pembawa sifat asam dari gugus karboksil asam resin berikatan dengan gugus -OH dari gliserol. Hal ini menyebabkan jumlah atom H dalam asam resin berkurang yang berdampak terhadap penurunan bilangan asam gum rosin. Gambar 4.2 merupakan reaksi yang terjadi pada pengujian bilangan asam.



Gambar 4.2 Reaksi bilangan asam

Penambahan asam fumarat yang semakin sedikit, dapat menurunkan bilangan asam, hal ini dikarenakan semakin sedikit penambahan jumlah bahan yang bersifat asam ke dalam reaksi maka bilangan asam produk yang dihasilkan akan semakin menurun. Semakin rendah bilangan asam maka sisa asam

karboksilat yang tidak bereaksi semakin sedikit dan ester yang terbentuk semakin banyak. Pada grafik Gambar 4.3 menunjukkan bahwa bilangan asam mengalami penurunan pada penambahan asam fumarat yang semakin sedikit dikarenakan asam fumarat yang bersifat asam, jika penambahan asam fumarat semakin banyak maka menyebabkan bilangan asam semakin tinggi.

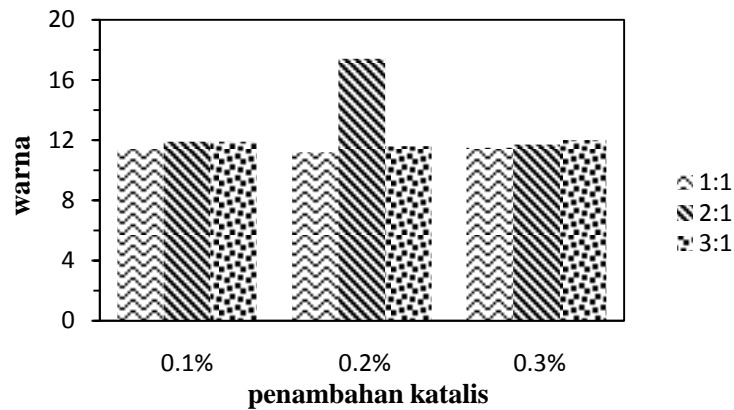


Gambar 4.3 Grafik bilangan asam FMRE

4.2.3 Warna

Warna merupakan indikator utama yang dapat dilihat secara langsung yang dapat menunjukkan seberapa baik tingkat kesempurnaan pengolahan gumrosin karena semakin pucat warna gum rosin, maka kualitasnya akan semakin baik. Secara umum, konsumen menginginkan warna gum rosin yang kuning bening dikarenakan warna kuning bening termasuk warna untuk jenis gum rosin yang berkualitas baik. Produk gum rosin modifikasi yaitu FMRE yang dihasilkan dari penelitian ini dapat dilihat pada Tabel 4.2, memiliki warna yang berbeda-beda. Kualitas warna yang dihasilkan berbeda dari warna gum rosin biasa. FMRE mempunyai kecenderungan warna jingga kemerahan hingga kecoklatan lebih gelap, kualitas warna yang dihasilkan lebih rendah dibandingkan warna gum rosin asalnya (kualitas WW) yang berwarna kuning. Hal ini diduga karena pada proses pengolahannya telah mengalami pemanasan yang lama pada suhu tinggi, yaitu berlangsung selama 4 jam dengan suhu 180 °C. Sementara itu, gum rosin sebelumnya juga dilelehkan dalam waktu yang cukup lama pada suhu 100 °C.

Pengujian warna terbaik didapatkan pada variasi 1:1 dengan katalis 0,2%. Suhu yang tidak konstan menyebabkan warna produk yang dihasilkan semakin gelap.



Gambar 4.4 Grafik warna FMRE

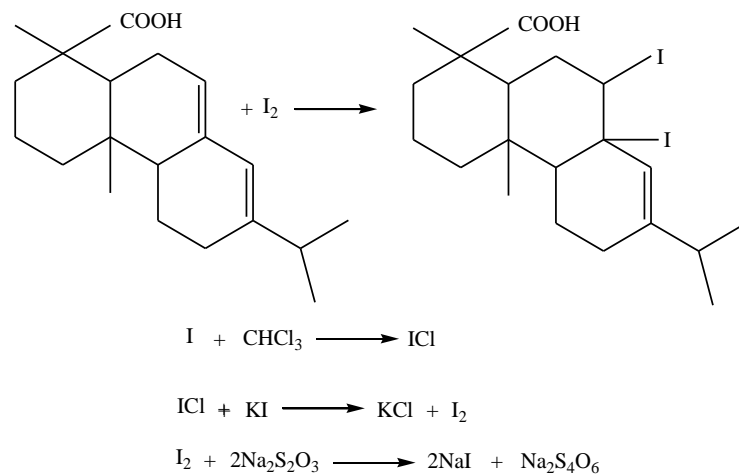
Menurut Kirk dan Othmer (2007) bahwa faktor yang sangat berpengaruh terhadap pengotoran warna gumrosin adalah pemanasan yang terlalu lama dan suhu yang tinggi. Semakin lama waktu pemanasan dan semakin tinggi suhunya, maka warna yang dihasilkan juga semakin rendah. Maka dari itu perlu dilakukan proses lanjutan seperti *bleaching* atau pemucatan untuk memperbaiki dan meningkatkan warna dari produk tersebut menjadi lebih baik supaya memperoleh warna produk yang lebih baik, minimal menghasilkan warna yang hampir sama bahkan dapat lebih bagus dari warna gum rosin asal serta mampu memenuhi standar kualitasnya. Pada Gambar 4.4 menunjukkan pada variasi ratio mol 2:1 dengan penambahan katalis 0,2% warna yang dihasilkan sangat tinggi hal ini dikarenakan suhu yang tidak stabil menyebabkan warna semakin gelap.

4.2.4 Bilangan Iod

Bilangan iod dinyatakan sebagai jumlah gram iod yang terserap oleh 100 gram lemak atau minyak pada kondisi pengujian yang digunakan (Siew, 1995). Bilangan iodin juga merupakan jumlah gramiodin yang dapat diikat oleh 100 gram lemak, ikatan rangkap yang terdapat pada lemak tidak jenuh yang akan bereaksi dengan iodin atau senyawa-senyawa iodin dalam jumlah yang lebih besar. Ketidakjenuhan tersebut berada dalam bentuk ikatan rangkap, yang akan

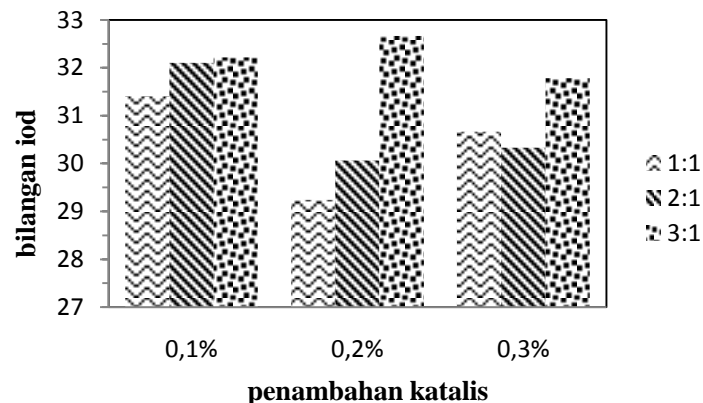
bereaksi dengan senyawa iodin, semakin tinggi bilangan iodin, semakin banyak pula ikatan C=C yang ada pada lemak tersebut (Thomas, 2002).

Percobaan ini berhubungan untuk mengetahui banyaknya ikatan rangkap dalam sampel gum rosin. Iodium bereaksi dengan ikatan rangkap dalam sampel gum rosin. Jumlah ikatan rangkap dalam gum rosin menentukan seberapa banyak atom I yang dapat bereaksi. Selanjutnya penambahan KI akan memecah kembali ikatan iodin dengan gum rosin tersebut sehingga atom I yang sudah berikatan kembali terlepas dan membentuk senyawa I_2 , senyawa I_2 inilah yang dijadikan representasi jumlah ikatan rangkap melalui titrasi dengan $Na_2S_2O_3$. Gambar 4.5 merupakan reaksi yang terjadi pada pengujian bilangan iod.



Gambar 4.5 Reaksi bilangan iod

Bilangan iod yang dihasilkan berkisar antara 29-33 mg Iod/g bisa dilihat pada Tabel 4.2, bilangan iod tertinggi didapatkan pada variasi 2:1 dengan katalis 0,1% yaitu 32,101 mg Iod/g dan bilangan iod terendah didapatkan pada variasi 1:1 dengan katalis 0,2% yaitu 29,237 mg Iod/g. Dilihat dari data yang diperoleh pada Tabel 4.2, penambahan katalis PTSA yang ditambahkan pada reaksi berpengaruh pada tinggi rendahnya bilangan iod, semakin banyak katalis PTSA yang ditambahkan semakin tinggi bilangan iod yang dihasilkan. Gambar 4.6 merupakan grafik yang menunjukkan hasil pengujian bilangan iod pada produk FMRE.



Gambar 4.6 Grafik bilangan iod FMRE

4.3 Analisis senyawa gum rosin menggunakan *Gas Chromatograph-Mass Spectrometer* (GC-MS)

Gum rosin merupakan asam organik *alkyl tricyclic* tak jenuh yang berasal dari derivat alam. Komponen utama dari rosin atau gum rosin adalah asam abietat dan asam pimarit yang memiliki sifat amfipatik yaitu mempunyai gugus karboksil yang bersifat hidrofilik dan molekul *tricyclic* yang bersifat hidrofobik (Wiyono *et al.*, 2007). Gum rosin yang digunakan dalam penelitian ini merupakan gum rosin kualitas WW diperoleh dari *Perhutani Pine Chemical Industry* (PPCI) Pemalang Jawa Tengah yang dianalisis terlebih dahulu menggunakan *Gas Chromatograph-Mass Spectrometer* (GC-MS) untuk mengetahui komposisi penyusunnya.

Hasil analisis dengan menggunakan GC-MS diperoleh dua data yaitu kromatogram yang berasal dari hasil analisis kromatogram gas (GC) dan spektrum massa dari hasil analisis spektroskopi massa (MS). Kromatogram GC dari gum rosin menunjukkan 6 spektrum dengan waktu retensi yang berbeda-beda. Identifikasi komponen lebih lanjut dilakukan dengan spektrofotometer massa. Hasil spektrofotometer massa akan diperoleh spektrum massa dari masing-masing puncak yang terdeteksi pada kromatogram GC. Data dari analisis GC-MS ditunjukkan pada Tabel 4.3 didapatkan kandungan utama yaitu asam abietat, hasil kromatogram menunjukkan presentase area asam abietat sebesar 45,85% dengan waktu retensi 35,92. Berikut merupakan komponen-komponen penyusun gum rosin.

Tabel 4.3 Komponen penyusun gum rosin

Waktu retensi (menit)	Nama senyawa	Luas area (%)
35,09	Asam 1-fenatrenkarboksilat	0,76
35,16	Asam kaurnenoat	2,38
35,92	Asam abietat	45,85
36,10	Asam pimarat	6,10
36,69	Asam resin	39,46
36,90	Asam palustrat	5,43

Gum rosin mengandung 90% asam resin dan 10% komponen lainnya, kandungan asam karboksilat dalam gum rosin sebagian besar adalah asam karboksilat (Purnavita et al., 2017). Komponen utama dari gum rosin adalah asam abietat dan asam pimarat yang memiliki sifat amfipatik yaitu memiliki gugus karboksil yang bersifat hidrofilik dan molekul tricyclic yang bersifat hidrofobik (Khadafi, 2014).

4.4 Analisis Senyawa pada FMRE dengan *Gas Chromatograph-Mass Spectrometer* (GC-MS)

Gas Chromatography-Mass Spectrometer (GC-MS) merupakan gabungan dari kromatografi gas dan spektrometer massa. GC-MS adalah metode pemisahan senyawa organik dengan menggunakan dua metode analisis senyawa yaitu *Gas Chromatograph* (GC) untuk menganalisis jumlah senyawa secara kualitatif dan *Mass Spectrometer* (MS) untuk menganalisis struktur senyawa analit. Analisis GC-MS dilakukan untuk mengetahui senyawa-senyawa yang terkandung dalam produk hasil esterifikasi gum rosin dan kemungkinan struktur dari senyawa tersebut. Hasil GC-MS memperlihatkan beberapa senyawa yang terkandung dalam FMRE dengan kadar yang berbeda-beda. Puncak baru di waktu retensi yang berbeda diduga merupakan senyawa FMRE.

Reaksi esterifikasi pada penelitian ini dilakukan dengan berbagai variasi, yaitu perbandingan ratio mol antara gum rosin dan asam fumarat 1:1, 2:1, dan 3:1 dengan penambahan katalis PTSA sebesar 0,1%, 0,2%, dan 0,3% pada suhu 180 °C selama 4 jam, diawali dengan mencampurkan gum rosin dan asam fumarat, dipanaskan sampai suhu mencapai 100 °C setelah gum rosin dan asam fumarat meleleh dan keduanya tercampur kemudian ditambahkan katalis PTSA dan

gliserol sebanyak 12%. Reaksi esterifikasi gum rosin dengan gliserol tersebut bersifat bolak-balik (*reversible*) karena dikatalisis oleh asam. Katalis asam menyebabkan asam karboksilat mengalami konjugasi (Widiyarti dan Hananfi, 2010).

Hasil dari analisis GC-MS, senyawa yang diharapkan muncul dari hasil esterifikasi gum rosin adalah total senyawa ester yang terdapat pada produk hasil esterifikasi dan diikuti dengan komponen senyawa lainnya seperti asam abietat, asam isopimarat, asam dehidroabietat, dan asam pimarat. Total senyawa ester tertinggi adalah pada variasi perbandingan mol antara gum rosin : asam fumarat 1:1 dengan jumlah penambahan katalis sebanyak 0,2% yaitu 35,96%.

4.4.1 Sintesis FMRE variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 1 : 1 dengan katalis PTSA 0,1%

Tabel 4.4 Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 1:1 0,1%

Waktu retensi (menit)	Nama senyawa	Luas area (%)
33,86	Metil bisnorabietat	1,63
35,76	Dihidro abietat metil ester	5,73
36,39	Abietat metil ester	0,81
36,60	Pine rosin mixture	8,59
37,03	Asam fenantrenkarboksilat	30,31
37,68	Asam abietat	52,86

Analisis GC-MS senyawa hasil sintesis didapatkan beberapa puncak pada kromtogram GC. Puncak baru pada waktu retensi yang berbeda diduga senyawa hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol. Dari data GC-MS yang telah didapatkan, produk hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol dengan variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 1:1 dengan katalis PTSA 0,1% pada suhu 180 °C yang berlangsung selama 4 jam, didapatkan kandungan utama dari produk FMRE adalah asam resin. Hasil kromatogram menunjukkan bahwa presentase luas area komponen utama FMRE yaitu 52,86% asam abietat pada waktu retensi 37,68. Sedangkan total senyawa ester yang terbentuk dari hasil sintesis dengan total presentase luas area sebesar 17,21%. Hasil ester yang belum optimal dikarenakan waktu yang kurang lama dan suhu yang tidak stabil sehingga gum rosin dengan gliserol belum bereaksi sempurna

menyebabkan asam resin yang bereaksi dengan gliserol hanya sebagian saja. Komponen senyawa yang terkandung dalam produk FMRE dapat dilihat pada Tabel 4.4.

4.4.2 Sintesis FMRE variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 1 : 1 dengan katalis PTSA 0,2%

Analisis GC-MS senyawa hasil sintesis didapatkan beberapa puncak pada kromtogram GC. Puncak baru pada waktu retensi yang berbeda diduga senyawa hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol. Dari data GC-MS yang telah didapatkan, produk hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol dengan variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 1:1 dengan katalis PTSA 0,2% pada suhu 180 °C yang berlangsung selama 4 jam, didapatkan kandungan utama dari produk FMRE adalah asam resin. Hasil kromatogram menunjukkan bahwa presentase luas area komponen utama FMRE yaitu 39,90% asam abietat pada waktu retensi 36,75. Sedangkan total senyawa ester yang terbentuk dari hasil sintesis dengan total presentase luas area sebesar 35,96%. Dari hasil ester menunjukkan presentase luas area yang cukup tinggi hal ini dikarenakan suhu pada saat reaksi ini lebih stabil dibandingkan dengan suhu pada reaksi sebelumnya yang dapat mempengaruhi hasil ester. Komponen senyawa yang terkandung dalam produk FMRE dapat dilihat pada Tabel 4.5.

Tabel 4.5 Komponen senyawa hasil sintesis FMRE1:1 0,2%

Waktu retensi (menit)	Nama senyawa	Luas area (%)
33,87	Metil bisnorabietat	0,87
35,49	Pine rosin mixture	28,07
35,66	Dimetoksi 2 nitro metil ester	1,75
35,75	Isopropil metil ester	3,50
36,38	Abietat metil ester	0,65
36,75	Asam abietat	39,90
37,69	Asam fenantrenkarboksilat	24,10
39,00	Oksobisiklo metil ester	1,09

4.4.3 Sintesis FMRE variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 1 : 1 dengan katalis PTSA 0,3%

Analisis GC-MS senyawa hasil sintesis didapatkan beberapa puncak pada kromtogram GC. Puncak baru pada waktu retensi yang berbeda diduga senyawa hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol. Dari data GC-MS yang telah didapatkan, produk hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol dengan variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 1:1 dengan katalis PTSA 0,3% pada suhu 180 °C yang berlangsung selama 4 jam, didapatkan kandungan utama dari produk FMRE adalah asam resin. Hasil kromatogram menunjukkan bahwa presentase luas area komponen utama FMRE yaitu 56,40% asam abietat pada waktu retensi 37,68. Sedangkan total senyawa ester yang terbentuk dari hasil sintesis dengan total presentase luas area sebesar 8,56%. Hasil ester menunjukkan bahwa konsentrasi katalis mempengaruhi hasil reaksi. Katalis berfungsi untuk mempercepat suatu reaksi. Dalam reaksi ini konsentrasi katalis yang digunakan lebih banyak dibandingkan dengan reaksi sebelumnya. Komponen senyawa yang terkandung dalam produk FMRE dapat dilihat pada Tabel 4.6.

Tabel 4.6 Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 1:1 0,3%

Waktu retesnsi (menit)	Nama senyawa	Luas area (%)
33,49	Dimetil fenill etil ester	1,51
33,86	Metil bisnorabietat	1,51
35,66	Asam kaurnenoat	1,76
35,75	Dehidro abietat metil ester	3,52
36,08	Asam pimarcat	2,77
36,37	Abietat metil ester	2,01
36,50	Asam palustrat	4,53
36,59	Asam isopimarcat	4,53
37,03	Asam dehidroabietat	24,93
37,68	Asam abietat	56,40

4.4.4 Sintesis FMRE variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 2 : 1 dengan katalis PTSA 0,1%

Analisis GC-MS senyawa hasil sintesis didapatkan beberapa puncak pada kromtogram GC. Puncak baru pada waktu retensi yang berbeda diduga senyawa

hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol. Dari data GC-MS yang telah didapatkan, produk hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol dengan variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 2:1 dengan katalis PTSA 0,1% pada suhu 180 °C yang berlangsung selama 4 jam, didapatkan kandungan utama dari produk FMRE adalah asam resin. Hasil kromatogram menunjukkan bahwa presentase luas area komponen utama FMRE yaitu 54,82% asam abietat pada waktu retensi 37,67. Sedangkan total senyawa ester yang terbentuk dari hasil sintesis dengan total presentase luas area sebesar 12,94%. Hasil ester menunjukkan bahwa perbandingan ratio mol antara gum rosin dan asam fumarat berpengaruh terhadap hasil reaksi, semakin besar konsentrasi mol dari gum rosin maka hasil ester yang didapatkan semakin sedikit. Bisa dilihat dari hasil ester dari FMRE dengan perbandingan mol antar gum rosin : asam fumarat 1:1 yaitu 17,21% sedangkan perbandingan mol 2:1 didapatkan hasil ester yang lebih rendah yaitu 12,94%. Komponen senyawa yang terkandung dalam produk FMRE dapat dilihat pada Tabel 4.7.

Tabel 4.7 Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 2:1 0,1%

Waktu retensi (menit)	Nama senyawa	Luas area (%)
33,85	Metil bisnorabietat	1,10
35,64	Asam rosin	1,65
35,74	Dehidro abietat metil ester	3,58
36,07	Asam pimaric	4,68
36,37	Abietat metil ester	0,82
36,57	Pine rosin mixture	7,43
36,95	Asam dehidroabietat	11,84
37,01	fenantrena diol	14,04
37,67	Asam abietat	54,82

4.4.5 Sintesis FMRE variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 2 : 1 dengan katalis PTSA 0,2%

Analisis GC-MS senyawa hasil sintesis didapatkan beberapa puncak pada kromatogram GC. Puncak baru pada waktu retensi yang berbeda diduga senyawa hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol. Dari data GC-MS yang telah didapatkan, produk hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol dengan variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 2:1 dengan katalis

PTSA 0,2% pada suhu 180 °C yang berlangsung selama 4 jam, didapatkan kandungan utama dari produk FMRE adalah asam resin. Hasil kromatogram menunjukkan bahwa presentase luas area komponen utama FMRE yaitu 47,36% asam abietat pada waktu retensi 37,68. Sedangkan total senyawa ester yang terbentuk dari hasil sintesis dengan total presentase luas area sebesar 6,64%. Hasil ester yang rendah dikarenakan suhu yang tidak stabil. Komponen senyawa yang terkandung dalam produk FMRE dapat dilihat pada Tabel 4.8.

Tabel 4.8 Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 2:1 0,2%

Waktu retensi (menit)	Nama senyawa	Luas area%
35,29	Oksiranil metil ester	0,55
35,38	Fenil asetat	0,55
35,66	Dimetoksi nitrobenzoat metil ester	1,93
35,75	Dehidroabietat metil ester	3,60
35,93	Asam pimaric	2,21
36,38	Isopimaric metil ester	0,55
36,97	Asam fenantrenkarboksilat	33,70
37,22	Asam dehidroabietat	9,41
37,68	Asam abietat	47,36

4.4.6 Sintesis FMRE variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 2 : 1 dengan katalis PTSA 0,3%

Tabel 4.9 Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 2:1 0,3%

Waktu retensi (menit)	Nama senyawa	Luas area (%)
33,86	metil bisnorabietat	0,91
35,75	Asam dehidroabietat metil ester	3,18
36,37	Asam abietat metil ester	1,36
36,58	pine rosin mixture	12,30
36,83	Asam palustrat	0,91
37,02	Asam fenantrenkarboksilat	28,22
37,22	Asam kaurnenoat	7,06
37,68	Asam abietat	46,01

Analisis GC-MS senyawa hasil sintesis didapatkan beberapa puncak pada kromatogram GC. Puncak baru pada waktu retensi yang berbeda diduga senyawa hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol. Dari data GC-MS yang telah didapatkan, produk hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol dengan variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 2:1 dengan katalis PTSA 0,3% pada suhu 180 °C yang berlangsung selama 4 jam, didapatkan

kandungan utama dari produk FMRE adalah asam resin. Hasil kromatogram menunjukkan bahwa presentase luas area komponen utama FMRE yaitu 46,01% asam abietat pada waktu retensi 37,68. Sedangkan total senyawa ester yang terbentuk dari hasil sintesis dengan total presentase luas area sebesar 17,76%. Komponen senyawa yang terkandung dalam produk FMRE dapat dilihat pada Tabel 4.9.

4.4.7 Sintesis FMRE variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 3 : 1 dengan katalis PTSA 0,1%

Analisis GC-MS senyawa hasil sintesis didapatkan beberapa puncak pada kromatogram GC. Puncak baru pada waktu retensi yang berbeda diduga senyawa hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol. Dari data GC-MS yang telah didapatkan, produk hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol dengan variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 2:1 dengan katalis PTSA 0,1% pada suhu 180 °C yang berlangsung selama 4 jam, didapatkan kandungan utama dari produk FMRE adalah asam resin. Hasil kromatogram menunjukkan bahwa presentase luas area komponen utama FMRE yaitu 69,87% asam abietat pada waktu retensi 37,68. Sedangkan total senyawa ester yang terbentuk dari hasil sintesis dengan total presentase luas area sebesar 7,25%. Bisa dilihat dari hasil ester dari FMRE dengan perbandingan ratio mol antar gum rosin : asam fumarat 1:1 yaitu 17,21%, perbandingan ratio mol 2:1 yaitu 12,94% dan perbandingan ratio mol 3:1 yaitu 7,25%. Semakin besar mol gum rosin hasil ester cenderung semakin menurun. Komponen senyawa yang terkandung dalam produk FMRE dapat dilihat pada Tabel 4.10.

Tabel 4.10 Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 3:1 0,1%

Waktu retensi (menit)	Nama senyawa	Luas area (%)
33,86	Metil bisnorabietat	1,61
35,64	Pine rosin mixture	0,80
35,75	Dehidroabietat metil ester	3,49
36,08	Asam pimaric	2,68
36,38	Abietat metil ester	1,34
36,96	Asam fenantrenkarboksilat	26,87
37,68	Asam abietat	69,87

4.4.8 Sintesis FMRE variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 3 : 1 dengan katalis PTSA 0,2%

Analisis GC-MS senyawa hasil sintesis didapatkan beberapa puncak pada kromtogram GC. Puncak baru pada waktu retensi yang berbeda diduga senyawa hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol. Dari data GC-MS yang telah didapatkan, produk hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol dengan variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 2:1 dengan katalis PTSA 0,3% pada suhu 180 °C yang berlangsung selama 4 jam, didapatkan kandungan utama dari produk FMRE adalah asam resin. Hasil kromatogram menunjukkan bahwa presentase luas area komponen utama FMRE yaitu 64,71% asam abietat pada waktu retensi 37,71. Sedangkan total senyawa ester yang terbentuk dari hasil sintesis dengan total presentase luas area sebesar 13,52%. Komponen senyawa yang terkandung dalam produk FMRE dapat dilihat pada Tabel 4.11.

Tabel 4.11 Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 3:1 0,2%

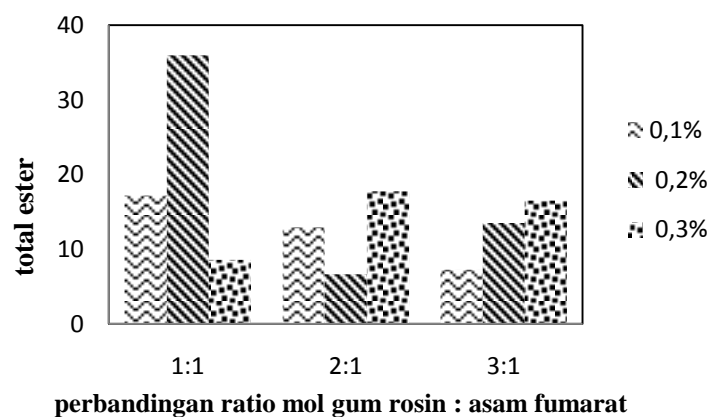
Waktu retensi (menit)	Nama senyawa	Luas area (%)
33,86	Metil bisnorabietat	1,06
35,75	Dehidroabietat metil ester	3,44
36,09	Pine rosin mixture	8,22
36,38	Isopropil metil ester	0,79
36,96	Asam fenantrenkarboksilat	21,74
37,71	Asam abietat	64,71

4.4.9 Sintesis FMRE variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 3 : 1 dengan katalis PTSA 0,3%

Tabel 4.12 Komponen senyawa hasil sintesis FMRE 3:1 0,3%

Waktu retensi (menit)	Nama senyawa	Luas area (%)
35,02	Oktanedioat dimetil ester	0,10
35,13	Asam kaurenoat	0,21
35,50	Asam iso pimarate	21,79
35,75	Dehidroabietat metil ester	2,53
36,38	Abieat metil ester	1,05
36,60	Pine rosin mixture	11,74
36,99	Asam fenantrenkarboksilat	15,86
37,23	Asam dehidroabietat	4,86
37,74	Asam abietat	39,34

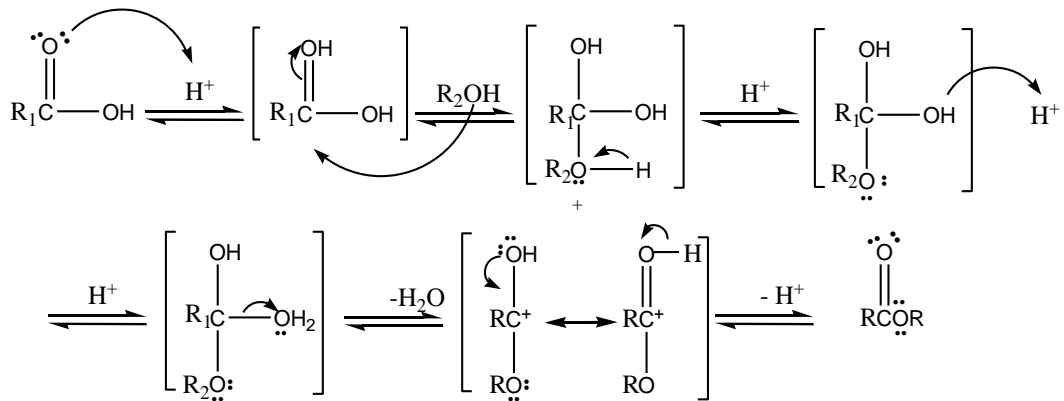
Analisis GC-MS senyawa hasil sintesis didapatkan beberapa puncak pada kromtogram GC. Puncak baru pada waktu retensi yang berbeda diduga senyawa hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol. Dari data GC-MS yang telah didapatkan, produk hasil sintesis dari gum rosin fumarat dengan gliserol dengan variasi perbandingan ratio mol antara gum rosin : asam fumarat 2:1 dengan katalis PTSA 0,3% pada suhu 180 °C yang berlangsung selama 4 jam, didapatkan kandungan utama dari produk FMRE adalah asam resin. Hasil kromatogram menunjukkan bahwa presentase luas area komponen utama FMRE yaitu 39,34% asam abietat pada waktu retensi 37,74. Sedangkan total senyawa ester yang terbentuk dari hasil sintesis dengan total presentase luas area sebesar 16,50%. Komponen senyawa yang terkandung dalam produk FMRE dapat dilihat pada Tabel 4.12.



Gambar 4.7 Grafik total ester FMRE

Gum rosin merupakan polimer alami dengan gugus karboksilat yang mudah mengkristal dan sulit mengering. Untuk meningkatkan kualitas gum rosin dapat dilakukan dengan modifikasi jenis asam karboksilat yaitu asam fumarat (Purnavita *et al.*, 2017). Berdasarkan Gambar 4.7 dapat dilihat bahwa total senyawa ester paling tinggi diperoleh dari perbandingan ratio mol antara gum rosin dan asam fumarat 1:1 dengan penambahan katalis sebanyak 0,2%. Hasil ester yang berbeda-beda dipengaruhi oleh suhu yang tidak stabil, total senyawa ester tertinggi diduga pada saat reaksi suhu stabil sehingga menghasilkan produk yang lebih banyak. Perbandingan ratio mol antara gum rosin dan asam fumarat

berpengaruh pada hasil reaksi, dari grafik diatas pada penambahan katalis 0,1% semakin banyak mol gum rosin yang ditambahkan semakin rendah senyawa ester yang dihasilkan. Gambar 4.8 merupakan reaksi umum asam karboksilat dengan gliserol dan Gambar 4.11 merupakan reaksi esterifikasi pembentukan FMRE.

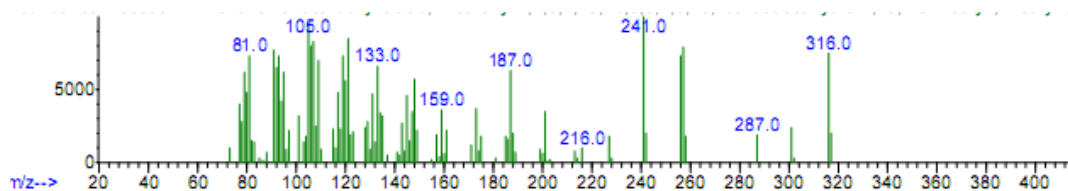


Gambar 4.8 Reaksi Esterifikasi gum rosin dengan gliserol

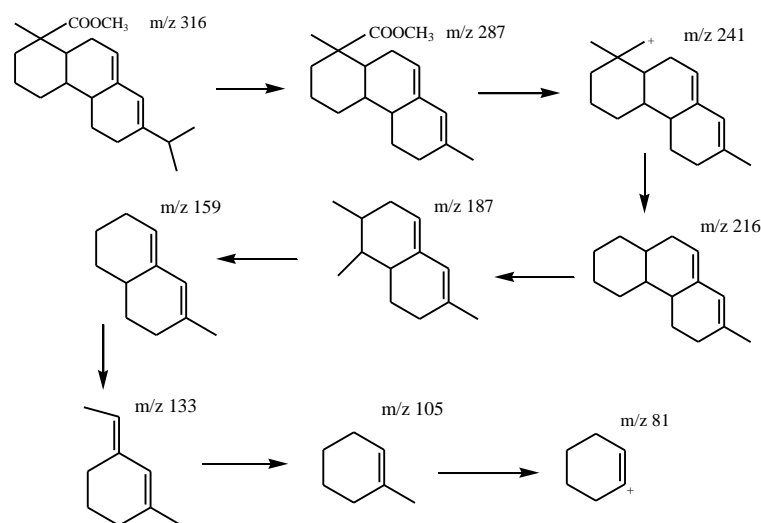
Keterangan :

R₁: alkil dari asam-asam resin gum rosin

R₂: gliserol

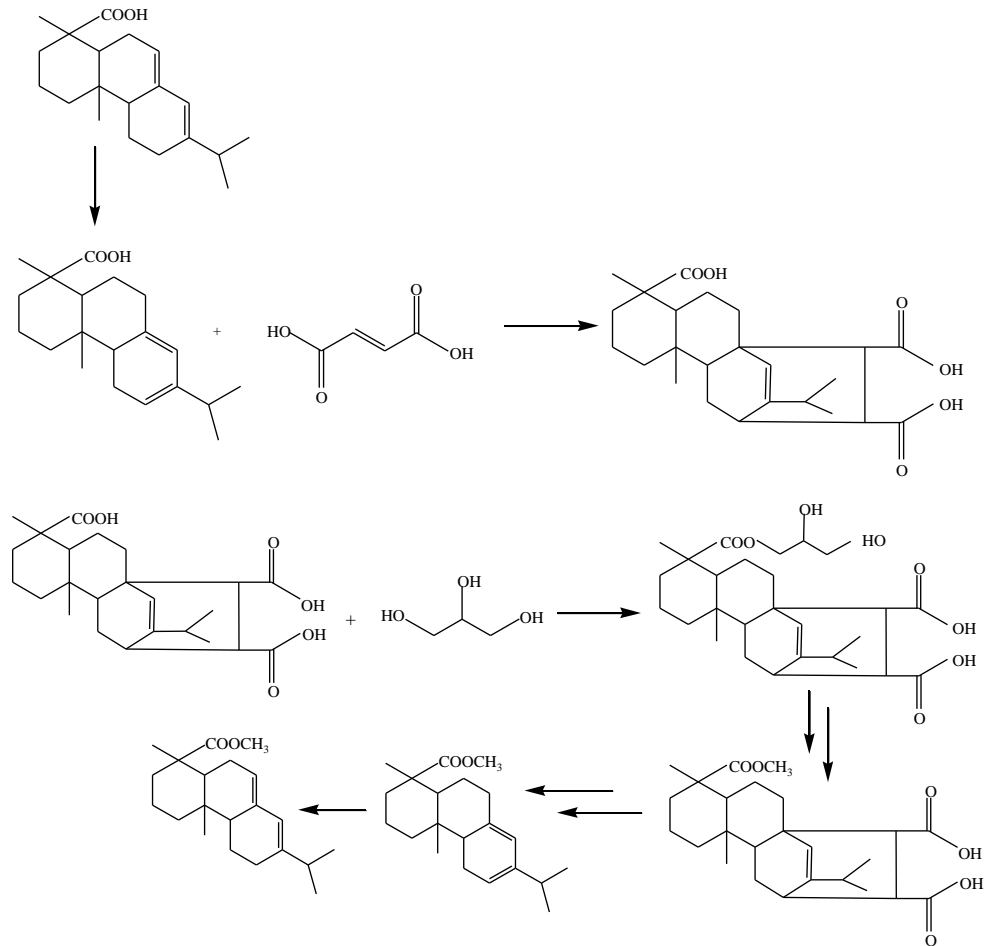


Gambar 4.9 Spektum abietat metil ester



Gambar 4.10 Pola fragmentasi abietat metil

Berdasarkan data library GC-MS pada Gambar 4.9 senyawa abietat metil ester mempunyai rumus molekul $C_{21}H_{32}O_2$ dengan berat molekul 316. Spektrum massa yang diperoleh, ion molekul dengan m/z 316 dengan puncak dasar m/z 241.



Gambar 4.11 Reaksi Esterifikasi FMRE

Tabel 4.13 *Yield* FMRE

Ratio mol	PTSA (%)	Gliserol (%)	Suhu (°C)	<i>Yield</i> FMRE (%)
1:1	0,1	12	180	17,22
1:1	0,2	12	180	35,98
1:1	0,3	12	180	8,56
2:1	0,1	12	180	12,95
2:1	0,2	12	180	6,64
2:1	0,3	12	180	17,77
3:1	0,1	12	180	7,25
3:1	0,2	12	180	13,53
3:1	0,3	12	180	16,51

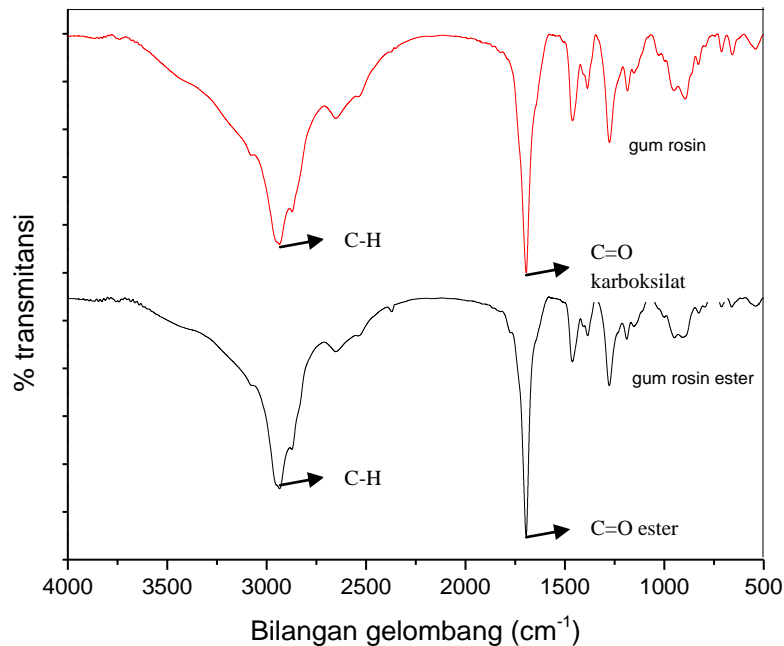
Hasil yang diperoleh dari GC-MS memberikan data yang disajikan pada Tabel 4.13. Data diatas menunjukkan presentase *yield* dari FMRE dari berbagai variasi ratio mol dan penambahan katalis. *Yield* tertinggi diperoleh dari perbandingan ratio mol antara gum rosin dan asam fumarat 1:1 dengan penambahan katalis 0,2% yaitu sebesar 35,98%, dan *yield* terendah diperoleh dari perbandingan ratio mol 2:1 dengan penambahan katalis 0,2% yaitu sebesar 6,64%. Sesuai dengan penelitian yang dilakukan Purnavita *et al.* (2017) *yield* terbesar dari perbandingan ratio 50:50 yaitu sebesar 72,28%, perbandingan ratio yang sama antara gum rosin dengan asam fumarat menghasilkan *yield* yang semakin meningkat.

Penambahan katalis juga berfungsi untuk menurunkan suhu reaksi, suhu reaksi untuk membentuk ester dengan menggunakan katalis dapat diturunkan dari 280 °C menjadi 180 °C. Reaksi esterifikasi pada suhu tinggi dapat memicu warna gelap pada produk FMRE akibat reaksi oksidasi dengan oksigen yang terkandung dalam udara dengan ikatan rangkap pada asam karboksilat gum rosin atau asam fumarat. Reaksi esterifikasi dibuat *adduct* dengan asam fumarat untuk melindungi gugus alkena tersebut agar reaksi lebih spesifik pada gugus karboksil dalam gum rosin. Gliserol berfungsi sebagai sumber gugus ester, juga berfungsi sebagai pelarut karena mempunyai titik didih lebih tinggi dibandingkan senyawa alkohol pada umumnya yaitu titik didihnya 290 °C. (Purnavita *et al.*, 2017).

4.5 Analisis Senyawa pada FMRE dengan *Fourier Transform Infrared (FTIR) Spectrophotometer*

FTIR digunakan mengidentifikasi gugus fungsi yang terkandung pada FMRE. FTIR merupakan salah satu instrumen yang menggunakan prinsip spektroskopi. Spektroskopi yang digunakan pada FTIR adalah spektroskopi inframerah yang dilengkapi dengan transformasi fourier untuk deteksi dan analisis spektrumnya (Anam *et al.*, 2007). Berdasarkan analisis FTIR hasil reaksi esterifikasi FMRE dibandingkan dengan hasil analisis gum rosin terdapat perbedaan pada puncak-puncak spektra, dapat dilihat pada Gambar 4.12. Dapat

diketahui bahwa dari perbandingan spektra FTIR antara gum rosin dengan produk FMRE ada sedikit perbedaan pada puncak-puncak spektra.



Gambar 4.12 Spektra FTIR gum rosin dan FMRE

Pita spektra FMRE ini dari OH hilang sedangkan absorpsi untuk ikatan C-H berada pada daerah bilangan gelombang dibawah 3000 cm^{-1} , absorpsi ikatan C=O terlihat pada bilangan gelombang 1740 cm^{-1} . Serapan puncak C=O yang muncul dimungkinkan adanya gugus ester dalam produk FMRE. Serapan C-O muncul pada 1277 cm^{-1} (ikatan C-O sangat bervariasi antara 1000 dan 1300 cm^{-1}), tergantung jenis senyawanya. Adanya serapan pada 899 cm^{-1} menunjukkan adanya ikatan C-C. Tidak adanya serapan pada $3000-3100\text{ cm}^{-1}$ menunjukkan tidak ada ikatan rangkap C-H. Pada pita spektra gum rosin ada perbedaan dengan FMRE pada bilangan gelombang 909 cm^{-1} bilangan gelombang bergeser ke kanan pada produk FMRE yang menunjukkan ikatan C-C dan juga pada bilangan gelombang 1740 cm^{-1} sedangkan puncak yang menunjukkan ikatan C-H menunjukkan adanya perbedaan, pada FMRE menunjukkan bilangan gelombang $2936,25\text{ cm}^{-1}$ dan pada gum rosin menunjukkan bilangan gelombang $2938,5\text{ cm}^{-1}$.

BAB V

PENUTUP

5.1 Simpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan diperoleh beberapa kesimpulan, antara lain :

1. Perbandingan ratio mol optimal untuk menghasilkan produk FMRE adalah 1:1 , hal ini menunjukkan bahwa semakin besar mol gum rosin hasil ester cenderung semakin menurun. Total ester terbesar yang diperoleh adalah pada perbandingan ratio mol 1:1 yaitu sebesar 35,96%.
2. Pengaruh penambahan katalis dapat meningkatkan produk FMRE, dapat dilihat dari data GC-MS pada perbandingan 3:1 semakin banyak katalis yang ditambahkan maka semakin banyak produk yang dihasilkan. Namun pada perbandingan ratio mol 1:1 dan 2:1 penambahan katalis tidak begitu berpengaruh, pada data GC-MS presentase total senyawa ester yang naik turun dari penambahan katalis 0,1% sampai 0,3%, hal ini dikarenakan suhu yang tidak stabil.
3. Berdasarkan data pada analisis fisiko kimia pada produk FMRE menunjukkan bahwa kualitas produk telah meningkat dari gum rosin non modifikasi.

5.2 Saran

Berdasarkan hasil dan simpulan yang diperoleh maka saran yang dapat diberikan adalah melakukan proses *bleaching* atau pemucatan pada produk FMRE sehingga dapat memperoleh warna yang lebih terang atau pucat.

DAFTAR PUSTAKA

- Anam, C., Sirojudin, dan Firdausi, K. S. 2007. Analisis Gugus Fungsi pada Sampel Uji, Bensin, dan Spiritus Menggunakan Metode Spektroskopi FTIR. *Berkala Fisika*, 10(1):79–85.
- Atun, S. dan Fadliyani, N. 2015. Pemanfaatan Gliserol Hasil Samping Pembuatan Biodiesel dari Minyak Jelantah sebagai Bahan Sintesis Gliserol Asetat. *Jurnal Penelitian Saintek*. 20(2)
- Bina. 2012. Perhutani Menuju Era Getah Bersih. *Media Berita Kehutanan dan Lingkungan*. 23.
- Bina. 2014. PPCL Ekspor Perdana Produk Alphapinene ke India. *Media Berita Kehutanan dan Lingkungan*. 1.
- Boer, E., dan Ella, A, B. 2001. Plant Resources of South-East Asia No. 18. *Plants Producing Exudates*. Bogor: Prosea
- Chartfield. H. W. 1947. *Varnish Constituents*. London : Leonard Hill Limited 17 Stratford Place W.
- Daryono, E. D., 2015. Sintesis α -Pinene menjadi α -Terpineol menggunakan Katalis H_2SO_4 dengan Variasi Suhu Reaksi dan Volume Etanol. *Jurnal Teknik Kimia USU*. 4(2).
- Ding, Y., Li, S., Dou, C., Yu, Y., Huang, H. 2011. Production of Fumaric Acid by *Rhizopus oryzae*: Role of Carbon-Nitrogen Ratio. *Applied Biochemistry Biotechnology*. 164:1461-1467
- Fachrodji, A. 2009. *The Current Situation of Indonesia Gum Rosin*. www.perhutaniproducts.com. Diakses pada tanggal 7 Januari 2019
- Fatimah . 2013. *Adsorpsi dan Katalisis Menggunakan Material Berbasis Clay*. Yogyakarta : Graha Ilmu
- Fessenden, R.J, J.S Fessenden. 1997. *Dasar-Dasar Kimia Organik*. Jakarta: Binarupa Aksara
- Hani, A. 2009. Pengembangan tanaman penghasil hutan bukan kayu melalui perbanyak vegetatif. *Jurnal Tekno Hutan Tanaman*. 2(2).83-92.
- Harold, H. 1990. *Kimia Organik*. Jakarta : Erlangga.
- Hidayat J, Hansen CP. 2001. *Informasi Singkat Benih: Pinus merkusii*. Jakarta :DirektoratPerbenihan Tanaman Hutan Departemen Kehutanan RI.

- Ilica, R. A., Kloetzer, L., Galaction, A. I. dan Cascava. 2018. Fumaric acid: production and separation. *Biotechnol Lett.* <https://doi.org/10.1007/s10529-018-2628-y>
- Jindal, R., Sharma, R., Maiti, M., Kaur, A., Sharma, P., Mishra, V., Jana, A.K. 2017. Synthesis and Characterization of Novel Reduced Gum rosin-acrylamide Copolymer-based Nanogel and Their Investigation for Antivacterial Activity. *Polymer Bull.* 74:2995-3014
- Kaith, B.S., Jindal, R., dan Sharma, R. 2016. Study of Ionic Charge Dependent Salt Resistant Swelling Behavior and Removal of Colloidal Particles Using Reduced Gum Rosin-poly(acrylamide)-based Green Flocculant. *Iran Polymer Journal.* 25:349-362
- Kasmudjo. 2010. *Teknologi hasil hutan Yogyakarta*: Cakrawala Media.
- Karlberg, A. T. dan Hagvall, L. 2018. *Colophony: Rosin in Unmodified and Modified Form.* Sweden :University of Gothenburg
- Khadafi, M., Rostika, I., dan Hidayat, T. 2014. Pengolahan Gondorukem Menjadi Bahan Pendarohan sebagai Aditif pada Pembuatan Kertas. *Jurnal Selulosa.* Vol 04(1). 17-24.
- Kirk, R. E. dan Othmer, D. F. 2007. *Rosin dan Rosin Derivate.* Encyclopedia of Chemical Technology. Volume ke21. New York : The Interscience Encyclopedia. Inc.
- Kutsek, G.J. penemu. 2005. *Inhibition of Rosin Crystalization.* United States Patent No 6.939.944.
- Lempang, M. 2017. Studi Penyesuaian Getah Pinus Cara Bor dengan Stimulan H₂SO₄. *Jurnal Penelitian Hasil Hutan.* 35 (3). 221-230
- Liu, Jia-Ling., Xiongmin Liu., Wei-Guang Li., Li Ma., Fang Shen. 2014. Kinetics of Gum rosin Oxidation Under 365 nm Ultraviolet Irradiation. *Monatsh Chemistry.* 145:209-212
- Liu, P., Liu, X., Kubota, S., Huang, P., Wada, Y. 2019. Thermal Oxidation Process and Characterization of Abietic Acid and Gum Rosin by Accelerating Rate Calorimeter (ARC). *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry.* 138:479-488
- Liu, Y., Song, J., Tan, T., Liu, L. 2015. Production of Fumaric Acid from L-Malic Acid by Solvent Engineering Using a Recombinant Thermostable Fumarase from *Thermus thermophilus* HB8. *Applied Biochemistry Biotechnology.* 175:2823-2831

- Martawijaya A, Kartasujana I, Kadir K, Pawira SA. 2005. *Atlas Kayu Indonesia Jilid II*. Bogor :Balai Penelitian Hasil Hutan Badan Penelitian dan PengembanganPertanian.
- Mousavi, M. R., Maghsoodlou, M. T. 2014. Catalytic System Containing p-Toluenesulfonic Acid Monohydrate Catalyzed The Synthesis of Triazoloquinazolinone and Benzimidazoquinazolinone Derivatives. *Monatsh Chemistry*. 145:1967-1973
- Moyers, B. 1989. *Compositional Differences and Variation in Gondorukem*. Wilmington : Hercules Incorporated Research Center.
- Orwa C, Mutua A, Kindt R, Jamnadass R, Simons A. 2009. *Pinus merkusi. Agroforestry database : a tree reference and selection guide version 4.0*. [terhubung berkala]. <http://www.worldagroforestry.org/af/treedb/>. Diakses pada tanggal 7 Januari 2019.
- Perhutani. 2011. Upaya Meningkatkan Produktivitas Getah Pinus menggunakan Bahan yang Ramah Lingkungan. Diakses dari <http://www.Kphcianjur.perumperhutani.com> pada tanggal 5 Januari 2019.
- Perum Perhutani. 2012. *Perhutani sadap getah pinus di hutan Bali*. <http://perumperhutani.com/2012/04/perhutani-sadap-getah-pinus-di-hutan-bali>. Diakses pada tanggal 7 Januari 2019
- Podgórska, E., Kasprzak, M., and Szwajgier, D. 2004. Fumaric Acid Production By *Rhizopus Nigricans* And *Rhizopus Oryzae* Using Apple Juice. *Pol. Journal Food Nutri Science*. 13(1). 47–50
- Prasetyo, A. E., Widhi, A., dan Widayat. 2012. Potensi Gliserol dalam Pembuatan Turunan Gliserol melalui Proses Esterifikasi. *Jurnal Ilmu Lingkungan*. Vol 10 (1). 26-31.
- Purnami, W. I.N.G., K, Veronika. 2015. Pengaruh Penggunaan Katalis Terhadap Laju dan Efisiensi Pembentukan Hidrogen. *Jurnal Rekayasa Mesin*. 6(1): 51-59.
- Purnavita, S., Susanti S., dan Sudrajat, R. W. 2017. Formulasi Vernis Poliester Berbasis Gum Rosin-Asam Laktat dan Gliserol dengan Katalis SnCl₂. *Jurnal Teknik Kimia*. 2(1). 49-53
- Rodrigues-Corrêa, K. C. S. Apel, M. A. Henriques, A. T. dan Fett-Neto, A. G. 2011. Efficient Oleoresin Biomass Production in Pines Using Low Cost Metal Containing Stimulant Paste. *Journal of Biomass and Bioenergy*. 35(10)

- Rodrigues-Corrêa, K. C. S., Apel, M. A., Henriques, A. T., & Fett-Neto, A. G. 2011. Efficient oleoresin biomass production in pines using low cost metal containing stimulant paste. *Biomass and Bioenergy*. 35(10). 4442-4448.
- Rodrigues-Corrêa, K. C. S. Lima, J . C. dan Fett-Neto, A. G. 2017. *Pine oleoresin: Tapping Green Chemicals, Biofuels, Food Protection, and Carbon Sequestration from Multi-purpose Trees*. Diakses dari <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/fes3.13/full>. pada tanggal 5 Januari 2019.
- Standar Nasional Indonesia. 2011. *Gum Rosin*. Jakarta : Standar Nasional Indonesia 7636 : 2011.
- Satil, F. Selvi, S. dan Polat, R. 2011. Ethnic Uses of Pine Resin Production from Pinus brutia by Native People on The Kazdag Mountain (Mt. Ida) in Western Turkey. *Journal of Food Agriculture & Environment*. 9(3).1059-1063.
- Sharma, K. dan Lecha, C. 2013. Tapping of Pinus ruxburghii (Chir Pine) for Oleoresin in Himachal Pradesh, India. *Advances in Forestry Letters (AFL)*.2(3).53-57.
- Silberberg, M. S. 2008. *Principle of General Chemistry*. Mc. Graw Hill Inc.
- Silitonga, T, Suwardi, S dan Sutarna, N. 1973. *Pengolahan dan Pengawasan Kualitas Gum Rosin dan Terpentin*. Laporan : 9. Bogor : Lembaga Penelitian Hasil Hutan.
- Siregar, EBMS. 2005. *Pemuliaan Pinus merkusii*. Medan : Universitas Sumatera Utara.
- Solomons, T. W. G dan Fryhle C. B. 2011. *Organic Chemistry*, 10th ed. New Jersey : John Wiley & Sons, Inc.
- Suhendang E. 1990. Hubungan Antara Dimensi Tegakan Hutan Tanaman dengan Faktor Tempat Tumbuh dan Tindakan Silvikultur pada Hutan Tanaman Pinus merkusii Jungh. et de vriese di Pulau Jawa .*Disertasi*. Bogor: Program Pascasarjana, Institut Pertanian Bogor.
- Sukadaryati. 2014. Pemanenan Getah Pinus menggunakan Tiga Cara Penjadapan. *Jurnal Penelitian Hasil Hutan*. 32(1). 62-70
- Sukarno, A., Hardianto, E. B. Marsoem, S. N. dan Na'iem, M. 2015. Oleoresin Production, Turpentine Yield and Components of Pinus merkusii from Various Indonesia Provenances. *Journal of Tropical Forest Science*. 27(1). 38-42

- Sun, Z., Duan, X., Tao, M., Wang, X., Zou, D. 2016. Design of a Highly Efficient Indium-Exchanged Heteropolytungstic Acid for Glycerol Esterification with Acetic Acid. *Catalysis Surveys from Asia*. 20:82-90
- Sutanti, S., Purnavita, S., Sriyana, H. Y. 2017. Pembuatan Vernis Berbahan Gondorukem yang Dimodifikasi Gliserol dan Paduan Linseed Oil dengan Minyak Biji Karet menggunakan Metode Esterifikasi tanpa Katalis. *Jurnal Inovasi Teknik Kimia*. Vol. 2(1). 54 - 59
- Waluyo, T. W., Wahyudi, I., dan Santoso, G. 2012. Pengaruh Metode dan Arah Sadap terhadap Produksi Getah Jelutung Hutan Tanaman Industri. *Jurnal Penelitian Hasil Hutan*. 30(4). 301-313
- Wang, L., Ding, S., Gan, P., Chen, X., Zang, D., Wei, X., Wang, X. 2016. A Supported Nano ZnO Catalyst Based on a Spent Fluid Cracking Catalyst (FC3R) for The Heterogeneous Esterification of Rosin. *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis*. 119:219-233
- Widiyarti G dan Hanafi M. 2008. Pengaruh Konsentrasi Katalis dan Perbandingan molaritas reaktan pada sintesis senyawa monolaurin. *Jurnal Reaktor*. 12 (2): 90-97
- Wiyono, B., Tachibana, S., dan Tinambunan, D. 2007. Reaction of Abietic Acid with Maleic Anhydride and Fumaric Acid and Attempts to Find The Fundamental Component of Fortified Rosin. *Pakistan Journal of Biological Sciences*. 10(10). 1588-1595.
- Yurida, M., Afriani, E., dan Susila Arita R. 2013. Pengaruh Kandungan CaO dari Jenis Adsorben Semen terhadap Kemurnian Gliserol. *Jurnal Teknik Kimia*. 19(2).
- Zhen, M.I., Xiao-an, NIE., Yi-geng, WANG., Xia, Chang., Gul-fu, LIN. 2013. Study on Synthesis and Performance of Rosin-Derived Polyamide as Epoxy Curing Agent. *Journal of Forest Products & Industry*. 2(2). 5-11 ISSN: 2325—4513.
- Zhu, Y., Zhang, S., Geng, Z., Wang, D., Liu, F., Zhang, M., Bian, H., and Xu, W. 2014. Analysis of abietic acid and dehydroabietic acid residues in raw ducks and cooked ducks. *Poultry Science*. 93 :2663–2667

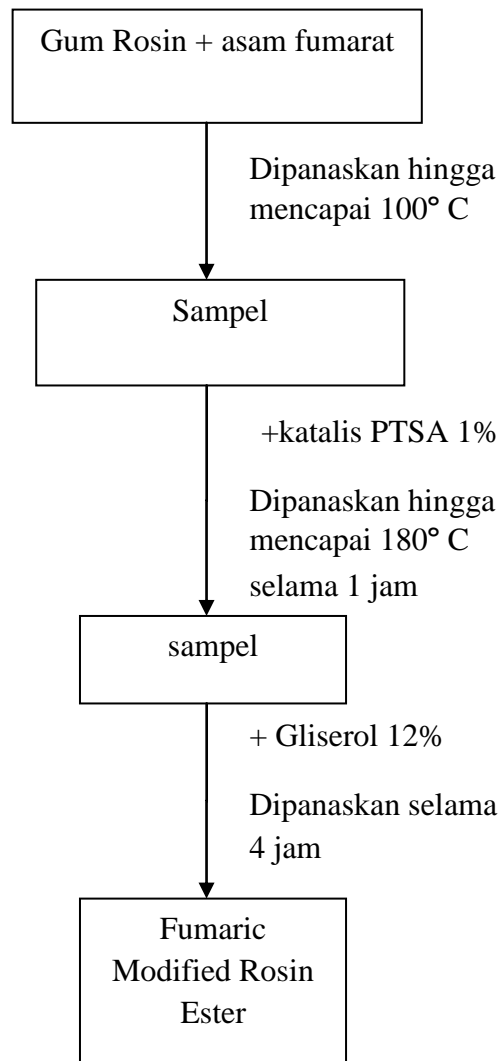
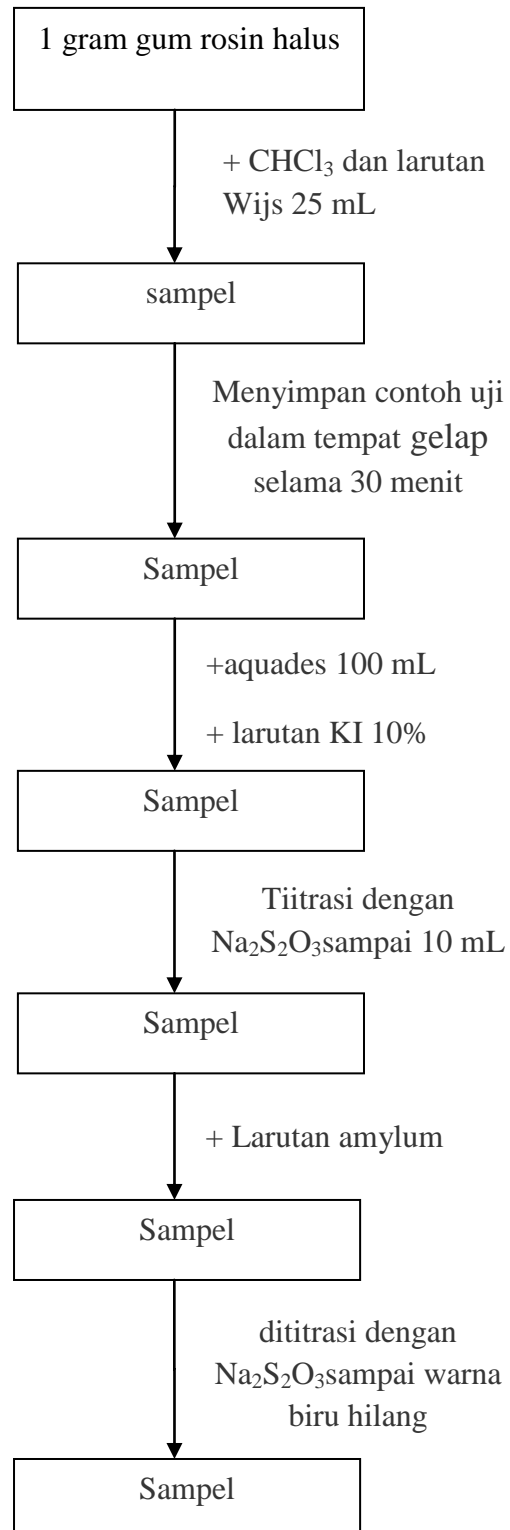
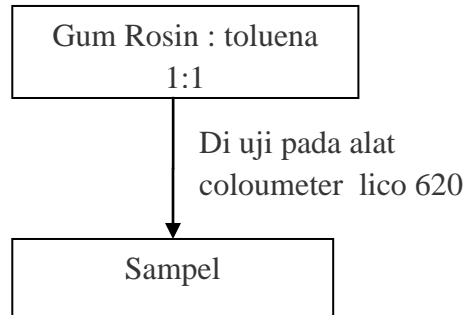
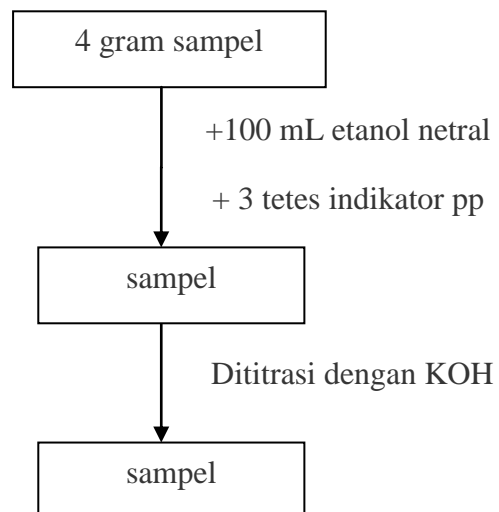
LAMPIRAN**Lampiran 1. Digram Kerja Penelitian****Esterifikasi FMRE**

Diagram uji bilangan Iod

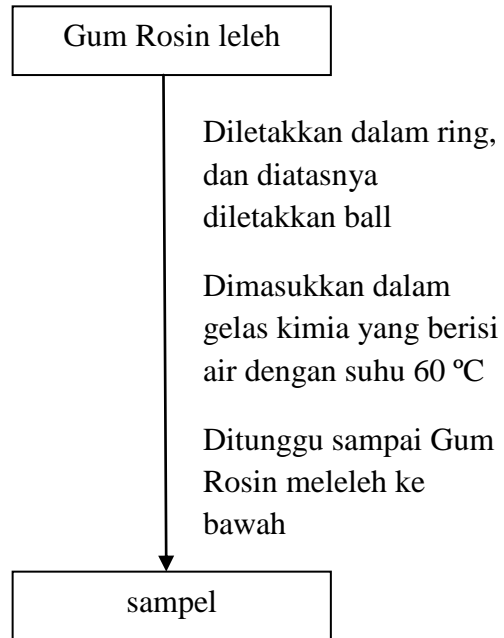
Uji Warna



Uji Bilangan Asam



Uji Titik Lunak



Lampiran 2. Perhitungan penggunaan bahan

1. Perhitunga penggunaan gum rosin dan asam fumarat

$$\text{Mr gum rosin} = 302$$

$$\text{Mr asam fumarat} = 117$$

$$1 \text{ mol gum rosin} = \frac{\text{gram}}{\text{Mr}}$$

$$= \frac{\text{gram}}{302}$$

$$\text{gram} = 302$$

$$1 \text{ mol gum rosin} = 302 \text{ g}$$

Dalam penelitian ini akan digunakan gum gosin sebanyak 150 g

$$150 \text{ g gum rosin} \approx 1 \text{ mol gum rosin}$$

$$1 \text{ mol asam fumarat} = \frac{117}{302} \times 150 = 58,112 \text{ g}$$

Perbandingan ratio mol gum rosin : asam fumarat

$$1 : 1$$

$$150 \text{ g} : 58,112 \text{ g}$$

Perbandingan ratio mol gum rosin : asam fumarat

$$2 : 1$$

$$150 \text{ g} : 29,06 \text{ g}$$

Perbandingan ratio mol gum rosin : asam fumarat

$$3 : 1$$

$$150 \text{ g} : 19,37 \text{ g}$$

2. Perhitungan katalis PTSA 1% , 2%, 3%

Penggunaan 1% katalis PTSA adalah 1% dari berat gum rosin yaitu 150 g

$$\frac{1}{100} \times 150 \text{ g} = 1,5 \text{ g}$$

$$\frac{2}{100} \times 150 \text{ g} = 3 \text{ g}$$

$$\frac{3}{100} \times 150 \text{ g} = 4,5 \text{ g}$$

Lampiran 3. Perhitungan uji fisiko kimia

Nama	Warna	Titik lunak	Bilangan asam	Bilangan iod
			W = 4,0104 g	W = 1,0093 g
1:1 0,1%	11,4	83	V = 26,1 mL	V 1 = 12,3 mL
				V 2 = 36 mL
			W = 4,0199 g	W = 1,0110 g
1:1 0,2%	11,2	83	V = 26,2 mL	V 1 = 13,9 mL
				V 2 = 36 mL
			W = 4,0173 g	W = 1,0119 g
1:1 0,3%	11,5	81	V = 26,4 mL	V 1 = 12,8 mL
				V 2 = 36 mL
			W = 4,0115 g	W = 1,0083 g
2:1 0,2%	11,9	82	V = 25,6 mL	V 1 = 11,8 mL
				V 2 = 36 mL
			W = 4,0255 g	W = 1,0144 g
2:1 0,2%	17,4	81,5	V = 24,9 mL	V 1 = 13,2 mL
				V 2 = 36 mL
			W = 4,0225 g	W = 1,0143 g
2:1 0,3%	11,7	82,5	V = 25,9 mL	V 1 = 13 mL
				V 2 = 36 mL
			W = 4,0010 g	W = 1,0046 g
3:1 0,1%	11,9	79,5	V = 24,7 mL	V 1 = 11,8 mL
				V 2 = 36 mL
			W = 4,0078 g	W = 1,0073 g
3:1 0,2%	11,6	81	V = 24,2 mL	V 1 = 11,4 mL
				V 2 = 36 mL
			W = 4,0134	W = 1,0016 g
3:1 0,3%	12	82	V = 24,8 mL	V 1 = 12,2 mL
				V 2 = 36 mL
			W = 4,0202 g	W = 1,0053
Gum rosin	6,6	78	V = 27 mL	V 1 = 12,2 mL
				V 2 = 36 mL

1. Gum rosin

a. Pengujian bilangan asam

$$AV = \frac{V \times N \text{ KOH} \times 56,11}{m \text{ sampel}}$$

$$= \frac{27 \times 0,5025 \times 56,11}{4,0202}$$

$$= 189,361$$

b. Pengujian bilangan iod

$$IV = \frac{(V_2 - V_1) \times N \text{ Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \times 12,69}{m \text{ sampel}}$$

$$= \frac{(36 - 157,8) \times 0,1054 \times 12,69}{1,0053}$$

$$= 24,214$$

2. 1:1 0,1 %

a. Pengujian bilangan asam

$$AV = \frac{V \times N \text{ KOH} \times 56,11}{m \text{ sampel}}$$

$$= \frac{26,1 \times 0,5025 \times 56,11}{4,0104}$$

$$= 183,497$$

b. Pengujian bilangan iod

$$IV = \frac{(V_2 - V_1) \times N \text{ Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \times 12,69}{m \text{ sampel}}$$

$$= \frac{(36 - 12,3) \times 0,1054 \times 12,69}{1,0093}$$

$$= 31,407$$

3. 1:1 0,2%

a. Pengujian bilangan asam

$$AV = \frac{V \times N \text{ KOH} \times 56,11}{m \text{ sampel}}$$

$$= \frac{26,2 \times 0,5025 \times 56,11}{4,0199}$$

$$= 183,764$$

b. Pengujian bilangan iod

$$\begin{aligned} \text{IV} &= \frac{(V_2 - V_1) \times N \text{ Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \times 12,69}{m \text{ sampel}} \\ &= \frac{(36 - 13,9) \times 0,1054 \times 12,69}{1,0110} \\ &= 29,237 \end{aligned}$$

4. 1:1 0,3%

a. Pengujian bilangan asam

$$\begin{aligned} \text{AV} &= \frac{V \times N \text{ KOH} \times 56,11}{m \text{ sampel}} \\ &= \frac{26,4 \times 0,5025 \times 56,11}{4,0173} \\ &= 185,287 \end{aligned}$$

b. Pengujian bilangan iod

$$\begin{aligned} \text{IV} &= \frac{(V_2 - V_1) \times N \text{ Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \times 12,69}{m \text{ sampel}} \\ &= \frac{(36 - 12,8) \times 0,1054 \times 12,69}{1,0119} \\ &= 30,665 \end{aligned}$$

5. 2:1 0,1%

a. Pengujian bilangan asam

$$\begin{aligned} \text{AV} &= \frac{V \times N \text{ KOH} \times 56,11}{m \text{ sampel}} \\ &= \frac{25,6 \times 0,5025 \times 56,11}{4,0115} \\ &= 179,932 \end{aligned}$$

b. Pengujian bilangan iod

$$\begin{aligned} \text{IV} &= \frac{(V_2 - V_1) \times N \text{ Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \times 12,69}{m \text{ sampel}} \\ &= \frac{(36 - 11,8) \times 0,1054 \times 12,69}{1,0083} \\ &= 32,101 \end{aligned}$$

6. 2:1 0,2%

a. Pengujian bilangan asam

$$\begin{aligned} AV &= \frac{V \times N \text{ KOH} \times 56,11}{m \text{ sampel}} \\ &= \frac{24,9 \times 0,5025 \times 56,11}{4,0225} \\ &= 174,403 \end{aligned}$$

b. Pengujian bilangan iod

$$\begin{aligned} IV &= \frac{(V_2 - V_1) \times N \text{ Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \times 12,69}{m \text{ sampel}} \\ &= \frac{(36 - 13,2) \times 0,1054 \times 12,69}{1,0083} \\ &= 30,062 \end{aligned}$$

7. 2:1 0,3%

a. Pengujian bilangan asam

$$\begin{aligned} AV &= \frac{V \times N \text{ KOH} \times 56,11}{m \text{ sampel}} \\ &= \frac{25,9 \times 0,5025 \times 56,11}{4,0255} \\ &= 181,407 \end{aligned}$$

b. Pengujian bilangan iod

$$\begin{aligned} IV &= \frac{(V_2 - V_1) \times N \text{ Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \times 12,69}{m \text{ sampel}} \\ &= \frac{(36 - 13) \times 0,1054 \times 12,69}{1,0083} \\ &= 30,329 \end{aligned}$$

8. 3:1 0,1%

a. Pengujian bilangan asam

$$\begin{aligned} AV &= \frac{V \times N \text{ KOH} \times 56,11}{m \text{ sampel}} \\ &= \frac{24,7 \times 0,5025 \times 56,11}{4,0010} \\ &= 174,062 \end{aligned}$$

b. Pengujian bilangan iod

$$\begin{aligned} \text{IV} &= \frac{(V_2 - V_1) \times N \text{ Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \times 12,69}{m \text{ sampel}} \\ &= \frac{(36 - 11,8) \times 0,1054 \times 12,69}{1,0046} \\ &= 32,219 \end{aligned}$$

9. 3:1 0,2%

a. Pengujian bilangan asam

$$\begin{aligned} \text{AV} &= \frac{V \times N \text{ KOH} \times 56,11}{m \text{ sampel}} \\ &= \frac{24,2 \times 0,5025 \times 56,11}{4,0078} \\ &= 170,249 \end{aligned}$$

b. Pengujian bilangan iod

$$\begin{aligned} \text{IV} &= \frac{(V_2 - V_1) \times N \text{ Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \times 12,69}{m \text{ sampel}} \\ &= \frac{(36 - 11,4) \times 0,1054 \times 12,69}{1,0073} \\ &= 32,664 \end{aligned}$$

10. 3:1 0,3%

a. Pengujian bilangan asam

$$\begin{aligned} \text{AV} &= \frac{V \times N \text{ KOH} \times 56,11}{m \text{ sampel}} \\ &= \frac{24,8 \times 0,5025 \times 56,11}{4,0134} \\ &= 174,227 \end{aligned}$$

b. Pengujian bilangan iod

$$\begin{aligned} \text{IV} &= \frac{(V_2 - V_1) \times N \text{ Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \times 12,69}{m \text{ sampel}} \\ &= \frac{(36 - 12,2) \times 0,1054 \times 12,69}{1,0016} \\ &= 31,782 \end{aligned}$$

Lampiran 4. Presentase Yield FMRE

Tabel Presentase Yield FMRE

Ratio mol	PTSA (%)	Gliserol (%)	Suhu (°C)	% luas area asam-asam resin	% area ester	Yield (%)
1:1	0,1	12	180	99,92	17,21	17,22
1:1	0,2	12	180	99,92	35,96	35,98
1:1	0,3	12	180	99,92	8,56	8,56
2:1	0,1	12	180	99,92	12,94	12,95
2:1	0,2	12	180	99,92	6,64	6,64
2:1	0,3	12	180	99,92	17,76	17,77
3:1	0,1	12	180	99,92	7,25	7,25
3:1	0,2	12	180	99,92	13,52	13,53
3:1	0,3	12	180	99,92	16,50	16,51

$$\text{Yield} = \frac{\% \text{ produk}}{\% \text{ bahan baku}} \times 100\%$$

Lampiran 5. Analisis FTIR

PerkinElmer Spectrum Version 10.4.00
Wednesday, November 27, 2019 1:21 PM

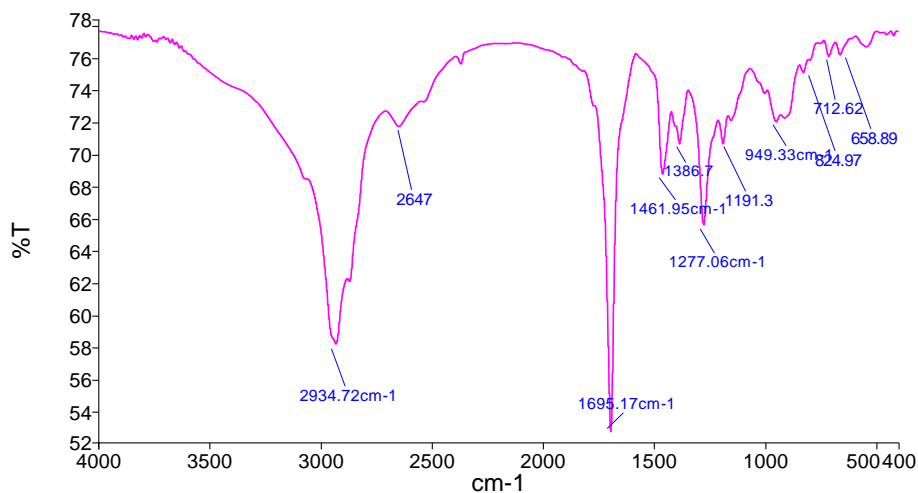
Report Details

Report Location C:\pel_data\reports\Samples View 1_failla 1_1_1_1.rtf
Report Creator Labkim
Report Date Wednesday, November 27, 2019 1:21 PM

Sample Details

Sample Name faila 1_1_1
Sample Description faila 2:1 0.2%
Analyst Labkim
Creation Date 11/27/2019 1:19:53 PM
X-Axis Units cm-1
Y-Axis Units %T

Spectrum



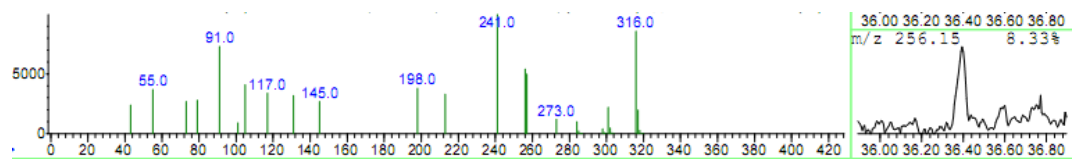
Name	Description
faila 1_1_1	faila 2:1 0.2%

Peak Area/Height Results

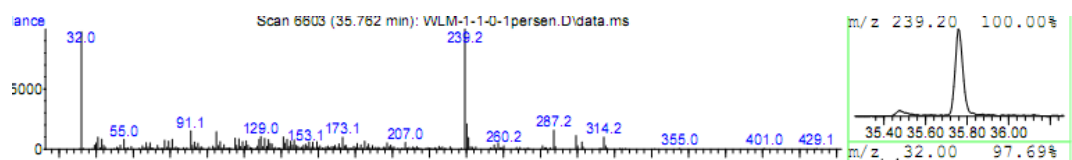
Peak	X (cm-1)	Y (%T)	Area (%T)	Start	End	Base1
1	2934.72	58.23	-8369.16	4000	2120.13	4000
2	1695.17	52.74	-1846.57	2120.13	1582	2120.13
3	1461.95	68.87	-746.32	1582	1346.42	1582
4	1277.06	65.67	-627.61	1346.42	1068.57	1346.42
5	949.33	72.14	289.38	1068.57	400	1068.57

Lampiran 6. Analisis GC-MS

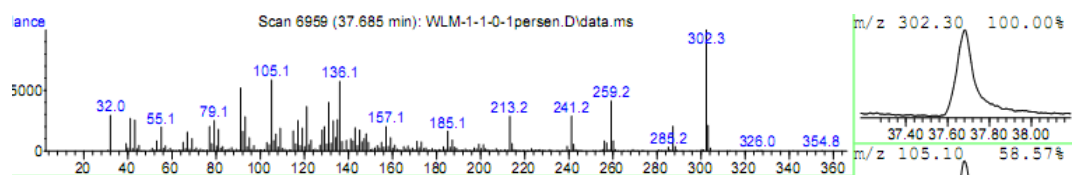
Kromatogram asam abitat metil ester dan asam abitat



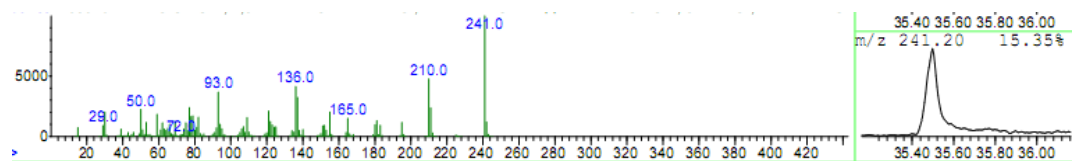
Asam abitat metil ester



Asam abitat



Asam abitat



dimetoksi 2 nitro metil ester

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-1persen.D
 Acq On : 4 Oct 2019 2:34
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

k#	RT	Area#	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	1.962	3.16	D:\DATABASE\DEMO.L Methyl Alcohol \$\$ Methanol \$\$ Carb inol \$\$ Methyl hydroxide METHANOL \$\$ HYDROXYMETHANE \$\$ ALCO HOL, METHYL \$\$ ALCOOL METHYLIQUE Methyl Alcohol \$\$ Methanol \$\$ Carb inol \$\$ Methyl hydroxide	5073 5075 5072	000067-56-1 000067-56-1 000067-56-1	2 2 2
2	2.135	0.07	D:\DATABASE\DEMO.L Pentane, 2,4-dimethyl- \$\$ 2,4-Dime thylpentane Pentane, 2,4-dimethyl- \$\$ 2,4-Dime thylpentane PENTANE, 2,4-DIMETHYL- \$\$ 2,4-DIME THYLPENTANE \$\$ PENTANE, 2,4-DIMETH YL	18750 18753 65648	000108-08-7 000108-08-7 000108-08-7	91 90 78
3	2.200	7.06	D:\DATABASE\DEMO.L PENTANE, 2,3-DIMETHYL- \$\$ 2,3-DIME THYLPENTANE \$\$ 3, 4-DIMETHYLPENTAN E \$\$ 3,4-DIMETHYLPENTANE Pentane, 2,3-dimethyl- \$\$ 2,3-Dime thylpentane \$\$ 3,4-Dimethylpentane Hexane, 3-methyl- \$\$ 2-Ethylpentan e \$\$ 3-Methylhexane	62374 62321 18743	000565-59-3 000565-59-3 000589-34-4	64 64 62
4	2.243	2.53	D:\DATABASE\DEMO.L Cyclopentane, 1,3-dimethyl-, cis- \$\$ cis-1,3-Dimethylcyclopentane \$\$ 1,3-Dimethylcyclopentane cis \$\$ 1 ,3-Dimethylcyclopentane # 1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE \$\$ CYCLOP	62231 62286	002532-58-3 002532-58-3	93 93
5	2.335	3.91	D:\DATABASE\DEMO.L CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL OHEXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$ CYCLOHEXANE, METHYL Cyclohexane, methyl- \$\$ Cyclohexyl methane \$\$ Hexahydrotoluene \$\$ Met hylcyclohexane CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL OHEXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$ CYCLOHEXANE, METHYL	141469 141386 141467	000108-87-2 000108-87-2 000108-87-2	96 96 96
6	2.421	78.74	D:\DATABASE\DEMO.L 1,5-Heptadien-3-yne \$\$ (5E)-1,5-He ptadien-3-yne # BENZENE, METHYL- \$\$ METHYLBENZENE \$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A BENZENE, METHYL- \$\$ METHYLBENZENE \$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A	6415 158628 158624	003511-27-1 000108-88-3 000108-88-3	83 80 70

58.M Thu Oct 10 09:03:11 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-1persen.D
 Acq On : 4 Oct 2019 2:34
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

k#	RT	Area#	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
7	2.746	0.44	D:\DATABASE\DEMO.L CYCLOHEXANE, ETHYL- \$S ETHYLCYCLOH EXANE \$S ETHYL CYCLOHEXANE \$S ETHY LCYCLOHEXAN Cyclohexane, ethyl- \$S Ethylcycloh exane CYCLOHEXANE, ETHYL- \$S ETHYLCYCLOH EXANE \$S ETHYL CYCLOHEXANE \$S ETHY LCYCLOHEXAN	141558 141525 141562	001678-91-7 001678-91-7 001678-91-7	94 94 94
8	33.504	0.08	D:\DATABASE\DEMO.L 2-Phenanthrenol, 4b,5,6,7,8,8a,9,1 0-octahydro-4b,8,8-trimethyl-1-(1- methylethyl)-, (4bS-trans)- \$S Pod ocarpa-8,11,13-trien-13-ol, 14-iso propyl- \$S Totarol \$S Totarol (b63 7832k176) 14-ISOPROPYLPODOCARPA-8,11,13-TRIE N-13-OL \$S 2-PHENANTHRENOL, 4B,5,6 7,8,8A,9,10-OCTAHYDRO-4B,8,8-TRIM ETHYL-1-(1-METHYLETHYL)-, (4BS-TRA NS)- \$S (+)-TOTAROL \$S 4B,5,6,7,8, 8A,9,10-OCTAHYDRO-4B,8,8-TRIMETHYL -1-(1-METHYLETHYL)-2-PHENANTHRENOL 5.beta.-Pregn-11-ene \$S Pregn-11-e ne *	492851 492900 492863	000511-15-9 000511-15-9 006673-73-0	46 46 42
9	33.866	0.04	D:\DATABASE\DEMO.L 1-Methyl-10,18-bisnorabieta-8,11,1 3-triene 10,13-DIMETHYL-4,5,6,7,8,9,10,11,1 2,13,14,15-DODECAHYDRO-1H-CYCLOPEN TA[A]PHENANTHRENE \$S ANDROSTA-2,16 ----- 4-(N-METHYLAMINO)-6,7-(1,2,3,4-TET RAHYDRO-1,1,4,4-TETRAMETHYLBENZO)I NDOLE	466158 466180 466219	999466-16-6 999466-18-8 000000-00-0	93 91 83
10	35.492	1.18	D:\DATABASE\DEMO.L BENZ[A]ANTHRACENONE 1H-NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-5,10-DIONE 3,4-DIHYDRO-7,9-DIMETHOXY-1,3-DIM ETHYL-, TRANS-(+)- \$S (+,-)-DEO XYQUINONE A DIMETHYL ETHER \$S (+,-)-TRANS-7,9-DIMETHOXY-1,3-DIMETHYL -3,4,5,10-TETRAHYDRONAPHTHO[2,3-C] PYRAN-5,10-DIONE 1-[1-(4-METHYLTHIO)HEXYLIDENE]-4-P HENYLCYCLOHEXANE	513655 513557 504561	099707-96-7 084018-44-0 113035-73-7	83 72 52
11	35.665	0.06	D:\DATABASE\DEMO.L PINE ROSIN MIXTURE ROSIN ACIDS Xanthen-9-one, 1-hydroxy-3,5,8-tri methoxy- \$S 5,8-Dimethylbellidifol in \$S 1-Hydroxy-3,5,8-trimethoxyxa nthen-9-one \$S 1-Hydroxy-3,5,8-tri methoxy-9H-xanthen-9-one *	504612 504611 504583	000000-00-0 000000-00-0 049599-09-9	50 47 35

158.M Thu Oct 10 09:03:11 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-lpersen.D
 Acq On : 4 Oct 2019 2:34
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area#	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
12	35.762	0.14	D:\DATABASE\DEMO.L			
			DEHYDROABIETIC ACID	464556	000000-00-0	97
			METHYL ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OAT	464548	001235-74-1	94
			E \$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID			
			, 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,			
			4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, ME			
			THYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.			
			,10A.ALPHA.)]- \$ DEHYDROABIETIC A			
			CID METHYL ESTER \$ METHYL DEHYDRO			
			ABIETATE			
			METHYL ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OAT	464543	999464-55-1	94
			E \$ PHENANTHREN-1-CARBOXYLIC ACID,			
			1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-7-ISO			
			PROPYL-1,4A-DIMETHYL-, METHYLESTER			
			(DEHYDROABIETINSAEUREMETHYLESTER)			
13	36.097	0.08	D:\DATABASE\DEMO.L			
			PIMARA-8(14),15-DIEN-18-OIC ACID \$	504608	000127-27-5	70
			\$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 7			
			-ETHENYL-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,9,10,			
			10A-DODECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-,			
			[1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,			
			7.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$ (+)-PIMAR			
			IC ACID \$.ALPHA.-PIMARIC ACID			
			ANDROST-16-ENE-17-CARBOXYLIC ACID	504607	054411-93-7	41
			\$ ANDROST-16-ENE-17-CARBOXYLIC AC			
			ID, (5.ALPHA.)- \$ ANDROST-16-ENE-			
			17-CARBOXYLIC ACID, (5.ALPHA.)-			
			Androst-16-ene-17-carboxylic acid,	504579	054411-93-7	41
			(5.alpha.)- \$ Androst-16-ene-17-			
			carboxylic acid #			
14	36.394	0.02	D:\DATABASE\DEMO.L			
			METHYL ABIETA-7,13-DIEN-18-OATE \$	480550	000127-25-3	89
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,			
			2,3,4,4A,4B,5,6,10,10A-DECAHYDRO-1			
			,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, M			
			ETHYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA			
			,4B.ALPHA.,10A.ALPHA.)]- \$ ABALY			
			N \$ ABIETIC ACID METHYL ESTER			
			Methyl abietate \$ 1-Phenanthrene	480547	000127-25-3	87
			carboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,			
			10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(
			1-methylethyl)-, methyl ester, [1R			
			-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.			
			alpha.)]- \$ Podocarpa-7,13-dien-1			
			5-oic acid, 13-isopropyl-, methyl			
			ester \$ Abalyn			
			17-NORKAUR-9(11)-EN-18-OIC ACID, 1	466510	063558-42-9	64
			6-OXO-, METHYL ESTER, (4.ALPHA.)-			
			\$ 16-OXO-17-NOR-9(11)-KAUREN-18-C			
			ARBOXYLIC ACID-METHYLESTER \$ 1H-2			
			,10A-ETHANOPHENANTHRENE, 17-NORKAU			
			R-9(11)-EN-18-OIC ACID DERIV.			
15	36.600	0.15	D:\DATABASE\DEMO.L			
			ROSIN ACIDS	504611	000000-00-0	95
			(+)-CIS-3,4,6,9-TETRAHYDRO-10-HYD	504601	124821-09-6	90
			ROXY-7-METHOXY-1,3,8-TRIMETHYL-1H-			

158.M Thu Oct 10 09:03:11 2019

Library search report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-1persen.D
 Acq On : 4 Oct 2019 2:34
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-6,9-DIONE(+)- -VENTILAGONE 7-METHYL ETHYL] PINE ROSIN MIXTURE	504612	000000-00-0	46
16	36.751	0.14	D:\DATABASE\DEMO.L Abietic acid §§ 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- §§ Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- §§ 1-abietic acid 1H-2,10A-ETHANOPHENANTHRENE, KAUR- 16-EN-18-OIC ACID DERIV. §§ KAUR-1 6-EN-18-OIC ACID §§ KAUR-16-EN-18- OIC ACID, (4.ALPHA.)- §§ (-)-ENT-K AUR-16-EN-19-OIC ACID 2-ACETYL-4,9-DIMETHOXY-7-METHYL-5H -FURO[3,2-G][1]-BENZOPYRAN-5-ONE	513378 513651 513538	000514-10-3 006730-83-2 092611-83-1	93 76 55
17	36.967	0.28	D:\DATABASE\DEMO.L 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 ,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1. alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- §§ P odocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid , 13-isopropyl- §§ Abieta-8,11,13- trien-18-oic acid §§ Abietic acid, dehydro- 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2 ,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DI METHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1. ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- §§ (503093 503110	001740-19-8 001740-19-8	99 99
			-)-DEHYDROABIETIC ACID §§ 1,2,3,4, 4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHY L-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE CARBOXYLIC ACID ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID § § PODOCARPA-8,11,13-TRIEN-15-SAEUR E, 13-ISOPROPYL-	503106	999503-11-8	97
18	37.037	0.38	D:\DATABASE\DEMO.L 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2 ,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DI METHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1. ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- §§ (503110	001740-19-8	70
			-)-DEHYDROABIETIC ACID §§ 1,2,3,4, 4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHY L-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE CARBOXYLIC ACID 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 ,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1. alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- §§ P odocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid , 13-isopropyl- §§ Abieta-8,11,13- trien-18-oic acid §§ Abietic acid, dehydro- 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2	503093 503082	001740-19-8 001740-19-8	70 56

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-1persen.D
 Acq On : 4 Oct 2019 2:34
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area#	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			, 3, 4, 4a, 9, 10, 10a-octahydro-1, 4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1. alpha., 4a.beta., 10a.alpha.)]- 55 P odocarpa-8, 11, 13-trien-15-oic acid , 13-isopropyl- 55 Abieta-8, 11, 13- trien-16-oic acid 55 Abietic acid, dehydro-			
19	37.685	1.51	D:\DATABASE\DEMO.L Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1, 2, 3, 4, 4a, 4b, 5, 6, 10, 10a-decahydro-1, 4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha., 4a.bet a., 4b.alpha., 10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7, 13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid	513378	000514-10-3	99
			Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1, 2, 3, 4, 4a, 4b, 5, 6, 10, 10a-decahydro-1, 4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha., 4a.bet a., 4b.alpha., 10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7, 13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid	513347	000514-10-3	93
			Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1, 2, 3, 4, 4a, 4b, 5, 6, 10, 10a-decahydro-1, 4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha., 4a.bet a., 4b.alpha., 10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7, 13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid	513344	000514-10-3	93

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-2persen.D
 Acq On : 4 Oct 2019 3:55
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	1.962	2.79	D:\DATABASE\DEMO.L Methyl Alcohol \$\$ Methanol \$\$ Carb incl \$\$ Methyl hydroxide METHANOL \$\$ HYDROXYMETHANE \$\$ ALCO HOL, METHYL \$\$ ALCOOL METHYLIQUE Methyl Alcohol \$\$ Methanol \$\$ Carb incl \$\$ Methyl hydroxide	5073 5075 5072	000067-56-1 000067-56-1 000067-56-1	2 2 2
2	2.135	0.07	D:\DATABASE\DEMO.L Pentane, 2,4-dimethyl- \$\$ 2,4-Dime thylpentane Pentane, 2,4-dimethyl- \$\$ 2,4-Dime thylpentane PENTANE, 2,4-DIMETHYL- \$\$ 2,4-DIME THYLPENTANE \$\$ PENTANE, 2,4-DIMETH YL	18750 18799 65648	000108-08-7 000108-08-7 000108-08-7	91 83 83
3	2.200	7.13	D:\DATABASE\DEMO.L Pentane, 2,3-dimethyl- \$\$ 2,3-Dime thylpentane \$\$ 3,4-Dimethylpentane PENTANE, 2,3-DIMETHYL- \$\$ 2,3-DIME THYLPENTANE \$\$ 3, 4-DIMETHYLPENTAN E \$\$ 3,4-DIMETHYLPENTANE Hexane, 3-methyl- \$\$ 2-Ethylpentan e \$\$ 3-Methylhexane	62321 62374 18743	000565-59-3 000565-59-3 000589-34-4	64 64 62
4	2.243	2.58	D:\DATABASE\DEMO.L Cyclopentane, 1,3-dimethyl-, cis- \$\$ cis-1,3-Dimethylcyclopentane \$\$ 1,3-Dimethylcyclopentane cis \$\$ 1 ,3-Dimethylcyclopentane # 1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE \$\$ CYCLOP ENTANE, 1,3-DIMETHYL-, CIS- \$\$ 1,3 -DIMETHYLCYCLOPENTANE (CIS) \$\$ 1,3 -DIMETHYLCYCLOPENTANE CIS 1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE \$\$ CYCLOP ENTANE, 1,2-DIMETHYL-, CIS- \$\$ 1,2 -DIMETHYLCYCLOPENTANE (CIS) \$\$ 1,2 -DIMETHYLCYCLOPENTANE, CIS	62231 62286	002532-58-3 002532-58-3	93 93
5	2.329	4.02	D:\DATABASE\DEMO.L CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL OHEXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$ CYCLOHEXANE, METHYL CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL OHEXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$ CYCLOHEXANE, METHYL Cyclohexane, methyl- \$\$ Cyclohexyl methane \$\$ Hexahydrotoluene \$\$ Met hylcyclohexane	141469 141467 141386	000108-87-2 000108-87-2 000108-87-2	96 96 96
6	2.421	78.20	D:\DATABASE\DEMO.L 1,5-Heptadien-3-yne \$\$ (5E)-1,5-He ptadien-3-yne # BENZENE, METHYL- \$\$ METHYLBENZENE \$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A BENZENE, METHYL- \$\$ METHYLBENZENE \$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A	6415 158628 158606	003511-27-1 000108-88-3 000108-88-3	83 80 70

Library search report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-2persen.D
 Acq On : 4 Oct 2019 3:55
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0
 Unknown Spectrum: Apex
 Integration Events: ChemStation Integrator - autoint1.e

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
7	2.745	0.47	D:\DATABASE\DEMO.L CYCLOHEXANE, ETHYL- §§ ETHYLCYCLOH EXANE §§ ETHYL CYCLOHEXANE §§ ETHY LCYCLOHEXAN Cyclohexane, ethyl- §§ Ethylcycloh exane CYCLOHEXANE, ETHYL- §§ ETHYLCYCLOH EXANE §§ ETHYL CYCLOHEXANE §§ ETHY LCYCLOHEXAN	141558	001678-91-7	93
8	31.992	0.02	D:\DATABASE\DEMO.L 3(2H)-PYRIDAZINONE, 2-[4-METHOXY-3 -(1-METHYLETHYL) PHENYL]-6-METHYL- §§ 2-(3-ISOPROPYL-4-METHOXYPHENYL) -6-METHYLPYRIDAZIN-3(2H)-ONE (+)-(3S*,4AS*,9AS*)-7-HYDROXY-3,6 ,8,9,9-PENTAMETHYL-1,2,3,4,4A,9A-H EXAHYDROFLURENE BENZ[A]ANTHRACENE, 7,12-DIHYDRO-7, 12-DIMETHYL-	481976	120129-92-2	83
9	33.504	0.08	D:\DATABASE\DEMO.L 5-HYDROXY-1,3,4-TRIMETHOXY-7-METHY L-6-PROPARGYNAPHTHALENE ANDROST-5-ENE, 4,4-DIMETHYL-, (13. ALPHA.)- §§ 4,4-DIMETHYL-13.ALPHA. -ANDROST-5-ENE 8A(6H)-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID , 7,8,9,10-TETRAHYDRO-2-METHOXY-6, 6-DIMETHYL-, (.+.-)- §§ 10A-CARBOX Y-7-METHOXY-3,3-DIMETHYL-1,2,3,9,1 0,10A-HEXAHYDROPHENANTHRENE	492890	000000-00-0	90
10	33.872	0.04	D:\DATABASE\DEMO.L 1-Methyl-10,18-bisnorabieta-8,11,1 3-triene s-Indacen-1(2H)-one, 3,5,6,7-tetra hydro-3,3,4,5,5,8-hexamethyl- §§ 3 ,3,4,5,5,8-Hexamethyl-3,5,6,7-tetr ahydro-s-indacen-1(2H)-one # 3,3,4,5,5,8-HEXAMETHYL-3,5,6,7-TET RAHYDRO-S-INDACEN-1(2H)-ONE §§ S-I NDACEN-1(2H)-ONE, 3,5,6,7-TETRAHYD RO-3,3,4,5,5,8-HEXAMETHYL- §§ 3,3, 4,5,5,8-HEXAMETHYL-1-S-HYDRINDACEN ONE	466158	999466-16-6	94
11	35.498	1.28	D:\DATABASE\DEMO.L (+)-CIS-3,4,6,9-TETRAHYDRO-10-HYD ROXY-7-METHOXY-1,3,8-TRIMETHYL-1H- NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-6,9-DIONE[(+) -VENTILAGONE 7-METHYL ETHYL] BENZ[A]ANTHRACENONE PINE ROSIN MIXTURE	504601	124821-09-6	90
12	35.660	0.08	D:\DATABASE\DEMO.L 3-((1-Amino-2-naphthyl)methylene)- 2-benzofuran-1(3H)-one peak 1 Methyl 3-amino-2-cyano-3-(3-indoly	504402	999504-41-4	25

158.M Thu Oct 10 09:04:51 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-2persen.D
 Acq On : 4 Oct 2019 3:55
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			1)acrylate 55 Methyl (2Z)-3-amino-2-cyano-3-(1H-indol-3-yl)-2-propenoate #			
			BENZOIC ACID, 4,5-DIMETHOXY-2-NITRO-, METHYL ESTER 55 VERATRIC ACID, 6-NITRO-, METHYL ESTER 55 4,5-DIMETHOXY-2-NITROBENZOIC ACID, METHYL ESTER 55 METHYL 3,4-DIMETHOXY-6-NITROBENZOATE	465970	026791-93-5	25
13	35.757	0.16	D:\DATABASE\DEMO.L DEHYDROABIETIC ACID	464556	000000-00-0	97
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, methyl ester, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- 55 Podocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid, 13-isopropyl-, methyl ester 55 Methyl dehydroabietate	464536	001235-74-1	89
			METHYL ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OATE 55 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, METHYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- 55 DEHYDROABIETIC ACID METHYL ESTER 55 METHYL DEHYDROABIETATE	464549	001235-74-1	87
14	36.108	0.08	D:\DATABASE\DEMO.L PIMARA-8(14),15-DIEN-18-OIC ACID 5	504609	000127-27-5	78
			5 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 7-ETHENYL-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,9,10,10A-DODECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,7.BETA.,10A.ALPHA.)]- 55 (+)-PIMARIC ACID 55 .ALPHA.-PIMARIC ACID	513558	084018-43-9	52
			1H-NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-5,10-DIONE, 3,4-DIHYDRO-7,9-DIMETHOXY-1,3-DIMETHYL-, CIS-(+)- 55 (+,-)-CIS-7,9-DIMETHOXY-1,3-DIMETHYL-3,4,5,10-TETRAHYDRONAPHTHO[2,3-C]PYRAN-5,10-DIONE	504526	090594-32-4	50
			CYCLOPROPANECARBONITRILE, 1,1'-[IMINOBIS(METHYLENE)]BIS[2,2,3,3-TETRAMETHYL- 55 2,2',2',3,3,3',3'-OCAMETHYL-1,1'-IMINEBIS(METHYLENE)DICYCLOPROPANE-1,1'-DICARBONITRILE			
15	36.383	0.03	D:\DATABASE\DEMO.L METHYL ABIETA-7,13-DIEN-18-OATE 55	258918	000127-25-3	90
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2,3,4,4A,4B,5,6,10,10A-DECAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, METHYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,10A.ALPHA.)]- 55 ABALYN 55 ABIETIC ACID METHYL ESTER	258889	000127-25-3	90
			Methyl abietate 55 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(

058.M Thu Oct 10 09:04:51 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-2persen.D
 Acq On : 4 Oct 2019 3:55
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			1-methylethyl)-, methyl ester, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$ \$ Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl-, methyl ester \$ \$ Abalyn			
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 7-ethenyl-1,2,3,4,4a,4b,5,6,7,8,10,10a-dodecahydro-1,4a,7-trimethyl-, methyl ester, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,7.alpha.,10a.alpha.)]- \$ \$ Podocarp-7-en-15-oic acid, 13.beta.-methyl-13-vinyl-, methyl ester	466503	001686-62-0	50
16	36.605	0.17	D:\DATABASE\DEMO.L BENZ[A]ANTHRACENONE	513655	099707-96-7	90
			ROSIN ACIDS	504611	000000-00-0	60
			Phenol, 2,4-bis(1-phenylethyl)- \$ \$ 2,4-Bis(1-phenylethyl)phenol #	504578	002769-94-0	46
17	36.751	0.24	D:\DATABASE\DEMO.L 1,4-DIHYDRO-9-ISOPROPYLIDENE-5,6,7,8-TETRAMETHOXY-1,4-METHANONAPHTHALENE	513581	000000-00-0	90
			Abietic acid \$ \$ 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$ \$ Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl- \$ \$ L-abietic acid	513378	000514-10-3	70
			1H-2,10A-ETHANOPHENANTHRENE, KAUR-16-EN-18-OIC ACID DERIV. \$ \$ KAUR-16-EN-18-OIC ACID \$ \$ KAUR-16-EN-18-OIC ACID, (4.ALPHA.)- \$ \$ (-)-ENT-KAUR-16-EN-19-OIC ACID	513651	006730-83-2	70
18	36.972	0.36	D:\DATABASE\DEMO.L ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID \$ \$ 5 PODOCARPA-8,11,13-TRIEN-15-SAEURE, 13-ISOPROPYL-	503106	999503-11-8	99
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$ \$ Podocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid, 13-isopropyl- \$ \$ Abieta-8,11,13-trien-18-oic acid \$ \$ Abietic acid, dehydro-	503093	001740-19-8	98
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$ \$ (-)-DEHYDROABIETIC ACID \$ \$ 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE CARBOXYLIC ACID	503110	001740-19-8	98
19	37.043	0.58	D:\DATABASE\DEMO.L			

058.M Thu Oct 10 09:04:51 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-2persen.D
 Acq On : 4 Oct 2019 3:55
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			ABIETA-8,11,13-TRIEN-16-OIC ACID \$	503106	999503-11-8	59
			\$ PODOCARPA-8,11,13-TRIEN-15-SAEUR			
			E, 13-ISOPROPYL-			
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2	503094	005155-70-4	55
			, 3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di			
			methyl-7-(1-methylethyl)-, [1S-(1.			
			alpha.,4a.alpha.,10a.beta.)]- \$ P			
			odocarpa-8,11,13-trien-16-oic acid			
			, 13-isopropyl- \$ Callitrisic aci			
			d \$ 4-Epiabiatic acid, dehydro-			
			ABIETA-8,11,13-TRIEN-16-OIC ACID \$	503112	005155-70-4	55
			\$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1			
			, 2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-			
			DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1S-(
			1.ALPHA.,4A.ALPHA.,10A.BETA.)]- \$			
			13-ISOPROPYLPODOCARPA-8,11,13-TRI			
			EN-16-OIC ACID \$ 4-EPIABIATIC ACI			
			D, DEHYDRO-			
20	37.696	1.58	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Abietic acid \$ 1-Phenanthrenecarb	513378	000514-10-3	99
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,			
			10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m			
			ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet			
			a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$ Podo			
			carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is			
			opropyl- \$ L-abietic acid			
			Abietic acid \$ 1-Phenanthrenecarb	513344	000514-10-3	95
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,			
			10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m			
			ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet			
			a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$ Podo			
			carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is			
			opropyl- \$ L-abietic acid			
			PHENOL, 5-[2-(3-HYDROXY-4-METHOXYP	513563	111394-45-7	90
			HENYL)ETHENYL]-2,3-DIMETHOXY-, (Z)			
			- \$ 2,3-DIMETHOXY-5-[2-(3-HYDROXY			
			-4-METHOXYPHENYL)ETHENYL]PHENOL (Z			
) \$ COMBRETASTATIN A3			
21	39.009	0.05	D:\DATABASE\DEMO.L			
			THIOCYANIC ACID, (4,7,7-TRIMETHYL-	445502	063499-06-9	46
			3-OXOBICYCLO[2.2.1]HEPT-2-YLIDENE)			
			METHYL ESTER \$ 1,7,7-TRIMETHYL-3-			
			THIOCYANATOMETHYLEN-BICYCLO[2,2,1]			
			HEPTAN-2-ONE			
			Abietic acid \$ 1-Phenanthrenecarb	513378	000514-10-3	42
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,			
			10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m			
			ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet			
			a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$ Podo			
			carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is			
			opropyl- \$ L-abietic acid			
			2-Amino-4-(4-nitrophenyl)thiazole	445349	002104-09-8	38
			\$ Thiazole, 2-amino-4-(p-nitrophe			
			nyl)- \$ 2-Amino-4-(p-nitrophenyl)			
			thiazole \$ 2-Thiazolamine, 4-(4-n			
			itrophenyl)-			

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\das\
 Data File : WLM-1-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 6:03
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: (

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

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	1.962	3.02	D:\DATABASE\DEMO.L Methyl Alcohol \$\$ Methanol \$\$ Carb inol \$\$ Methyl hydroxide METHANOL \$\$ HYDROXYMETHANE \$\$ ALCO HOL, METHYL \$\$ ALCOOL METHYLIQUE Methyl Alcohol \$\$ Methanol \$\$ Carb inol \$\$ Methyl hydroxide	5073	000067-56-1	2
				5075	000067-56-1	2
				5072	000067-56-1	2
2	2.135	0.07	D:\DATABASE\DEMO.L PENTANE, 2,4-DIMETHYL- \$\$ 2,4-DIME THYLPENTANE \$\$ PENTANE, 2,4-DIMETH YL Pentane, 2,4-dimethyl- \$\$ 2,4-Dime thylpentane Pentane, 2,4-dimethyl- \$\$ 2,4-Dime thylpentane	19002	000108-08-7	90
				18753	000108-08-7	90
				18799	000108-08-7	90
3	2.205	6.75	D:\DATABASE\DEMO.L HEXANE, 3-METHYL- \$\$ 3-METHYLHEXAN E \$\$ 2-ETHYLPENTANE \$\$ HEXANE, 3-M ETHYL Hexane, 3-methyl- \$\$ 2-Ethylpenta n \$\$ 3-Methylhexane Hexane, 3-methyl- \$\$ 2-Ethylpenta n \$\$ 3-Methylhexane	18994	000589-34-4	68
				18743	000589-34-4	62
				18754	000589-34-4	58
4	2.243	2.40	D:\DATABASE\DEMO.L Cyclopentane, 1,3-dimethyl- \$\$ 1,3 -Dimethylcyclopentane 1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE \$\$ CYCLOP ENTANE, 1,3-DIMETHYL-, CIS- \$\$ 1,3 -DIMETHYLCYCLOPENTANE (CIS) \$\$ 1,3 -DIMETHYLCYCLOPENTANE CIS Cyclopentane, 1,3-dimethyl-, cis- \$\$ cis-1,3-Dimethylcyclopentane \$\$ 1,3-Dimethylcyclopentane cis \$\$ 1 ,3-Dimethylcyclopentane #	101343	002453-00-1	94
				62286	002532-58-3	93
				62231	002532-58-3	93
5	2.335	3.76	D:\DATABASE\DEMO.L CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL OHEXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$ CYCLOHEXANE, METHYL CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL OHEXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$ CYCLOHEXANE, METHYL Cyclohexane, methyl- \$\$ Cyclohexyl methane \$\$ Hexahydrotoluene \$\$ Met hylcyclohexane	141469	000108-87-2	96
				141467	000108-87-2	96
				141386	000108-87-2	96
6	2.421	78.07	D:\DATABASE\DEMO.L BENZENE, METHYL- \$\$ METHYLBENZENE \$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A 1,5-Heptadien-3-yne \$\$ (5E)-1,5-He ptadien-3-yne # BENZENE, METHYL- \$\$ METHYLBENZENE \$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A	158628	000108-88-3	90
				6415	003511-27-1	83
				158606	000108-88-3	70
7	2.745	0.45	D:\DATABASE\DEMO.L CYCLOHEXANE, ETHYL- \$\$ ETHYLCYCLOH	141562	001678-91-7	93

058.M Thu Oct 10 09:08:02 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 6:03
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			EXANE §§ ETHYL CYCLOHEXANE §§ ETHYLCYCLOHEXAN			
			Cyclohexane, ethyl- §§ Ethylcyclohexane	141525	001678-91-7	93
			CYCLOHEXANE, ETHYL- §§ ETHYLCYCLOHEXANE	141558	001678-91-7	93
			EXANE §§ ETHYL CYCLOHEXANE §§ ETHYLCYCLOHEXAN			
8	30.544	0.03	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Cyclohexanespiro-2'-bicyclo[1.1.0]butane-4'-spirocyclohexane	402449	107924-94-7	30
			SPIRO[4.5]DEC-1-EN-3-ONE, 2-(1-METHYLETHENYL)- §§ 2-ISOPROPENYL-3-ONE	402774	092749-34-3	30
			E-[4,5]-SPIRODEC-1-ENE			
			Thiazole, 2-amino-5-methyl-4-phenyl- §§ 2-Amino-5-methyl-4-phenylthiazole §§ 5-Methyl-4-phenyl-1,3-thiazol-2-amine #	402521	030709-67-2	27
9	31.689	0.05	D:\DATABASE\DEMO.L			
			(+)-(3S*,4AS*,9AS*)-7-HYDROXY-3,6,8,9,9-PENTAMETHYL-1,2,3,4,4A,9A-H EXAHYDROFLURENE	482050	000000-00-0	90
			BENZENE, 1-METHOXY-4-(3,3,5,5,6-PENTAMETHYL-1-CYCLOHEXEN-1-YL)- §§ 1-(4-METHOXYPHENYL)-3,3,5,5,6-PENTAMETHYL-1-CYCLOHEXENE	468192	098386-62-0	64
			PROPANEDINITRILE, [BIS(4-METHYLPHENYL)METHYLENE]- §§ DICYANOMETHYLENE DERIVATIVE OF 4,4'-DIMETHYLBENZOPHENONE §§ MALONONITRILE, (DI-P-TOLYLMETHYLENE)-	482036	082074-10-0	52
10	31.981	0.04	D:\DATABASE\DEMO.L			
			BENZ[A]ANTHRACENE, 7,12-DIHYDRO-7,12-DIMETHYL-	468203	035281-31-3	87
			PROPANEDINITRILE, [BIS(4-METHYLPHENYL)METHYLENE]- §§ DICYANOMETHYLENE DERIVATIVE OF 4,4'-DIMETHYLBENZOPHENONE §§ MALONONITRILE, (DI-P-TOLYLMETHYLENE)-	482036	082074-10-0	86
			(+)-(3S*,4AS*,9AS*)-7-HYDROXY-3,6,8,9,9-PENTAMETHYL-1,2,3,4,4A,9A-H EXAHYDROFLURENE	482050	000000-00-0	83
11	33.493	0.06	D:\DATABASE\DEMO.L			
			9(4H)-ANTHRACENONE, 1,4A,5,8,8A,9A,10,10A-OCTAHYDRO-2,3,6,7-TETRAMETHYL-, (4A.ALPHA.,8A.BETA.,9A.ALPHA.,10A.BETA.)-(+)- §§ (+)-2,3,6,7-TETRAMETHYL-4,4A.ALPHA.,5,8,8A.BETA.,9A.ALPHA.,10,10A.BETA.-OCTAHYDROANTHRACEN-9(1H)-ONE	165500	125219-19-4	47
			ANDROST-4-ENE-3,17-DIONE §§ .DELTA.(SUP4)-ANDROSTENE-3,17-DIONE §§ .DELTA-(SUP4)-ANDROSTEN-3,17-DIONE §§ .DELTA.-4-ANDROSTENE-3,17-DIONE	167349	000063-05-8	41
			2H-PYRROLE-3-CARBOXYLIC ACID, 2,2-DIMETHYL-5-(METHYLPHENYLAMINO)-, E	223636	085937-68-4	38

058.M Thu Oct 10 09:08:02 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 6:03
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			THYL ESTER \$\$ ETHYL ESTER OF 2,2-D IMETHYL-5-(N-METHYLANILINO)-2H-PYR ROL-3-CARBOXYLIC ACID \$\$ ETHYL EST ER OF 4,4-DIMETHYL-7-PHENYL-5,7-DI AZAOC-5-EN-2-INOIC ACID			
12	33.861	0.06	D:\DATABASE\DEMO.L 10,13-DIMETHYL-4,5,6,7,8,9,10,11,1 2,13,14,15-DODECAHYDRO-1H-CYCLOP TA(A)PHENANTHRENE \$\$ ANDROSTA-2,16 -DIENE 1-Methyl-10,18-bisnorabieta-8,11,1 3-triene 2.BETA.,8.BETA.-(DIMETHOXY)-4,6-DI METHYL-3,5,7-TRIOXATETRACYCLO[7.2. 1.0(4,11).0(6,10)]DODECANE	466180	999466-18-8	96
			1-Methyl-10,18-bisnorabieta-8,11,1 3-triene 2.BETA.,8.BETA.-(DIMETHOXY)-4,6-DI METHYL-3,5,7-TRIOXATETRACYCLO[7.2. 1.0(4,11).0(6,10)]DODECANE	466158	999466-16-6	94
			2.BETA.,8.BETA.-(DIMETHOXY)-4,6-DI METHYL-3,5,7-TRIOXATETRACYCLO[7.2. 1.0(4,11).0(6,10)]DODECANE	466200	000000-00-0	90
13	34.304	0.02	D:\DATABASE\DEMO.L Naphthalene, 6-ethyl-1,2,3,4-tetra hydro-1,1,4,4-tetramethyl-7-(1-met hylethenyl)- \$\$ 6-Ethyl-7-isoprop nyl-1,1,4,4-tetramethyl-1,2,3,4-te trahydronaphthalene # Pimaric acid \$\$ 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 7-ethenyl-1,2,3,4,4a, 4b,5,6,7,9,10,10a-dodecahydro-1,4a ,7-trimethyl-, [1R-(1.alpha.,4a.be ta.,4b.alpha.,7.beta.,10a.alpha.)] - \$\$ Podocarp-8(14)-en-15-oic acid , 13.alpha.-methyl-13-vinyl- \$\$ D- pimaric acid 3,5-Bis(trifluoromethyl)benzamide 1,5-Bis(trifluoromethyl)benzamide	466156	301643-35-6	51
			Pimaric acid \$\$ 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 7-ethenyl-1,2,3,4,4a, 4b,5,6,7,9,10,10a-dodecahydro-1,4a ,7-trimethyl-, [1R-(1.alpha.,4a.be ta.,4b.alpha.,7.beta.,10a.alpha.)] - \$\$ Podocarp-8(14)-en-15-oic acid , 13.alpha.-methyl-13-vinyl- \$\$ D- pimaric acid	466434	000127-27-5	45
			3,5-Bis(trifluoromethyl)benzamide 1,5-Bis(trifluoromethyl)benzamide	466229	022227-26-5	43
			e \$\$ Benzamide, 3,5-bis(trifluorom ethyl)-			
14	35.303	0.02	D:\DATABASE\DEMO.L Methanol, (1-ethyl-2-benzimidazol yl)(1-naphthyl)- \$\$ (1-Ethyl-1H-ben zimidazol-2-yl)(1-naphthyl)methano l # KAUR-16-EN-18-OIC ACID \$\$ KAUR-16- EN-18-OIC ACID, (4.BETA.)- \$\$ (-)- KAURNENOIC ACID \$\$ (4-BETA)-KAUR-1 6-EN-18-OIC ACID 1H-2,10A-ETHANOPHENANTHRENE, KAUR- 16-EN-18-OIC ACID DERIV. \$\$ KAUR-1 6-EN-18-OIC ACID \$\$ KAUR-16-EN-18- OIC ACID, (4.ALPHA.)- \$\$ (-)-ENT-K AUR-16-EN-19-OIC ACID	513446	312532-05-1	53
			KAUR-16-EN-18-OIC ACID \$\$ KAUR-16- EN-18-OIC ACID, (4.BETA.)- \$\$ (-)- KAURNENOIC ACID \$\$ (4-BETA)-KAUR-1 6-EN-18-OIC ACID	168418	020316-84-1	52
			1H-2,10A-ETHANOPHENANTHRENE, KAUR- 16-EN-18-OIC ACID DERIV. \$\$ KAUR-1 6-EN-18-OIC ACID \$\$ KAUR-16-EN-18- OIC ACID, (4.ALPHA.)- \$\$ (-)-ENT-K AUR-16-EN-19-OIC ACID	513651	006730-83-2	46
15	35.481	1.11	D:\DATABASE\DEMO.L (+-)-CIS-3,4,6,9-TETRAHYDRO-10-HYD ROXY-7-METHOXY-1,3,8-TRIMETHYL-1H- NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-6,9-DIONE [(+-) -VENTILAGONE 7-METHYL ETHYL] ROSIN ACIDS PHENOL, 5-[2-(3-HYDROXY-4-METHOXYP HENYL)ETHENYL]-2,3-DIMETHOXY-, (Z)	504601	124821-09-6	90
			ROSIN ACIDS	504611	000000-00-0	78
			PHENOL, 5-[2-(3-HYDROXY-4-METHOXYP HENYL)ETHENYL]-2,3-DIMETHOXY-, (Z)	513563	111394-45-7	72

058.M Thu Oct 10 09:08:02 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 6:03
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			- \$\$ 2,3-DIMETHOXY-5-[2-(3-HYDROXY -4-METHOXYPHENYL)ETHENYL]PHENOL (2) \$\$ COMBRETASTATIN A3			
16	35.660	0.07	D:\DATABASE\DEMO.L 2,7-Phenanthrenediol, 1,2,3,4,4a,9 ,10,10a-octahydro-1,1,4a-trimethyl -8-(1-methylethyl)-, [2S-(2.alpha. ,4a.alpha.,10a.beta.)]- \$\$ Podocar pa-8,11,13-triene-3.beta.,13-diol, 14-isopropyl- \$\$ Totaradiol \$\$ 3. beta.-Hydroxytotarol Xanthen-9-one, 1-hydroxy-3,5,8-tri methoxy- \$\$ 5,8-Dimethylbellidifol in \$\$ 1-Hydroxy-3,5,8-trimethoxyxa nthen-9-one \$\$ 1-Hydroxy-3,5,8-tri methoxy-9H-xanthen-9-one #	504581	003772-56-3	47
			KAUR-16-EN-18-OIC ACID \$\$ KAUR-16- EN-18-OIC ACID, (4.BETA.)- \$\$ (-)- KAURNENOIC ACID \$\$ (4-BETA.)-KAUR-1 6-EN-18-OIC ACID	168418	020316-84-1	35
17	35.751	0.14	D:\DATABASE\DEMO.L DEHYDROABIETIC ACID METHYL ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OAT E \$\$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID , 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1, 4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, ME THYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA. ,10A.ALPHA.)]- \$\$ DEHYDROABIETIC A CID METHYL ESTER \$\$ METHYL DEHYDRO	464556 464549	000000-00-0 001235-74-1	96 86
			ABIETATE METHYL ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OAT E \$\$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID , 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1, 4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, ME THYL ESTER, [1S-(1.ALPHA.,4A.ALPHA. ,10A.BETA.)]- \$\$ METHYL CALLITRIS ATE	464555	024035-60-7	86
18	35.897	0.09	D:\DATABASE\DEMO.L 1,4-DIHYDRO-9-ISOPROPYLIDENE-5,6,7 ,8-TETRAMETHOXY-1,4-METHANONAPHTHA LENE Phenol, 2,4-bis(1-phenylethyl)- \$\$ 2,4-Bis(1-phenylethyl)phenol # 2,3-PHENANTHRENEEDIOL, 4B,5,6,7,8,8 A,9,10-OCTAHYDRO-4B,8,8-TRIMETHYL- 1-(1-METHYLETHYL)-, (4BS-TRANS)- \$ \$ PODOCARPA-8,11,13-TRIENE-12,13-D IOL, 14-ISOPROPYL- \$\$ 12,13-DIHYDR OXY-14-ISOPROPYLPODOCARPA-8,11,13- TRIENE \$\$ TOTARA-8,11,13-TRIEN-12, 13-DIOL	513581	000000-00-0	90
			Phenol, 2,4-bis(1-phenylethyl)- \$\$ 2,4-Bis(1-phenylethyl)phenol # 2,3-PHENANTHRENEEDIOL, 4B,5,6,7,8,8 A,9,10-OCTAHYDRO-4B,8,8-TRIMETHYL- 1-(1-METHYLETHYL)-, (4BS-TRANS)- \$ \$ PODOCARPA-8,11,13-TRIENE-12,13-D IOL, 14-ISOPROPYL- \$\$ 12,13-DIHYDR OXY-14-ISOPROPYLPODOCARPA-8,11,13- TRIENE \$\$ TOTARA-8,11,13-TRIEN-12, 13-DIOL	504578	002769-94-0	45
			2,3-PHENANTHRENEEDIOL, 4B,5,6,7,8,8 A,9,10-OCTAHYDRO-4B,8,8-TRIMETHYL- 1-(1-METHYLETHYL)-, (4BS-TRANS)- \$ \$ PODOCARPA-8,11,13-TRIENE-12,13-D IOL, 14-ISOPROPYL- \$\$ 12,13-DIHYDR OXY-14-ISOPROPYLPODOCARPA-8,11,13- TRIENE \$\$ TOTARA-8,11,13-TRIEN-12, 13-DIOL	504610	084104-87-0	44
19	36.086	0.11	D:\DATABASE\DEMO.L PHENOL, 5-[2-(3-HYDROXY-4-METHOXYP HENYL)ETHENYL]-2,3-DIMETHOXY-, (2) - \$\$ 2,3-DIMETHOXY-5-[2-(3-HYDROXY	513563	111394-45-7	80

058.M Thu Oct 10 09:08:02 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 6:03
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			-4-METHOXYPHENYL)ETHENYL)PHENOL (Z) \$\$ COMBRETASTATIN A3 PIMARA-8(14),15-DIEN-18-OIC ACID \$ 504609 000127-27-5 78 \$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 7 -ETHENYL-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,9,10, 10A-DODECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA., 7.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$\$ (+)-PIMAR IC ACID \$\$.ALPHA.-PIMARIC ACID 3-ACETYL-1-METHYL-2-(1'-METHYL-1H- INDOL-2'-YL)-1H-INDOLE 513641 000000-00-0 51			
20	36.378	0.08	D:\DATABASE\DEMO.L METHYL ABIETA-7,13-DIEN-18-OATE \$\$ 480551 000127-25-3 95 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1, 2,3,4,4A,4B,5,6,10,10A-DECAHYDRO-1 ,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, M ETHYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA .,4B.ALPHA.,10A.ALPHA.)]- \$\$ ABALY N \$\$ ABIETIC ACID METHYL ESTER Methyl abietate \$\$ 1-Phenanthreneoic erboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6, 10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, methyl ester, [1R -(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a. alpha.)]- \$\$ Podocarpa-7,13-dien-1 5-oic acid, 13-isopropyl-, methyl ester \$\$ Abalyn METHYL ABIETA-7,13-DIEN-18-OATE \$\$ 480550 000127-25-3 93 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1, 2,3,4,4A,4B,5,6,10,10A-DECAHYDRO-1 ,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, M ETHYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA .,4B.ALPHA.,10A.ALPHA.)]- \$\$ ABALY N \$\$ ABIETIC ACID METHYL ESTER	480547	000127-25-3	93
21	36.502	0.04	D:\DATABASE\DEMO.L Palustric acid \$\$ Podocarpa-8,13-d ien-15-oic acid, 13-isopropyl- \$\$ 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 ,3,4,4a,5,6,9,10,10a-decahydro-1,4 a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, (1R -(1.alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)- \$\$ 8,13-Abietadien-18-oic acid KAUR-16-EN-18-OIC ACID \$\$ KAUR-16- 168418 020316-84-1 58 EN-18-OIC ACID, (4.BETA.)- \$\$ (-)- KAURNENOIC ACID \$\$ (4-BETA.)-KAUR-1 6-EN-18-OIC ACID Pimaric acid \$\$ 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 7-ethenyl-1,2,3,4,4a, 4b,5,6,7,9,10,10a-dodecahydro-1,4a ,7-trimethyl-, [1R-(1.alpha.,4a.be ta.,4b.alpha.,7.beta.,10a.alpha.)] - \$\$ Podocarp-8(14)-en-15-oic acid , 13.alpha.-methyl-13-vinyl- \$\$ D- pimaric acid 504569 000127-27-5 55	513439	001945-53-5	83
22	36.594	0.18	D:\DATABASE\DEMO.L KAUR-16-EN-18-OIC ACID \$\$ KAUR-16- 168418 020316-84-1 58			

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 6:03
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			EN-18-OIC ACID, (4.BETA.)- 55 (-)- KAURNENOIC ACID 55 (4-BETA.)-KAUR-1 6-EN-18-OIC ACID ROSIN ACIDS 504611 000000-00-0 53 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 7-E 466436 005835-26-7 49 THENYL-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,8,10,10 A-DODECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,7. ALPHA.,10A.ALPHA.)]- 55 ISOPIMARIC ACID 55 PODOCARP-7-EN-15-OIC ACID , 13.BETA.-METHYL-13-VINYL-			
23	36.740	0.27	D:\DATABASE\DEMO.L 1H-2,10A-ETHANOPHENANTHRENE, KAUR- 513651 006730-83-2 74 16-EN-18-OIC ACID DERIV. 55 KAUR-1 6-EN-18-OIC ACID 55 KAUR-16-EN-18- OIC ACID, (4.ALPHA.)- 55 (-)-ENT-K AUR-16-EN-19-OIC ACID Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb 513378 000514-10-3 60 oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid Androst-5-en-17-ol, 4,4-dimethyl- 513436 999513-44-9 55			
24	36.967	0.43	D:\DATABASE\DEMO.L 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2 503110 001740-19-8 98 ,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DI METHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1. ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- 55 (-)-DEHYDROABIETIC ACID 55 1,2,3,4, 4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHY L-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE CARBOXYLIC ACID 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 503093 001740-19-8 98 ,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1. alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- 55 P odocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid , 13-isopropyl- 55 Abieta-8,11,13- trien-18-oic acid 55 Abietic acid, dehydro- ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID 5 503106 999503-11-8 97 5 PODOCARPA-8,11,13-TRIEN-15-SAEUR E, 13-ISOPROPYL-			
25	37.032	0.56	D:\DATABASE\DEMO.L ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID 5 503106 999503-11-8 90 5 PODOCARPA-8,11,13-TRIEN-15-SAEUR E, 13-ISOPROPYL- 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2 503110 001740-19-8 53 ,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DI METHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1. ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- 55 (-)-DEHYDROABIETIC ACID 55 1,2,3,4, 4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHY L-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE			

058.M Thu Oct 10 09:08:02 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 6:03
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			CARBOXYLIC ACID			
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]-	503082	001740-19-8	53
			Podocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid, 13-isopropyl-	55		
			Abieta-8,11,13-trien-16-oic acid	55		
			Abietic acid, dehydro-			
26	37.259	0.41	D:\DATABASE\DEMO.L			
			1,4-DIHYDRO-9-ISOPROPYLIDENE-5,6,7,8-TETRAMETHOXY-1,4-METHANONAPHTHALENE	513581	000000-00-0	90
			Abietic acid	55		
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]-	513378	000514-10-3	53
			Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl-	55		
			L-abietic acid			
			Abietic acid	55		
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]-	513344	000514-10-3	50
			Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl-	55		
			L-abietic acid			
27	37.680	1.52	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Abietic acid	55		
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]-	513378	000514-10-3	99
			Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl-	55		
			L-abietic acid			
			Abietic acid	55		
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]-	513344	000514-10-3	95
			Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl-	55		
			L-abietic acid			
			2,2'-DIMETHYL-4,4',5,5'-TETRAMETHOXYBIPHENYL	513577	062012-51-5	90
			4,4',5,5'-TETRAMETHOXYBIPHENYL			
			1,1'-BIPHENYL			
28	38.831	0.04	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Abietic acid	55		
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]-	513344	000514-10-3	60
			Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl-	55		
			L-abietic acid			
			Retinoyl fluoride (all-trans)	55	1	513441 083802-77-1
			5-Fluororetinal			49
			Abietic acid	55		
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]-	513378	000514-10-3	47

058.M Thu Oct 10 09:08:02 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-1-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 6:03
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 2 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid			
29	38.993	0.16	D:\DATABASE\DEMO.L 2-Amino-4-(4-nitrophenyl)thiazole 55 Thiazole, 2-amino-4-(p-nitrophe nyl)- 55 2-Amino-4-(p-nitrophenyl) thiazole 55 2-Thiazolamine, 4-(4-n itrophenyl)- 1,4-Benzenediol, 2,5-bis(1,1-dimet hylpropyl)- 55 Hydroquinone, 2,5-d i-tert-pentyl- 55 Santovar A 55 2, 5-Bis(1,1-dimethylpropyl)-1,4-benz enediol 4-(m-Nitrophenyl)-2-thiazolamine 5 5 4-(3-Nitrophenyl)-1,3-thiazol-2- amine *	445349	002104-09-8	41
				445761	000079-74-3	35
				445400	057493-24-0	30

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-2-1-0-1persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 00:59 (#1); 5 Oct 2019 00:58 (#2)
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 3 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	1.957	3.97	D:\DATABASE\DEMO.L METHANOL \$\$ HYDROXYMETHANE \$\$ ALCOHOL, METHYL \$\$ ALCOOL METHYLIQUE Methyl Alcohol \$\$ Methanol \$\$ Carb inol \$\$ Methyl hydroxide 2-AMINO-1-PROPANOL \$\$ 1-PROPANOL, 2-AMINO- \$\$ 1-PROPANOL, 2-AMINO- (+..)- \$\$ 2-AMINOPROPAN-1-OL	5075 5072 5205	000067-56-1 000067-56-1 006168-72-5	2 2 2
2	2.135	0.08	D:\DATABASE\DEMO.L Pentane, 2,4-dimethyl- \$\$ 2,4-Dime thylpentane Pentane, 2,4-dimethyl- \$\$ 2,4-Dime thylpentane PENTANE, 2,4-DIMETHYL- \$\$ 2,4-DIME THYLPENTANE \$\$ PENTANE, 2,4-DIMETH YL	18750 18753 18833	000108-08-7 000108-08-7 000108-08-7	91 83 78
3	2.200	7.62	D:\DATABASE\DEMO.L HEXANE, 3-METHYL- \$\$ 3-METHYLHEXAN E \$\$ 2-ETHYLPENTANE \$\$ HEXANE, 3-M ETHYL Hexane, 3-methyl- \$\$ 2-Ethylpentan e \$\$ 3-Methylhexane HEPTANE \$\$ ALIPHATIC HYDROCARBON \$ \$ DIPROPYL METHANE \$\$ DIPROPYLMETH ANE	18994 18743 18986	000589-34-4 000589-34-4 000142-82-5	68 62 58
4	2.238	2.68	D:\DATABASE\DEMO.L Cyclopentane, 1,3-dimethyl- \$\$ 1,3 -Dimethylcyclopentane Cyclopentane, 1,3-dimethyl-, cis- \$\$ cis-1,3-Dimethylcyclopentane \$\$ 1,3-Dimethylcyclopentane cis \$\$ 1 ,3-Dimethylcyclopentane # 1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE \$\$ CYCLOP ENTANE, 1,3-DIMETHYL-, CIS- \$\$ 1,3 -DIMETHYLCYCLOPENTANE (CIS) \$\$ 1,3 -DIMETHYLCYCLOPENTANE CIS	101343 62231 62286	002453-00-1 002532-58-3 002532-58-3	94 93 93
5	2.330	4.06	D:\DATABASE\DEMO.L CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL OHEXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$ CYCLOHEXANE, METHYL Cyclohexane, methyl- \$\$ Cyclohexyl methane \$\$ Hexahydrotoluene \$\$ Met hylcyclohexane CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL OHEXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$ CYCLOHEXANE, METHYL	141469 141386 141467	000108-87-2 000108-87-2 000108-87-2	96 96 96
6	2.416	75.98	D:\DATABASE\DEMO.L 1,5-Heptadien-3-yne \$\$ (5E)-1,5-He ptadien-3-yne # BENZENE, METHYL- \$\$ METHYLBENZENE \$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A BENZENE, METHYL- \$\$ METHYLBENZENE \$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A	6415 158628 158624	003511-27-1 000108-88-3 000108-88-3	90 80 62

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\das\
 Data File : WLM-2-1-0-1persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 00:59 (#1); 5 Oct 2019 00:58 (#2)
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 3 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
7	2.746	0.44	D:\DATABASE\DEMO.L Cyclohexane, ethyl- exane	141525	001678-91-7	94
			Cyclohexane, ethyl- exane	141506	001678-91-7	87
			CYCLOHEXANE, ETHYL- EXANE	141558	001678-91-7	87
			ETHYL CYCLOHEXANE			
			LCYCLOHEXAN			
8	33.494	0.07	D:\DATABASE\DEMO.L RETINOL (ALL-E)-3,7-DIMETHYL-9- (2,6,6-TRIMETHYL-1-CYCLOHEXEN-1-YL)-2,4,6,8-NONATETRAEN-1-OL	13722	000068-26-8	44
			KAURA-5,16-DIEN-18-OL	492904	023837-99-2	42
			6-DIEN-18 (OR 19)-OL			
			KAURA-5,16- DIEN-19-OL	492860	023837-99-2	42
			Kaura-5,16-dien-18 (or 19)-ol			
			ura-5,16-dien-18-ol			
9	33.855	0.04	D:\DATABASE\DEMO.L 1-Methyl-10,18-bisnorabieta-8,11,1 3-triene	466158	999466-16-6	93
			10,13-DIMETHYL-4,5,6,7,8,9,10,11,1	466180	999466-18-8	91
			2,13,14,15-DODECAHYDRO-1H-CYCLOPEN TA[A]PHENANTHRENE			
			ANDROSTA-2,16 -DIENE			
			PHENANTHRENE, 1,2,3,4,4A,9,10,10A-	466224	019407-18-2	58
			OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHY LETHYL)-, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,1 0A.ALPHA.)]-			
			1,4A.BETA.-DIMETHY L-7-ISOPROPYL-1,2,3,4,4A,9,10,10A.			
			ALPHA.-OCTAHYDROPHENANTHRENE			
			19 -NORABIETATRIENE			
10	35.476	1.24	D:\DATABASE\DEMO.L (+)-CIS-3,4,6,9-TETRAHYDRO-10-HYD ROXY-7-METHOXY-1,3,8-TRIMETHYL-1H- NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-6,9-DIONE [(+)- -VENTILAGONE 7-METHYL ETHYL]	504601	124821-09-6	90
			BENZ[A]ANTHRACENONE	513655	099707-96-7	83
			ROSIN ACIDS	504611	000000-00-0	78
11	35.644	0.06	D:\DATABASE\DEMO.L ROSIN ACIDS	504611	000000-00-0	43
			Xanthen-9-one, 1-hydroxy-3,5,8-tri methoxy-	504583	049599-09-9	42
			5,8-Dimethylbellidifol in			
			1-Hydroxy-3,5,8-trimethoxyxa nthen-9-one			
			1-Hydroxy-3,5,8-tri methoxy-9H-xanthen-9-one			
			4-Androsten-6.beta.-ol-3,17-dione	513437	999513-45-0	38
12	35.746	0.13	D:\DATABASE\DEMO.L DEHYDROABIETIC ACID	464556	000000-00-0	93
			METHYL ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OAT E	464549	001235-74-1	90
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID , 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1, 4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, ME THYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.			

058.M Thu Oct 10 09:59:37 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-2-1-0-1persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 00:59 (#1); 5 Oct 2019 00:58 (#2)
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 3 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			,10A.ALPHA.))- \$S DEHYDROABIETIC A CID METHYL ESTER \$S METHYL DEHYDRO ABIETATE			
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, methyl ester, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,10a. alpha.)]- \$S Podocarpa-8,11,13-tri en-15-oic acid, 13-isopropyl-, met hyl ester \$S Methyl dehydroabietat	464536	001235-74-1	86
13	36.076	0.17	D:\DATABASE\DEMO.L PIMARA-8(14),15-DIEN-18-OIC ACID \$ \$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 7 -ETHENYL-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,9,10, 10A-DODECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA., 7.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$S (+)-PIMAR IC ACID \$S .ALPHA.-PIMARIC ACID	504609	000127-27-5	68
			1,2-Dihydro-4H-2-(p-anisyl)-3,1-be nzoxazine \$S 4H-3,1-Benzoxazine, 1 2-dihydro-2-(4-methoxyphenyl)- \$S 2-(4-Methoxyphenyl)-1,4-dihydro-2 H-3,1-benzoxazine #	257671	082085-87-8	25
			Thiophene-2-carbonitrile, 5-tert-b utyl-3-(4-chlorobenzylidenamino)-	504585	999504-59-7	20
14	36.378	0.03	D:\DATABASE\DEMO.L 10-DICYANOMETHYLENE-9-ANTHRONE METHYL ABIETA-7,13-DIEN-18-OATE \$S 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1, 2,3,4,4A,4B,5,6,10,10A-DECAHYDRO-1 4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, M	480259	000000-00-0	56
			ETHYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA .4B.ALPHA.,10A.ALPHA.)]- \$S ABALY N \$S ABIETIC ACID METHYL ESTER	480551	000127-25-3	49
			17-NORKAUR-9(11)-EN-18-OIC ACID, 1 6-OXO-, METHYL ESTER, (4.ALPHA.)- \$S 16-OXO-17-NOR-9(11)-KAUREN-18-C ARBOXYLIC ACID-METHYLESTER \$S 1H-2 ,10A-ETHANOPHENANTHRENE, 17-NORKAU R-9(11)-EN-18-OIC ACID DERIV.	466510	063558-42-9	46
15	36.578	0.27	D:\DATABASE\DEMO.L (+)-CIS-3,4,6,9-TETRAHYDRO-10-HYD ROXY-7-METHOXY-1,3,8-TRIMETHYL-1H- NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-6,9-DIONE [(+)- -VENTILAGONE 7-METHYL ETHYL]	504601	124821-09-6	90
			ROSIN ACIDS	504611	000000-00-0	49
			PINE ROSIN MIXTURE	504612	000000-00-0	49
16	36.729	0.22	D:\DATABASE\DEMO.L Abietic acid \$S 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$S Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- \$S L-abietic acid	513378	000514-10-3	89

358.M Thu Oct 10 09:59:37 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-2-1-0-1persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 00:59 (#1); 5 Oct 2019 00:58 (#2)
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 3 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			1,4-DIHYDRO-9-ISOPROPYLIDENE-5,6,7,8-TETRAMETHOXY-1,4-METHANONAPHTHALENE	513581	000000-00-0	83
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 7-E	466436	005835-26-7	62
			THENYL-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,8,10,10A-DODECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,7.ALPHA.,10A.ALPHA.)]- \$ \$ ISOPIMARIC ACID \$ \$ PODOCARP-7-EN-15-OIC ACID, 13.BETA.-METHYL-13-VINYL-			
17	36.951	0.43	D:\DATABASE\DEMO.L			
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$ \$ PODOCARPA-8,11,13-trien-15-oic acid, 13-isopropyl- \$ \$ Abieta-8,11,13-trien-18-oic acid \$ \$ Abietic acid, dehydro-	503093	001740-19-8	99
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$ \$ (-)-DEHYDROABIETIC ACID \$ \$ 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE CARBOXYLIC ACID	503110	001740-19-8	99
			ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID \$ \$ PODOCARPA-8,11,13-TRIEN-15-SAEUR E, 13-ISOPROPYL-	503106	999503-11-8	98
18	37.010	0.51	D:\DATABASE\DEMO.L			
			ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID \$ \$ PODOCARPA-8,11,13-TRIEN-15-SAEUR E, 13-ISOPROPYL-	503106	999503-11-8	90
			2,7-PHENANTHRENEDIOL, 9,10-DIHYDRO-3,4,6-TRIMETHOXY- \$ \$ 2,7-DIHYDROXY-3,4,6-TRIMETHOXY-9,10-DIHYDROPHENANTRENE	513565	039499-93-9	72
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$ \$ PODOCARPA-8,11,13-trien-15-oic acid, 13-isopropyl- \$ \$ Abieta-8,11,13-trien-18-oic acid \$ \$ Abietic acid, dehydro-	503093	001740-19-8	68
19	37.210	0.22	D:\DATABASE\DEMO.L			
			BENZALDEHYDE, 2-(2-DIBENZOTHIENYLMETHYL)- \$ \$ 2-(2-FORMYLBENZYL)DIBENZOTHIOPHENE \$ \$ DIBENZOTHIOPHENE, BENZALDEHYDE DERIV.	513632	087643-07-0	64
			Abietic acid \$ \$ 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$ \$ Podo	513344	000514-10-3	51

158.M Thu Oct 10 09:59:37 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-2-1-0-1persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 00:59 (#1); 5 Oct 2019 00:58 (#2)
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 3 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is			
			opropyl- 55 L-abietic acid			
			BENZ[A]ANTHRACENONE	513655	099707-96-7	47
20	37.675	1.77	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb	513378	000514-10-3	99
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,			
			10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m			
			ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet			
			a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo			
			carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is			
			opropyl- 55 L-abietic acid			
			Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb	513344	000514-10-3	94
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,			
			10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m			
			ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet			
			a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo			
			carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is			
			opropyl- 55 L-abietic acid			
			Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb	513347	000514-10-3	90
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,			
			10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m			
			ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet			
			a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo			
			carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is			
			opropyl- 55 L-abietic acid			

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\das\
 Data File : WLM-2-1-0-2persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 6:52
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 3 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	1.962	2.59	D:\DATABASE\DEMO.L Methyl Alcohol \$\$ Methanol \$\$ Carb inol \$\$ Methyl hydroxide METHANOL \$\$ HYDROXYMETHANE \$\$ ALCO HOL, METHYL \$\$ ALCOOL METHYLIQUE Methyl Alcohol \$\$ Methanol \$\$ Carb inol \$\$ Methyl hydroxide	5073 5075 5072	000067-56-1 000067-56-1 000067-56-1	2 2 2
2	2.135	0.06	D:\DATABASE\DEMO.L Pentane, 2,4-dimethyl- \$\$ 2,4-Dime thylpentane PENTANE, 2,4-DIMETHYL- \$\$ 2,4-DIME THYLPENTANE \$\$ PENTANE, 2,4-DIMETH YL 2-AZIDO-2,3-DIMETHYLBUTANE	18750 18833 20753	000108-08-7 000108-08-7 091633-20-4	91 83 78
3	2.200	6.58	D:\DATABASE\DEMO.L Hexane, 3-methyl- \$\$ 2-Ethylpentan e \$\$ 3-Methylhexane HEPTANE \$\$ ALIPHATIC HYDROCARBON \$ \$ DIFROPYL METHANE \$\$ DIFROPYLMETH ANE Hexane, 3-methyl- \$\$ 2-Ethylpentan e \$\$ 3-Methylhexane	18743 18986 18754	000589-34-4 000142-82-5 000589-34-4	58 58 58
4	2.243	2.42	D:\DATABASE\DEMO.L 1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE \$\$ CYCLOP ENTANE, 1,3-DIMETHYL-, CIS- \$\$ 1,3 -DIMETHYLCYCLOPENTANE (CIS) \$\$ 1,3 -DIMETHYLCYCLOPENTANE CIS Cyclopentane, 1,3-dimethyl-, cis- \$\$ cis-1,3-Dimethylcyclopentane \$\$ 1,3-Dimethylcyclopentane cis \$\$ 1 1,3-Dimethylcyclopentane # Cyclopentane, 1,2-dimethyl-, cis- \$\$ cis-1,2-Dimethylcyclopentane \$\$ 1,cis-2-Dimethylcyclopentane \$\$ 1 2-Dimethylcyclopentane #	62286 62231 62234	002532-56-3 002532-56-3 001192-18-3	93 93 90
5	2.335	3.81	D:\DATABASE\DEMO.L CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL OHEXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$ CYCLOHEXANE, METHYL Cyclohexane, methyl- \$\$ Cyclohexyl methane \$\$ Hexahydrotoluene \$\$ Met hylcyclohexane CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL OHEXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$ CYCLOHEXANE, METHYL	141469 141386 141467	000108-87-2 000108-87-2 000108-87-2	96 96 96
6	2.421	78.57	D:\DATABASE\DEMO.L BENZENE, METHYL- \$\$ METHYLBENZENE \$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A 1,5-Heptadien-3-yne \$\$ (5E)-1,5-He ptadien-3-yne # BENZENE, METHYL- \$\$ METHYLBENZENE \$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A	158628 6415 158624	000108-88-3 003511-27-1 000108-88-3	90 83 70
7	2.745	0.47	D:\DATABASE\DEMO.L			

058.M Thu Oct 10 10:01:17 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-2-1-0-2persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 6:52
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 3 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			CYCLOHEXANE, ETHYL- §§ ETHYLCYCLOH EXANE §§ ETHYL CYCLOHEXANE §§ ETHY LCYCLOHEXAN	141558	001678-91-7	94
			CYCLOHEXANE, ETHYL- §§ ETHYLCYCLOH EXANE §§ ETHYL CYCLOHEXANE §§ ETHY LCYCLOHEXAN	141562	001678-91-7	94
			CYCLOHEXANE, ETHYL- §§ ETHYLCYCLOH EXANE §§ ETHYL CYCLOHEXANE §§ ETHY LCYCLOHEXAN	141563	001678-91-7	81
8	30.214	0.07	D:\DATABASE\DEMO.L 2-Ethylthio-5-chloro-pyrimidin-4(3 H)-one §§ 5-Chloro-2-(ethylsulfany 1)-4(3H)-pyrimidinone #	402529	106146-79-6	50
			CYCLOHEXANE, (4,4-DIMETHYL-1-METHY LENE-2-PENTYNYL)- §§ 2-CYCLOHEXYL- 5,5-DIMETHYL-1-HEXEN-3-YNE	402788	090753-23-4	27
			METHYL 5-((2)-[5-((2)-((5Z)-5-[(2- CYANO-2,3,3-TRIMETHYL-3,4-DIHYDRO- 2H-PYRROL-5-YL)METHYLENE]-4,4-DIME THYLPYRROLIDINYLIDENE)METHYL)-3,4- DIMETHYL-2H-PYRROL-2-YLIDENE]METHY L)-3,4-DIMETHYL-1H-PYRROLE-2-C §§ 6,10-DITHIASPIRO[4.5]DECAN-1-OL	402636	070067-95-7	25
9	30.538	0.10	D:\DATABASE\DEMO.L 2-Ethylthio-5-chloro-pyrimidin-4(3 H)-one §§ 5-Chloro-2-(ethylsulfany 1)-4(3H)-pyrimidinone #	402529	106146-79-6	80
			NAPHTHALENE, 1,2-DIHYDRO-3,5-DIMET HOXY- §§ 1,2-DIHYDRO-3,5-DIMETHOXY NAPHTHALENE §§ 5,6-DIHYDRO-1,7-DIM ETHOXYNAPHTHALENE	402754	065472-37-9	38
			Megastigmatrienone §§ 4-[(1E)-1,3- Butadienyl]-3,5,5-trimethyl-2-cycl ohexen-1-one #	402523	038818-55-2	38
10	30.868	0.03	D:\DATABASE\DEMO.L 7-METHYLBENZ[C]ACRIDINE 1H-BENZ[5,6]ANTHRA[1,2-B]AZIRINE, 1A,11B-DIHYDRO- §§ 1A,11B-DIHYDROB ENZ[5,6]ANTHRA[1,2-B]AZIRINE	468095	000000-00-0	78
			5-METHYLBENZO[C]ACRIDINE §§ BENZ[C)ACRIDINE, 5-METHYL- §§ 5-METHYLBE NZ(C)ACRIDINE §§ 5-METHYLBENZO(C)A CRIDINE	468089	089817-08-3	78
			5-METHYLBENZO[C]ACRIDINE §§ BENZ[C)ACRIDINE, 5-METHYL- §§ 5-METHYLBE NZ(C)ACRIDINE §§ 5-METHYLBENZO(C)A CRIDINE	468083	003519-87-7	64
11	31.192	0.05	D:\DATABASE\DEMO.L 1-(3,5-Bis-trifluoromethylphenyl)e thanol	468128	999468-13-6	72
			8H-Pyrano[2,3-e]benzothiophen-8-on e, 4-Formamido-6-methyl-	467956	999467-96-4	64
			1-Pentanol, 5,5,5-triphenyl- §§ 5, 5,5-Triphenyl-1-pentanol #	468454	002294-95-3	59
12	31.684	0.08	D:\DATABASE\DEMO.L 1-METHOXY-6,6A,7,8-TETRAHYDRO-6,6- DIMETHYL-9H-DIBENZO[B,D]PYRAN-9-ON 12-METHOXY-19-NORPODOCARPA-8,11,13	481992	130799-45-0	91
				482007	000000-00-0	78

058.M Thu Oct 10 10:01:17 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-2-1-0-2persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 6:52
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 3 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			-TETRAEN-3-ONE			
			12-METHOXY-18-NORPODOCARPA-8,11,13	482008	000000-00-0	78
			-TRIEN-3-ONE			
13	31.975	0.07	D:\DATABASE\DEMO.L			
			1,1':2',1"-TERPHENYL, 4'-ETHYL- §§	482059	061875-99-8	91
			4-ETHYL-1,2-DIPHENYL-BENZENE §§ 4			
			-ETHYL-1,2-DIPHENYLBENZENE §§ O-TE			
			RPHENYL, 4'-ETHYL-			
			3,4-DIHYDRO-7,12-DIMETHYLBENZ[A]AN	482069	000000-00-0	90
			THRACENE			
			12-METHOXY-18-NORPODOCARPA-8,11,13	482008	000000-00-0	90
			-TRIEN-3-ONE			
14	33.045	0.04	D:\DATABASE\DEMO.L			
			5-(4-HEPTYL-CYCLOHEXYL)-PYRIDINE-2	502195	999502-20-7	42
			-CARBONITRILE §§ 5-(4-HEPTYLCYCLOH			
			EXYL)-2-PYRIDINECARBONITRILE			
			Phosphorin, 2,6-bis(1,1-dimethylet	502013	017420-27-8	41
			hyl)-4-phenyl- §§ 2,6-Ditert-butyl			
			-4-phenylphosphinine #			
			2,6-DITERT-BUTYL-4-PHENYLPHOSPHINI	502186	017420-27-8	41
			NE §§ PHOSPHORIN, 2,6-BIS(1,1-DIME			
			THYLETHYL)-4-PHENYL-			
15	33.131	0.05	D:\DATABASE\DEMO.L			
			2,6-DITERT-BUTYL-4-PHENYLPHOSPHINI	502359	017420-27-8	70
			NE §§ PHOSPHORIN, 2,6-BIS(1,1-DIME			
			THYLETHYL)-4-PHENYL-			
			2,6-DITERT-BUTYL-4-PHENYLPHOSPHINI	502186	017420-27-8	70
			NE §§ PHOSPHORIN, 2,6-BIS(1,1-DIME			
			THYLETHYL)-4-PHENYL-			
			Phosphorin, 2,6-bis(1,1-dimethylet	502013	017420-27-8	70
			hyl)-4-phenyl- §§ 2,6-Ditert-butyl			
			-4-phenylphosphinine #			
16	33.493	0.06	D:\DATABASE\DEMO.L			
			1,3,7,8,10-PENTAMETHYL-(1,5-DIHYDR	492882	000000-00-0	43
			O)-ALLOXAZINE			
			Kaura-5,16-dien-18(or 19)-ol §§ Ka	492860	023837-99-2	38
			ura-5,16-dien-18-ol #			
			FIMARA-8(14),15-DIEN-18-AL §§ 1-PH	481208	000472-39-9	38
			ENANTHRENECARBOXALDEHYDE, 7-ETHENY			
			L-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,9,10,10A-DOD			
			ECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-, [1R-(1			
			.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,7.BETA.			
			,10A.ALPHA.)]- §§ CRYPTOPINON §§ C			
			RYPTOPINONE			
17	33.855	0.10	D:\DATABASE\DEMO.L			
			1-Methyl-10,18-bisnorabieta-8,11,1	466158	999466-16-6	93
			3-triene			
			3,3,4,5,5,8-HEXAMETHYL-3,5,6,7-TET	466221	038754-94-8	89
			RAHYDRO-S-INDACEN-1(2H)-ONE §§ S-I			
			NDACEN-1(2H)-ONE, 3,5,6,7-TETRAHYD			
			RO-3,3,4,5,5,8-HEXAMETHYL- §§ 3,3,			
			4,5,5,8-HEXAMETHYL-1-S-HYDRINDACEN			
			ONE			
			s-Indacen-1(2H)-one, 3,5,6,7-tetra	466171	038754-94-8	89

158.M Thu Oct 10 10:01:17 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-2-1-0-2persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 6:52
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 3 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			hydro-3,3,4,5,5,8-hexamethyl- 55 3 3,4,5,5,8-Hexamethyl-3,5,6,7-tetr ahydro-S-indacen-1(2H)-one #			
18	35.298	0.02	D:\DATABASE\DEMO.L 1-(1'-METHYLALLENYL)-2-ETHENYL CYCL HEXANE 207629 000000-00-0 59 3-DIETHYLBORYL-2-TRIMETHYLGERMANYL 250295 000000-00-0 25 -2-PENTENE Carbamic acid, N-(4-methylphenyl)- 286846 128897-40-5 25 , oxiranymethyl ester 55 2-Oxiran ymethyl 4-methylphenylcarbamate #			
19	35.389	0.02	D:\DATABASE\DEMO.L Tetrazole, 5-(2-fluorobenzylthio)- 229374 335402-63-6 46 1-(3,4-methylenedioxyphenyl)- 55 1 -(1,3-Benzodioxol-5-yl)-1H-tetraaz ol-5-yl 2-fluorobenzyl sulfide # 2-(ACETYLAMINO)PHENYL ACETATE 55 A 227934 999227-93-7 46 CETIC ACID 2-ACETYLAMINO-PHENYL ES TER Phenol, 3-amino- 55 m-Hydroxvanili 226735 000591-27-5 38 ne 55 Phenol, m-amino- 55 m-Aminop henol			
20	35.481	1.02	D:\DATABASE\DEMO.L (+)-CIS-3,4,6,9-TETRAHYDRO-10-HYD 504601 124821-09-6 90 ROXY-7-METHOXY-1,3,8-TRIMETHYL-1H- NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-6,9-DIONE[(+)- -VENTILAGONE 7-METHYL ETHYL] BENZ[A]ANTHRACENONE 513655 099707-96-7 83 ROSIN ACIDS 504611 000000-00-0 78			
21	35.665	0.07	D:\DATABASE\DEMO.L PIMARA-8(14),15-DIEN-18-OIC ACID 5 504608 000127-27-5 48 5 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 7 -ETHENYL-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,9,10, 10A-DODECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA., 7.BETA.,10A.ALPHA.)]- 55 (+)-PIMAR IC ACID 55 .ALPHA.-PIMARIC ACID Pimaric acid 55 1-Phenanthrenecarb 504569 000127-27-5 48 oxylic acid, 7-ethenyl-1,2,3,4,4a, 4b,5,6,7,9,10,10a-dodecahydro-1,4a ,7-trimethyl-, [1R-(1.alpha.,4a.be ta.,4b.alpha.,7.beta.,10a.alpha.)] - 55 Podocarp-8(14)-en-15-oic acid , 13.alpha.-methyl-13-vinyl- 55 D- pimaric acid BENZOIC ACID, 4,5-DIMETHOXY-2-NITR 465970 026791-93-5 43 O-, METHYL ESTER 55 VERATRIC ACID, 6-NITRO-, METHYL ESTER 55 4,5-DIM ETHOXY-2-NITROBENZOIC ACID, METHYL ESTER 55 METHYL 3,4-DIMETHOXY-6-N ITROBENZOATE			
22	35.751	0.13	D:\DATABASE\DEMO.L DEHYDROABIETIC ACID 464556 000000-00-0 97 METHYL ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OAT 464550 001235-74-1 95			

058.M Thu Oct 10 10:01:17 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-2-1-0-2persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 6:52
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 3 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

%#	RT	Area#	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			E \$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, METHYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$ DEHYDROABIETIC ACID METHYL ESTER \$ METHYL DEHYDROABIETATE			
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, methyl ester, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$ Podocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid, 13-isopropyl-, methyl ester \$ Methyl dehydroabietat	464538	001235-74-1	95
23	35.930	0.08	D:\DATABASE\DEMO.L Pimaric acid \$ 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 7-ethenyl-1,2,3,4,4a,4b,5,6,7,9,10,10a-dodecahydro-1,4a,7-trimethyl-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,7.beta.,10a.alpha.)]- \$ Podocarp-8(14)-en-15-oic acid, 13.alpha.-methyl-13-vinyl- \$ D-pimaric acid	466434	000127-27-5	45
			3-ACETYL-1-METHYL-2-(1'-METHYL-1H-INDOL-2'-YL)-1H-INDOLE	513641	000000-00-0	43
			Palustric acid \$ Podocarpa-8,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl- \$ 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,5,6,9,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$ 8,13-Abietadien-18-oic acid	513439	001945-53-5	38
24	36.086	0.09	D:\DATABASE\DEMO.L 1H-NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-5,10-DIONE, 3,4-DIHYDRO-7,9-DIMETHOXY-1,3-DIMETHYL-, CIS-(+.-)- \$ (+,-)-CIS-7,9-DIMETHOXY-1,3-DIMETHYL-3,4,5,10-TETRAHYDRONAPHTHO[2,3-C]PYRAN-5,10-DIONE	513558	084018-43-9	90
			BENZ[A]ANTHRACENONE	513655	099707-96-7	90
			1H-NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-5,10-DIONE, 3,4-DIHYDRO-7,9-DIMETHOXY-1,3-DIMETHYL-, TRANS-(+.-)- \$ (+,-)-DEOXYQUINONE A DIMETHYL ETHER \$ (+,-)-TRANS-7,9-DIMETHOXY-1,3-DIMETHYL-3,4,5,10-TETRAHYDRONAPHTHO[2,3-C]PYRAN-5,10-DIONE	513557	084018-44-0	90
25	36.383	0.02	D:\DATABASE\DEMO.L Pimaric acid \$ 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 7-ethenyl-1,2,3,4,4a,4b,5,6,7,9,10,10a-dodecahydro-1,4a,7-trimethyl-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,7.beta.,10a.alpha.)]- \$ Podocarp-8(14)-en-15-oic acid, 13.alpha.-methyl-13-vinyl- \$ D-pimaric acid	466434	000127-27-5	86

058.M Thu Oct 10 10:01:17 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-2-1-0-2persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 6:52
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 3 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			1H-NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-5,10-DIONE, 3,4-DIHYDRO-7,9-DIMETHOXY-1,3-DIMETHYL-, TRANS-(+,-)- \$\$ (+,-)-DEOXYQUINONE A DIMETHYL ETHER \$\$ (+,-)-TRANS-7,9-DIMETHOXY-1,3-DIMETHYL-3,4,5,10-TETRAHYDRONAPHTHO[2,3-C]PYRAN-5,10-DIONE	513557	084018-44-0	68
			METHYL PIMARA-7,15-DIEN-18-OATE \$\$	466517	001686-62-0	56
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 7-ETHENYL-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,8,10,10A-DODECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-, METHYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BET A.,4B.ALPHA.,7.ALPHA.,10A.ALPHA.)]- \$\$ ISOPIMARATE \$\$ ISOPIMARIC ACID, METHYL ESTER			
26	36.589	0.11	D:\DATABASE\DEMO.L			
			BENZ[A]ANTHRACENONE	513655	099707-96-7	83
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 7-E THENYL-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,8,10,10 A-DODECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,7. ALPHA.,10A.ALPHA.)]- \$\$ ISOPIMARIC ACID \$\$ PODOCARP-7-EN-15-OIC ACID , 13.BETA.-METHYL-13-VINYL-ROSIN ACIDS	466436	005835-26-7	78
				504611	000000-00-0	68
27	36.740	0.22	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Abietic acid \$\$ 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$\$ Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- \$\$ L-abietic acid	513378	000514-10-3	86
			1H-2,10A-ETHANOPHENANTHRENE, KAUR- 16-EN-18-OIC ACID DERIV. \$\$ KAUR-1 6-EN-18-OIC ACID \$\$ KAUR-16-EN-18- OIC ACID, (4.ALPHA.)- \$\$ (-)-ENT-K AUR-16-EN-19-OIC ACID	513651	006730-83-2	81
			2-ACETYL-4,9-DIMETHOXY-7-METHYL-5H -FURO[3,2-G][1]-BENZOPYRAN-5-ONE	513538	092611-83-1	46
28	36.848	0.03	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Abietic acid \$\$ 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$\$ Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- \$\$ L-abietic acid	513344	000514-10-3	64
			Abietic acid \$\$ 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$\$ Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- \$\$ L-abietic acid	513378	000514-10-3	55
			Pimaric acid \$\$ 1-Phenanthrenecarb	466434	000127-27-5	53

058.M Thu Oct 10 10:01:17 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-2-1-0-2persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 6:52
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 3 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			oxylic acid, 7-ethenyl-1,2,3,4,4a, 4b,5,6,7,9,10,10a-dodecahydro-1,4a, 7-trimethyl-, [1R-(1.alpha.,4a.be ta.,4b.alpha.,7.beta.,10a.alpha.)] - 55 Podocarp-8(14)-en-15-oic acid , 13.alpha.-methyl-13-vinyl- 55 D- pimaric acid			
29	36.972	0.70	D:\DATABASE\DEMO.L 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2 ,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DI METHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1. ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- 55 (-)-DEHYDROABIETIC ACID 55 1,2,3,4, 4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHY L-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE CARBOXYLIC ACID	503110	001740-19-8	99
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 ,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1. alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- 55 P odocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid , 13-isopropyl- 55 Abieta-8,11,13- trien-18-oic acid 55 Abietic acid, dehydro-	503093	001740-19-8	99
			ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID 5 5 PODOCARPA-8,11,13-TRIEN-15-SAEUR E, 13-ISOPROPYL-	503106	999503-11-8	99
30	37.037	0.52	D:\DATABASE\DEMO.L 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 ,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1. alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- 55 P odocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid , 13-isopropyl- 55 Abieta-8,11,13- trien-18-oic acid 55 Abietic acid, dehydro-	503093	001740-19-8	93
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2 ,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DI METHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1. ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- 55 (-)-DEHYDROABIETIC ACID 55 1,2,3,4, 4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHY L-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE CARBOXYLIC ACID	503110	001740-19-8	93
			ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID 5 5 PODOCARPA-8,11,13-TRIEN-15-SAEUR E, 13-ISOPROPYL-	503106	999503-11-8	93
31	37.221	0.34	D:\DATABASE\DEMO.L ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID 5 5 PODOCARPA-8,11,13-TRIEN-15-SAEUR E, 13-ISOPROPYL-	503106	999503-11-8	95
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2 ,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DI METHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1. ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- 55 (-)-DEHYDROABIETIC ACID 55 1,2,3,4,	503110	001740-19-8	86

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\das\
 Data File : WLM-2-1-0-2persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 6:52
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 3 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area#	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE CARBOXYLIC ACID			
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]-	503093	001740-19-8	86
			Podocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid, 13-isopropyl-			
			Abieta-8,11,13-trien-18-oic acid			
			Abietic acid, dehydro-			
32	37.685	1.46	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Abietic acid	513378	000514-10-3	99
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]-			
			Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl-			
			L-abietic acid			
			Abietic acid	513344	000514-10-3	93
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]-			
			Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl-			
			L-abietic acid			
			1,4-DIHYDRO-9-ISOPROPYLIDENE-5,6,7,8-TETRAMETHOXY-1,4-METHANONAPHTHALENE	513581	000000-00-0	90

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-2-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 5:14
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	1.962	3.51	D:\DATABASE\DEMO.L Methyl Alcohol §§ Methanol §§ Carb inol §§ Methyl hydroxide METHANOL §§ HYDROXYMETHANE §§ ALCO HOL, METHYL §§ ALCOOL METHYLIQUE Methyl Alcohol §§ Methanol §§ Carb inol §§ Methyl hydroxide	5073	000067-56-1	2
				5075	000067-56-1	2
				5072	000067-56-1	2
2	2.135	0.07	D:\DATABASE\DEMO.L Pentane, 2,4-dimethyl- §§ 2,4-Dime thylpentane PENTANE, 2,4-DIMETHYL- §§ 2,4-DIME THYLPENTANE §§ PENTANE, 2,4-DIMETH YL PENTANE, 2,4-DIMETHYL- §§ 2,4-DIME THYLPENTANE §§ PENTANE, 2,4-DIMETH YL	18750	000108-08-7	90
				19002	000108-08-7	86
				18833	000108-08-7	86
3	2.205	6.94	D:\DATABASE\DEMO.L HEXANE, 3-METHYL- §§ 3-METHYLHEXAN E §§ 2-ETHYLPENTANE §§ HEXANE, 3-M ETHYL HEXANE, 3-METHYL- §§ 3-METHYLHEXAN E §§ 2-ETHYLPENTANE §§ HEXANE, 3-M ETHYL Hexane, 3-methyl- §§ 2-Ethylpentan e §§ 3-Methylhexane	18994	000589-34-4	74
				18993	000589-34-4	64
				18754	000589-34-4	64
4	2.243	2.48	D:\DATABASE\DEMO.L 1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE §§ CYCLOP ENTANE, 1,3-DIMETHYL-, CIS- §§ 1,3 -DIMETHYLCYCLOPENTANE (CIS) §§ 1,3 -DIMETHYLCYCLOPENTANE CIS ----- Cyclopentane, 1,3-dimethyl-, cis- §§ cis-1,3-Dimethylcyclopentane §§ 1,3-Dimethylcyclopentane cis §§ 1 ,3-Dimethylcyclopentane # 1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE §§ CYCLOP ENTANE, 1,2-DIMETHYL-, CIS- §§ 1,2 -DIMETHYLCYCLOPENTANE (CIS) §§ 1,2 -DIMETHYLCYCLOPENTANE, CIS	62286	002532-58-3	93
				62231	002532-58-3	93
				62283	001192-18-3	90
5	2.335	3.79	D:\DATABASE\DEMO.L CYCLOHEXANE, METHYL- §§ METHYLCYCL OHEXANE §§ 1-METHYLCYCLOHEXANE §§ CYCLOHEXANE, METHYL CYCLOHEXANE, METHYL- §§ METHYLCYCL OHEXANE §§ 1-METHYLCYCLOHEXANE §§ CYCLOHEXANE, METHYL Cyclohexane, methyl- §§ Cyclohexyl methane §§ Hexahydrotoluene §§ Met hylcyclohexane	141469	000108-87-2	96
				141467	000108-87-2	96
				141386	000108-87-2	96
6	2.421	77.16	D:\DATABASE\DEMO.L 1,5-Heptadien-3-yne §§ (5E)-1,5-He ptadien-3-yne # BENZENE, METHYL- §§ METHYLBENZENE §§ TOLUENE §§ ANTISAL 1A BENZENE, METHYL- §§ METHYLBENZENE	6415	003511-27-1	83
				158628	000108-88-3	80
				158606	000108-88-3	70

058.M Thu Oct 10 10:02:38 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-2-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 5:14
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area#	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			\$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A			
7	2.745	0.45	D:\DATABASE\DEMO.L CYCLOHEXANE, ETHYL- \$\$ ETHYLCYCLOH EXANE \$\$ ETHYL CYCLOHEXANE \$\$ ETHY LCYCLOHEXAN Cyclohexane, ethyl- \$\$ Ethylcycloh exane CYCLOHEXANE, ETHYL- \$\$ ETHYLCYCLOH EXANE \$\$ ETHYL CYCLOHEXANE \$\$ ETHY LCYCLOHEXAN	141562	001678-91-7	95
			D:\DATABASE\DEMO.L KAURA-5,16-DIEN-18-OL \$\$ KAURA-5,1 6-DIEN-18(OR 19)-OL \$\$ KAURA-5,16- DIEN-19-OL PREGN-11-ENE \$\$ 5.BETA.-PREGN-11-E NE \$\$ 5BETA-PREGN-11-ENE 5.beta.-Pregn-11-ene \$\$ Pregn-11-e ne *	492904	023837-99-2	72
8	33.493	0.07	D:\DATABASE\DEMO.L 10,13-DIMETHYL-4,5,6,7,8,9,10,11,1 2,13,14,15-DODECAHYDRO-1H-CYCLOPEN TA[A]PHENANTHRENE \$\$ ANDROSTA-2,16 -DIENE 1-Methyl-10,18-bisnorabieta-8,11,1 3-triene 8H-[1,2,4]Triazino[4,3-b][1,2,4]tr iazin-8-one, 4,9-dihydro-7-methyl- 3-phenyl-	466180	999466-18-8	95
			D:\DATABASE\DEMO.L 2H-1,4-BENZODIAZEPIN-2-ONE, 7-CHLO RO-1,3-DIHYDRO-3-HYDROXY-5-PHENYL- \$\$ (+)-OXAZEPAM \$\$ (RS)-OXAZEPAM \$\$ 1,3-DIHYDRO-7-CHLORO-3-HYDROXY -5-PHENYL-2H-1,4-BENZODIAZEPIN-2-O NE Phenanthrene, 7-ethenyl-1,2,3,4,4a ,5,6,7,8,9,10,10a-dodecahydro-1,1, 4a,7-tetramethyl- \$\$ Pimara-8,15-d iene * PIMARA-8,15-DIENE \$\$ PHENANTHRENE, 7-ETHENYL-1,2,3,4,4A,5,6,7,8,9,10 ,10A-DODECAHYDRO-1,1,4A,7-TETRAMET HYL- \$\$ 7.ALPHA.-ETHENYL-1,1,4A,7. BETA.-TETRAMETHYL-1,2,3,4,4A,5,6,7 ,8,9,10,10A-DODECAHYDROPHENANTHREN	481202	000604-75-1	43
10	34.541	0.04	D:\DATABASE\DEMO.L Phenanthrene, 7-ethenyl-1,2,3,4,4a ,5,6,7,8,9,10,10a-dodecahydro-1,1, 4a,7-tetramethyl- \$\$ Pimara-8,15-d iene * PIMARA-8,15-DIENE \$\$ PHENANTHRENE, 7-ETHENYL-1,2,3,4,4A,5,6,7,8,9,10 ,10A-DODECAHYDRO-1,1,4A,7-TETRAMET HYL- \$\$ 7.ALPHA.-ETHENYL-1,1,4A,7. BETA.-TETRAMETHYL-1,2,3,4,4A,5,6,7 ,8,9,10,10A-DODECAHYDROPHENANTHREN	481092	055255-56-6	38
			D:\DATABASE\DEMO.L (+)-CIS-3,4,6,9-TETRAHYDRO-10-HYD ROXY-7-METHOXY-1,3,8-TRIMETHYL-1H- NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-6,9-DIONE[(+)- -VENTILAGONE 7-METHYL ETHYL] Xanthen-9-one, 1-hydroxy-3,5,8-tri methoxy- \$\$ 5,8-Dimethylbellidifol in \$\$ 1-Hydroxy-3,5,8-trimethoxyxa nthen-9-one \$\$ 1-Hydroxy-3,5,8-tri	504601	124821-09-6	90
11	35.476	0.97	D:\DATABASE\DEMO.L (+)-CIS-3,4,6,9-TETRAHYDRO-10-HYD ROXY-7-METHOXY-1,3,8-TRIMETHYL-1H- NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-6,9-DIONE[(+)- -VENTILAGONE 7-METHYL ETHYL] Xanthen-9-one, 1-hydroxy-3,5,8-tri methoxy- \$\$ 5,8-Dimethylbellidifol in \$\$ 1-Hydroxy-3,5,8-trimethoxyxa nthen-9-one \$\$ 1-Hydroxy-3,5,8-tri	504583	049599-09-9	83

056.M Thu Oct 10 10:02:38 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-2-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 5:14
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			methoxy-9H-xanthen-9-one #			
			BENZ[A]ANTHRACENONE	513655	099707-96-7	80
12	35.665	0.06	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Phenol, 2,4-bis(1-phenylethyl)-	504578	002769-94-0	49
			2,4-Bis(1-phenylethyl)phenol #			
			ANDROST-16-ENE-17-CARBOXYLIC ACID	504607	054411-93-7	45
			ANDROST-16-ENE-17-CARBOXYLIC ACID, (5.ALPHA.)-			
			ANDROST-16-ENE-17-CARBOXYLIC ACID, (5ALPHA.)-			
			Androst-16-ene-17-carboxylic acid, (5.alpha.)-	504579	054411-93-7	45
			Androst-16-ene-17-carboxylic acid #			
13	35.751	0.14	D:\DATABASE\DEMO.L			
			DEHYDROABIETIC ACID	464556	000000-00-0	96
			METHYL ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OAT	464543	999464-55-1	93
			E \$ \$ PHENANTHREN-1-CARBOXYLIC ACID, 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-7-ISO			
			PROPYL-1,4A-DIMETHYL-, METHYLESTER			
			(DEHYDROABIETINSAEUREMETHYLESTER)			
			METHYL ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OAT	464548	001235-74-1	93
			E \$ \$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, ME			
			THYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$ \$ DEHYDROABIETIC A			
			CID METHYL ESTER \$ \$ METHYL DEHYDRO			
			ABIETATE			
14	36.086	0.28	D:\DATABASE\DEMO.L			
			PIMARA-8(14),15-DIEN-18-OIC ACID \$	504609	000127-27-5	64
			\$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 7-ETHENYL-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,9,10,10A-DODECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,7.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$ \$ (+)-PIMARIC ACID \$ \$.ALPHA.-PIMARIC ACID			
			INDOLIZINO[1,2-B]QUINOLIN-9(11H)-O	504762	054318-62-6	49
			NE, 8-[(FORMYLOXY)METHYL]-7-(1-OXO			
			PROPYL)- \$ \$ 8-FORMYLOXYMETHYL-7-(1-OXOPROPYL)INDOLIZINO[1,2-B]QUINOLIN-9(11H)-ONE			
			Pimaric acid \$ \$ 1-Phenanthrenecarb	504569	000127-27-5	38
			oxylic acid, 7-ethenyl-1,2,3,4,4a,4b,5,6,7,9,10,10a-dodecahydro-1,4a,7-trimethyl-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,7.beta.,10a.alpha.)]- \$ \$ Podocarp-8(14)-en-15-oic acid, 13.alpha.-methyl-13-vinyl- \$ \$ D-pimaric acid			
15	36.211	0.04	D:\DATABASE\DEMO.L			
			BENZ[A]ANTHRACENONE	513655	099707-96-7	91
			KAUR-16-EN-18-OIC ACID \$ \$ KAUR-16-EN-18-OIC ACID, (4.BETA.)-	168418	020316-84-1	64
			\$ \$ (-)-KAURNOIC ACID \$ \$ (4-BETA.)-KAUR-16-EN-18-OIC ACID			
			Phenol, 2,4-bis(1-phenylethyl)-	504578	002769-94-0	46

058.M Thu Oct 10 10:02:38 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\das\
 Data File : WLM-2-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 5:14
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			2,4-Bis(1-phenylethyl)phenol #			
16	36.378	0.06	D:\DATABASE\DEMO.L Methyl abietate \$S 1-Phenanthrenec arboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6, 10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, methyl ester, [1R -(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a. alpha.)]- \$S Podocarpa-7,13-dien-1 5-oic acid, 13-isopropyl-, methyl ester \$S Abalyn	258889	000127-25-3	83
			METHYL ABIETA-7,13-DIEN-18-OATE \$S 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1, 2,3,4,4A,4B,5,6,10,10A-DECAHYDRO-1 4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, M ETHYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA .4B.ALPHA.,10A.ALPHA.)]- \$S ABALY N \$S ABIETIC ACID METHYL ESTER	258918	000127-25-3	83
			Abietic acid \$S 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$S Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- \$S L-abietic acid	513378	000514-10-3	64
17	36.589	0.54	D:\DATABASE\DEMO.L ROSIN ACIDS	504611	000000-00-0	68
			SELENOPHENO[3,4-B][1]BENZOSELENOPH EN-3(1H)-ONE \$S SELENOLO[3,4-B][1] BENZOSELENOPHEN-3(1H)-ONE \$S 1,3-D IHYDRO-3-OXO-3,4-D-SELENO BENZO(B)	513504	039827-01-5	59
			SELENOPHENE FINE ROSIN MIXTURE	504612	000000-00-0	53
18	36.745	0.21	D:\DATABASE\DEMO.L Abietic acid \$S 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$S Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- \$S L-abietic acid	513378	000514-10-3	53
			Abietic acid \$S 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$S Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- \$S L-abietic acid	513347	000514-10-3	38
			3-ACETYL-1-METHYL-2-(1'-METHYL-1H- INDOL-2'-YL)-1H-INDOLE	513641	000000-00-0	38
19	36.837	0.04	D:\DATABASE\DEMO.L Palustric acid \$S Podocarpa-8,13-d ien-15-oic acid, 13-isopropyl- \$S 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 ,3,4,4a,5,6,9,10,10a-decahydro-1,4 a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, (1R	513439	001945-53-5	87

058.M Thu Oct 10 10:02:38 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-2-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 5:14
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			-(1.alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)- \$\$ 8,13-Abietadien-18-oic acid KAUR-16-EN-18-OIC ACID \$\$ KAUR-16- EN-18-OIC ACID, (4.BETA.)- \$\$ (-)- KAURNENOIC ACID \$\$ (4-BETA)-KAUR-1 6-EN-18-OIC ACID Phenol, 2,4-bis(1-phenylethyl)- \$\$ 504578 002769-94-0 86 2,4-Bis(1-phenylethyl)phenol *			
20	36.956	0.55	D:\DATABASE\DEMO.L 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 ,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1. alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$\$ P odocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid , 13-isopropyl- \$\$ Abieta-8,11,13- trien-18-oic acid \$\$ Abietic acid, dehydro- 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2 ,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DI METHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1. ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$\$ (-)-DEHYDROABIETIC ACID \$\$ 1,2,3,4, 4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHY L-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE CARBOXYLIC ACID ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID \$ 503106 999503-11-8 96 \$ PODOCARPA-8,11,13-TRIEN-15-SAEUR E, 13-ISOPROPYL-	503093	001740-19-8	99
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2 ,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DI METHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1. ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$\$ (-)-DEHYDROABIETIC ACID \$\$ 1,2,3,4, 4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHY L-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE CARBOXYLIC ACID ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID \$ 503110 001740-19-8 83 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2 ,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1. alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$\$ P odocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid , 13-isopropyl- \$\$ Abieta-8,11,13- trien-18-oic acid \$\$ Abietic acid, dehydro-	503110	001740-19-8	83
21	37.026	0.41	D:\DATABASE\DEMO.L 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 ,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1. alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$\$ P odocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid , 13-isopropyl- \$\$ Abieta-8,11,13- trien-18-oic acid \$\$ Abietic acid, dehydro- 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2 ,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DI METHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1. ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$\$ (-)-DEHYDROABIETIC ACID \$\$ 1,2,3,4, 4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHY L-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE CARBOXYLIC ACID 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 ,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1. alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$\$ P odocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid , 13-isopropyl- \$\$ Abieta-8,11,13- trien-18-oic acid \$\$ Abietic acid, dehydro-	503081	001740-19-8	87
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2 ,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DI METHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1. ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$\$ (-)-DEHYDROABIETIC ACID \$\$ 1,2,3,4, 4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHY L-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE CARBOXYLIC ACID 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 ,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1. alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$\$ P odocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid , 13-isopropyl- \$\$ Abieta-8,11,13- trien-18-oic acid \$\$ Abietic acid, dehydro-	503093	001740-19-8	83
22	37.221	0.31	D:\DATABASE\DEMO.L ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID \$ 503112 005155-70-4 56 \$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1	503112	005155-70-4	56

056.M Thu Oct 10 10:02:38 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\das\
 Data File : WLM-2-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 5:14
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 1 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1S-(1.ALPHA.,4A.ALPHA.,10A.BETA.)]- \$\$ 13-ISOPROPYLPODOCARPA-8,11,13-TRIEN-16-OIC ACID \$\$ 4-EPIABIETIC ACID, DEHYDRO-			
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,4a.alpha.,10a.beta.)]- \$\$ Podocarpa-8,11,13-trien-16-oic acid, 13-isopropyl- \$\$ Callitricic acid \$\$ 4-Epiabietic acid, dehydro-	503094	005155-70-4	56
			1H-2,10A-ETHANOPHENANTHRENE, KAUR-16-EN-18-OIC ACID DERIV. \$\$ KAUR-16-EN-18-OIC ACID \$\$ KAUR-16-EN-18-OIC ACID, (4.ALPHA.)- \$\$ (-)-ENT-KAUR-16-EN-19-OIC ACID	513651	006730-83-2	50
23	37.685	1.84	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Abietic acid \$\$ 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$\$ Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl- \$\$ L-abietic acid	513378	000514-10-3	99
			Abietic acid \$\$ 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$\$ Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl-	513344	000514-10-3	90

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\das\
 Data File : WLM-3-1-0-1persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 1:48
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 4 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	1.962	2.80	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Methyl Alcohol \$\$ Methanol \$\$ Carb	5073	000067-56-1	2
			incl \$\$ Methyl hydroxide			
			METHANOL \$\$ HYDROXYMETHANE \$\$ ALCO	5075	000067-56-1	2
			HOL, METHYL \$\$ ALCOOL METHYLIQUE			
			Methyl Alcohol \$\$ Methanol \$\$ Carb	5072	000067-56-1	2
			incl \$\$ Methyl hydroxide			
2	2.135	0.07	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Pentane, 2,4-dimethyl- \$\$ 2,4-Dime	18750	000108-08-7	91
			thylpentane			
			PENTANE, 2,4-DIMETHYL- \$\$ 2,4-DIME	19001	000108-08-7	83
			THYLPENTANE \$\$ PENTANE, 2,4-DIMETH			
			YL			
			PENTANE, 2,4-DIMETHYL- \$\$ 2,4-DIME	18833	000108-08-7	78
			THYLPENTANE \$\$ PENTANE, 2,4-DIMETH			
			YL			
3	2.200	6.69	D:\DATABASE\DEMO.L			
			PENTANE, 2,3-DIMETHYL- \$\$ 2,3-DIME	62374	000565-59-3	64
			THYLPENTANE \$\$ 3, 4-DIMETHYLPENTAN			
			E \$\$ 3,4-DIMETHYLPENTANE			
			Pentane, 2,3-dimethyl- \$\$ 2,3-Dime	62321	000565-59-3	64
			thylpentane \$\$ 3,4-Dimethylpentane			
			Hexane, 3-methyl- \$\$ 2-Ethylpentan	18754	000589-34-4	58
			e \$\$ 3-Methylhexane			
4	2.243	2.43	D:\DATABASE\DEMO.L			
			1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE \$\$ CYCLOP	62286	002532-58-3	93
			ENTANE, 1,3-DIMETHYL-, CIS- \$\$ 1,3			
			-DIMETHYLCYCLOPENTANE (CIS) \$\$ 1,3			
			-DIMETHYLCYCLOPENTANE CIS			
			Cyclopentane, 1,3-dimethyl-, cis-	62231	002532-58-3	93
			\$\$ cis-1,3-Dimethylcyclopentane \$\$			
			1,3-Dimethylcyclopentane cis \$\$ 1			
			,3-Dimethylcyclopentane *			
			Cyclopentane, 1,2-dimethyl-, cis-	62232	001192-18-3	90
			\$\$ cis-1,2-Dimethylcyclopentane \$\$			
			1,cis-2-Dimethylcyclopentane \$\$ 1			
			,2-Dimethylcyclopentane *			
5	2.335	3.75	D:\DATABASE\DEMO.L			
			CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL	141469	000108-87-2	96
			OHXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$			
			CYCLOHEXANE, METHYL			
			CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL	141467	000108-87-2	96
			OHXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$			
			CYCLOHEXANE, METHYL			
			CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL	141470	000108-87-2	96
			OHXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$			
			CYCLOHEXANE, METHYL			
6	2.421	78.09	D:\DATABASE\DEMO.L			
			BENZENE, METHYL- \$\$ METHYLBENZENE	158628	000108-88-3	90
			\$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A			
			1,5-Heptadien-3-yne \$\$ (5E)-1,5-He	6415	003511-27-1	83
			ptadien-3-yne *			
			BENZENE, METHYL- \$\$ METHYLBENZENE	158624	000108-88-3	70
			\$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A			

058.M Thu Oct 10 10:04:01 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-3-1-0-1persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 1:48
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 4 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

%#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
7	2.745	0.46	D:\DATABASE\DEMO.L CYCLOHEXANE, ETHYL- §§ ETHYLCYCLOH EXANE §§ ETHYL CYCLOHEXANE §§ ETHY LCYCLOHEXAN CYCLOHEXANE, ETHYL- §§ ETHYLCYCLOH EXANE §§ ETHYL CYCLOHEXANE §§ ETHY LCYCLOHEXAN Cyclohexane, ethyl- §§ Ethylcycloh exane	141562 141558 141525	001678-91-7 001678-91-7 001678-91-7	94 94 93
8	31.689	0.03	D:\DATABASE\DEMO.L 3(2H)-PYRIDAZINONE, 2-[4-METHOXY-3 -(1-METHYLETHYL)PHENYL]-6-METHYL- §§ 2-(3-ISOPROPYL-4-METHOXYPHENYL) -6-METHYLPYRIDAZIN-3(2H)-ONE 2-[4-Cyclohexylbenzoyl]acrylic aci (+)-METHYL HERITOL	481976 481766 484	120129-92-2 207853-73-4 000000-00-0	72 38 35
9	31.992	0.03	D:\DATABASE\DEMO.L BENZENE, 1-METHOXY-4-(3,3,5,5,6-PE NTAMETHYL-1-CYCLOHEXEN-1-YL)- §§ 1 -(4-METHOXYPHENYL)-3,3,5,5,6-PENTA METHYL-1-CYCLOHEXENE QUININDOLINE 1-(3-ETHYL-5,5,8,8-TETRAMETHYL-5,6 ,7,8-TETRAHYDRO-2-NAPHTHALENYL)ETH ANONE §§ 1,1,4,4-TETRAMETHYL-6-ETH YL-7-ACETYL-1,2,3,4-TETRAHYDRONAP HTHALENE §§ 1,1,4,4-TETRAMETHYL-6- ETHYL-7-ACETYL-1,2,3,4-TETRAHYDRON APHTHALENE §§ 7-AC-6-ET-1144-ME4-T	468192 468187 468188	098386-62-0 000000-00-0 000088-29-9	83 83 60
10	33.499	0.06	D:\DATABASE\DEMO.L PHENANTHRENE, 7-ETHENYL-1,2,3,4,4A ,5,6,7,8,9,10,10A-DODECAHYDRO-1,1, 4A,7-TETRAMETHYL-, [4AS-(4A.ALPHA. ,7.ALPHA.,10A.BETA.)]- §§ PIMARA-8 (9),15-DIENE §§ PODOCARP-8-ENE, 13 .ALPHA.-METHYL-13-VINYL- 1-Phenanthrenecarboxaldehyde, 7-et henyl-1,2,3,4,4a,4b,5,6,7,9,10,10a -dodecahydro-1,4a,7-trimethyl-, [1 R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,7.b eta.,10a.alpha.)]- §§ Podocarp-8(1 4)-en-15-al, 13.alpha.-methyl-13-v inyl- §§ Cryptopinon §§ Cryptopino ne PIMARA-8(14),15-DIEN-18-AL §§ 1-PH ENANTHRENECARBOXALDEHYDE, 7-ETHENY L-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,9,10,10A-DOD ECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-, [1R-(1 .ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,7.BETA. ,10A.ALPHA.)]- §§ CRYPTOPINON §§ C RYPTOPINONE	481161 481182 481208	018319-61-4 000472-39-9 000472-39-9	70 46 46
11	33.861	0.06	D:\DATABASE\DEMO.L 1-Methyl-10,18-bisnorabieta-8,11,1	466158	999466-16-6	94

358.M Thu Oct 10 10:04:01 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-3-1-0-1persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 1:48
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 4 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			3-triene			
			s-Indacen-1(2H)-one, 3,5,6,7-tetra	466171	038754-94-8	86
			hydro-3,3,4,5,5,8-hexamethyl- 55 3			
			,3,4,5,5,8-Hexamethyl-3,5,6,7-tetr			
			ahydro-s-indacen-1(2H)-one #			
			3,3,4,5,5,8-HEXAMETHYL-3,5,6,7-TET	466221	038754-94-8	86
			RAHYDRO-S-INDACEN-1(2H)-ONE 55 S-I			
			NDACEN-1(2H)-ONE, 3,5,6,7-TETRAHYD			
			RO-3,3,4,5,5,8-HEXAMETHYL- 55 3,3,			
			4,5,5,8-HEXAMETHYL-1-S-HYDRINDACEN			
			ONE			
12	35.487	1.36	D:\DATABASE\DEMO.L			
			(+)-CIS-3,4,6,9-TETRAHYDRO-10-HYD	504601	124821-09-6	90
			ROXY-7-METHOXY-1,3,8-TRIMETHYL-1H-			
			NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-6,9-DIONE(+)			
			-VENTILAGONE 7-METHYL ETHYL]			
			BENZ[A]ANTHRACENONE	513655	099707-96-7	87
			ROSIN ACIDS	504611	000000-00-0	64
13	35.649	0.03	D:\DATABASE\DEMO.L			
			ROSIN ACIDS	504611	000000-00-0	64
			Phenol, 2,4-bis(1-phenylethyl)- 55	504578	002769-94-0	51
			2,4-Bis(1-phenylethyl)phenol #			
			PINE ROSIN MIXTURE	504612	000000-00-0	46
14	35.670	0.05	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Xanthen-9-one, 1-hydroxy-3,5,8-tri	504583	049599-09-9	83
			methoxy- 55 5,8-Dimethylbellidifol			
			in 55 1-Hydroxy-3,5,8-trimethoxyxa			
			nthen-9-one 55 1-Hydroxy-3,5,8-tri			
			methoxy-9H-xanthen-9-one #			
			PIMARA-8(14),15-DIEN-18-OIC ACID 5	504609	000127-27-5	38
			5 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 7			
			-ETHENYL-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,9,10,			
			10A-DODECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-,			
			[1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,			
			7.BETA.,10A.ALPHA.)]- 55 (+)-PIMAR			
			IC ACID 55 .ALPHA.-PIMARIC ACID			
			Phenol, 2,4-bis(1-phenylethyl)- 55	504578	002769-94-0	30
			2,4-Bis(1-phenylethyl)phenol #			
15	35.751	0.13	D:\DATABASE\DEMO.L			
			DEHYDROABIETIC ACID	464556	000000-00-0	96
			METHYL ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OAT	464543	999464-55-1	94
			E 55 PHENANTHREN-1-CARBOXYLIC ACID, 1			
			,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-7-ISO			
			PROPYL-1,4A-DIMETHYL-, METHYLESTER			
			(DEHYDROABIETINSABUREMETHYLESTER)			
			METHYL ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OAT	464548	001235-74-1	94
			E 55 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID			
			, 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,			
			4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, ME			
			THYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.			
			,10A.ALPHA.)]- 55 DEHYDROABIETIC A			
			CID METHYL ESTER 55 METHYL DEHYDRO			
			ABIETATE			
16	36.081	0.10	D:\DATABASE\DEMO.L			

358.M Thu Oct 10 10:04:01 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-3-1-0-1persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 1:48
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 4 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			KAUR-16-EN-18-OIC ACID \$\$ KAUR-16-EN-18-OIC ACID, (4.BETA.)- \$\$ (-)-KAURNENOIC ACID \$\$ (4-BETA)-KAUR-16-EN-18-OIC ACID	168418	020316-84-1	55
			PIMARA-8(14),15-DIEN-18-OIC ACID \$ \$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 7-ETHENYL-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,9,10,10A-DODECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,7.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$ \$ (+)-PIMARIC ACID \$ \$.ALPHA.-PIMARIC ACID	504609	000127-27-5	45
			PINE ROSIN MIXTURE	504612	000000-00-0	38
17	36.384	0.05	D:\DATABASE\DEMO.L METHYL ABIETA-7,13-DIEN-18-OATE \$ \$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2,3,4,4A,4B,5,6,10,10A-DECAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, METHYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,10A.ALPHA.)]- \$ \$ ABALYN \$ \$ ABIETIC ACID METHYL ESTER	258918	000127-25-3	84
			Methyl abietate \$ \$ 1-Phenanthrene carboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, methyl ester, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$ \$ Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl-, methyl ester \$ \$ Abalyn	258889	000127-25-3	84
			17-NORKAUR-9(11)-EN-18-OIC ACID, 16-OXO-, METHYL ESTER, (4.ALPHA.)- \$ \$ 16-OXO-17-NOR-9(11)-KAUREN-18-CARBOXYLIC ACID-METHYLESTER \$ \$ 1H-2,10A-ETHANOPHENANTHRENE, 17-NORKAUR-9(11)-EN-18-OIC ACID DERIV.	466510	063558-42-9	62
18	36.589	0.20	D:\DATABASE\DEMO.L (+)-CIS-3,4,6,9-TETRAHYDRO-10-HYDROXY-7-METHOXY-1,3,8-TRIMETHYL-1H-NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-6,9-DIONE[(+)-VENTILAGONE 7-METHYL ETHYL]	504601	124821-09-6	90
			BENZ[A]ANTHRACENONE	513655	099707-96-7	87
			ROSIN ACIDS	504611	000000-00-0	68
19	36.735	0.32	D:\DATABASE\DEMO.L PHENOL, 5-[2-(3-HYDROXY-4-METHOXYPHENYL)ETHENYL]-2,3-DIMETHOXY-, (Z)- \$ \$ 2,3-DIMETHOXY-5-[2-(3-HYDROXY-4-METHOXYPHENYL)ETHENYL]PHENOL (Z) \$ \$ COMBRETASTATIN A3	513563	111394-45-7	90
			1,4-DIHYDRO-9-ISOPROPYLIDENE-5,6,7,8-TETRAMETHOXY-1,4-METHANONAPHTHALENE	513581	000000-00-0	90
			BENZ[A]ANTHRACENONE	513655	099707-96-7	72
20	36.967	0.45	D:\DATABASE\DEMO.L 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1.	503110	001740-19-8	99

058.M Thu Oct 10 10:04:01 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\das\
 Data File : WLM-3-1-0-1persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 1:48
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 4 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$ \$ (
			-)-DEHYDROABIETIC ACID \$ \$ 1,2,3,4,			
			4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHY			
			L-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE			
			CARBOXYLIC ACID			
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2	503093	001740-19-8	99
			,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di			
			methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.			
			alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$ \$ P			
			odocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid			
			, 13-isopropyl- \$ \$ Abieta-8,11,13-			
			trien-18-oic acid \$ \$ Abietic acid,			
			dehydro-			
			ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID \$	503106	999503-11-8	96
			\$ PODOCARPA-8,11,13-TRIEN-15-SAEUR			
			E, 13-ISOPROPYL-			
21	37.032	0.68	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Abietic acid \$ \$ 1-Phenanthrenecarb	513378	000514-10-3	46
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,			
			10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m			
			ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet			
			a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$ \$ Podo			
			carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is			
			opropyl- \$ \$ L-abietic acid			
			Abietic acid \$ \$ 1-Phenanthrenecarb	513344	000514-10-3	46
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,			
			10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m			
			ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet			
			a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$ \$ Podo			
			carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is			
			opropyl- \$ \$ L-abietic acid			
			Abietic acid \$ \$ 1-Phenanthrenecarb	513347	000514-10-3	42
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,			
			10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m			
			ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet			
			a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$ \$ Podo			
			carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is			
			opropyl- \$ \$ L-abietic acid			
22	37.205	0.25	D:\DATABASE\DEMO.L			
			ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID \$	503112	005155-70-4	90
			\$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1			
			,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-			
			DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1S-(
			1.ALPHA.,4A.ALPHA.,10A.BETA.)]- \$ \$			
			13-ISOPROPYLPODOCARPA-8,11,13-TRI			
			EN-16-OIC ACID \$ \$ 4-EPIABIETIC ACI			
			D, DEHYDRO-			
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2	503094	005155-70-4	90
			,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di			
			methyl-7-(1-methylethyl)-, [1S-(1.			
			alpha.,4a.alpha.,10a.beta.)]- \$ \$ P			
			odocarpa-8,11,13-trien-16-oic acid			
			, 13-isopropyl- \$ \$ Callitrisic aci			
			d \$ \$ 4-Epiabietic acid, dehydro-			
			1H-2,10A-ETHANOPHENANTHRENE, KAUR-	513651	006730-83-2	50
			16-EN-18-OIC ACID DERIV. \$ \$ KAUR-1			
			6-EN-18-OIC ACID \$ \$ KAUR-16-EN-18-			

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-3-1-0-1persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 1:48
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 4 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			OIC ACID, (4.ALPHA.)- 55 (-)-ENT-K AUR-16-EN-19-OIC ACID			
23	37.680	1.82	D:\DATABASE\DEMO.L Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid	513378	000514-10-3	99
			Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid	513347	000514-10-3	93
			Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid	513344	000514-10-3	90
24	37.907	0.04	D:\DATABASE\DEMO.L Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid	513347	000514-10-3	94
			carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid	513378	000514-10-3	90
			Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid	513344	000514-10-3	90
25	38.998	0.06	D:\DATABASE\DEMO.L Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid 2H-1,4-BENZOTHAZINE, ACETIC ACID DERIV. 55 ACETIC ACID, (3,4-DIHYDR	513378	000514-10-3	58
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is opropyl- 55 L-abietic acid 2H-1,4-BENZOTHAZINE, ACETIC ACID DERIV. 55 ACETIC ACID, (3,4-DIHYDR	445472	106660-02-0	43

058.M Thu Oct 10 10:04:01 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-3-1-0-1persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 1:48
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 4 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			O-3-OXO-2H-1,4-BENZOTHIAZIN-2-YLID ENE)-, (Z)- 55 (E)-(3'-OXO-3',4'-D IHYDRO-2'H-1',4'-BENZOTHIAZIN-2'-Y LIDENE)ACETIC ACID (1E)-PENTANAL (4-NITROPHENYL)HYDRA ZONE 55 PENTANAL, (4-NITROPHENYL)H YDRAZONE 55 VALERALDEHYDE, (P-NITR OPHENYL)HYDRAZONE	445490	005873-64-3	25

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-3-1-0-2persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 3:33
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 5 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	1.962	1.64	D:\DATABASE\DEMO.L Methyl Alcohol \$\$ Methanol \$\$ Carb inol \$\$ Methyl hydroxide METHANOL \$\$ HYDROXYMETHANE \$\$ ALCO HOL, METHYL \$\$ ALCOOL METHYLIQUE Methyl Alcohol \$\$ Methanol \$\$ Carb inol \$\$ Methyl hydroxide	5073 5075 5072	000067-56-1 000067-56-1 000067-56-1	2 2 2
2	2.135	0.06	D:\DATABASE\DEMO.L Pentane, 2,4-dimethyl- \$\$ 2,4-Dime thylpentane PENTANE, 2,4-DIMETHYL- \$\$ 2,4-DIME THYLPENTANE \$\$ PENTANE, 2,4-DIMETH YL PENTANE, 2,4-DIMETHYL- \$\$ 2,4-DIME THYLPENTANE \$\$ PENTANE, 2,4-DIMETH YL	18750 19001 19002	000108-08-7 000108-08-7 000108-08-7	91 83 83
3	2.200	6.66	D:\DATABASE\DEMO.L HEXANE, 3-METHYL- \$\$ 3-METHYLHEXAN E \$\$ 2-ETHYLPENTANE \$\$ HEXANE, 3-M ETHYL Hexane, 3-methyl- \$\$ 2-Ethylpentan e \$\$ 3-Methylhexane Hexane, 3-methyl- \$\$ 2-Ethylpentan e \$\$ 3-Methylhexane	18994 18743 18754	000589-34-4 000589-34-4 000589-34-4	68 62 58
4	2.243	2.46	D:\DATABASE\DEMO.L 1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE \$\$ CYCLOP ENTANE, 1,3-DIMETHYL-, CIS- \$\$ 1,3 -DIMETHYLCYCLOPENTANE (CIS) \$\$ 1,3 -DIMETHYLCYCLOPENTANE CIS Cyclopentane, 1,3-dimethyl-, cis- \$\$ cis-1,3-Dimethylcyclopentane \$\$ 1,3-Dimethylcyclopentane cis \$\$ 1 ,3-Dimethylcyclopentane # Cyclopentane, 1,2-dimethyl-, cis- \$\$ cis-1,2-Dimethylcyclopentane \$\$ 1,cis-2-Dimethylcyclopentane \$\$ 1 ,2-Dimethylcyclopentane #	62286 62231 62234	002532-58-3 002532-58-3 001192-18-3	93 93 90
5	2.330	3.98	D:\DATABASE\DEMO.L CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL OHEXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$ CYCLOHEXANE, METHYL Cyclohexane, methyl- \$\$ Cyclohexyl methane \$\$ Hexahydrotoluene \$\$ Met hylcyclohexane CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL OHEXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$ CYCLOHEXANE, METHYL	141469 141386 141467	000108-87-2 000108-87-2 000108-87-2	96 96 96
6	2.416	78.09	D:\DATABASE\DEMO.L 1,5-Heptadien-3-yne \$\$ (5E)-1,5-He ptadien-3-yne # BENZENE, METHYL- \$\$ METHYLBENZENE \$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A BENZENE, METHYL- \$\$ METHYLBENZENE \$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A	6415 158628 158624	003511-27-1 000108-88-3 000108-88-3	83 80 58

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-3-1-0-2persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 3:33
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 5 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
7	2.746	0.69	D:\DATABASE\DEMO.L CYCLOHEXANE, ETHYL- \$\$ ETHYLCYCLOH EXANE \$\$ ETHYL CYCLOHEXANE \$\$ ETHY LCYCLOHEXAN Cyclohexane, ethyl- \$\$ Ethylcycloh exane CYCLOHEXANE, ETHYL- \$\$ ETHYLCYCLOH EXANE \$\$ ETHYL CYCLOHEXANE \$\$ ETHY LCYCLOHEXAN	141562	001678-91-7	95
				141525	001678-91-7	94
				141558	001678-91-7	93
8	2.870	0.27	D:\DATABASE\DEMO.L Toluene \$\$ Benzene, methyl \$\$ Meth acide \$\$ Methylbenzene 1,3,5-CYCLOHEPTATRIENE \$\$ CYCLOHEP TA-1,3,5-TRIENE \$\$ CYCLOHEPTATRIEN E \$\$ CYCLOHEPTATRIENE [UN2603] [FL AMMABLE LIQUID] 1,3,5-CYCLOHEPTATRIENE \$\$ CYCLOHEP TA-1,3,5-TRIENE \$\$ CYCLOHEPTATRIEN E \$\$ CYCLOHEPTATRIENE [UN2603] [FL AMMABLE LIQUID]	158586	000108-88-3	92
				158635	000544-25-2	81
				158636	000544-25-2	81
9	33.499	0.07	D:\DATABASE\DEMO.L ANDROST-5-ENE, 4,4-DIMETHYL-, (13. ALPHA.)- \$\$ 4,4-DIMETHYL-13.ALPHA. -ANDROST-5-ENE KAURA-5,16-DIEN-18-OL \$\$ KAURA-5,1 6-DIEN-18(OR 19)-OL \$\$ KAURA-5,16- DIEN-19-OL RETINOL \$\$ (ALL-E)-3,7-DIMETHYL-9- (2,6,6-TRIMETHYL-1-CYCLOHEXEN-1-YL)-2,4,6,8-NONATETRAEN-1-OL \$\$.ALP HA.LIN \$\$.ALPHA.STEROL	492912	073495-94-0	90
				492904	023837-99-2	64
				13722	000068-26-8	55
10	33.861	0.04	D:\DATABASE\DEMO.L 10,13-DIMETHYL-4,5,6,7,8,9,10,11,1 2,13,14,15-DODECAHYDRO-1H-CYCLOPEN TA[A]PHENANTHRENE \$\$ ANDROSTA-2,16 -DIENE 1-Methyl-10,18-bisnorabieta-8,11,1 3-triene 3,7-DI-TERT-BUTYL-1-NAPHTHOL	466180	999466-18-8	95
				466158	999466-16-6	94
				466222	000000-00-0	80
11	34.536	0.04	D:\DATABASE\DEMO.L 8-p-Tolyl-8-aza-spiro[4.5]decane-7 ,9-dione 1-M-TOLYLAZIRIDINE 2-PHENYL-2-METHYL-1-DI-AZIRIDINE	398754	999398-75-8	25
				206840	000000-00-0	15
				285973	030691-62-4	11
12	35.492	1.18	D:\DATABASE\DEMO.L (+)-CIS-3,4,6,9-TETRAHYDRO-10-HYD ROXY-7-METHOXY-1,3,8-TRIMETHYL-1H- NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-6,9-DIONE [(+-) -VENTILAGONE 7-METHYL ETHYL] BENZ[A]ANTHRACENONE ROSIN ACIDS	504601	124821-09-6	90
				513655	099707-96-7	83
				504611	000000-00-0	78
13	35.654	0.06	D:\DATABASE\DEMO.L			

058.M Thu Oct 10 10:05:42 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-3-1-0-2persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 3:33
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 5 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			Xanthen-9-one, 1-hydroxy-3,5,8-tri methoxy- §§ 5,8-Dimethylbellidifol in §§ 1-Hydroxy-3,5,8-trimethoxyxa nthen-9-one §§ 1-Hydroxy-3,5,8-tri methoxy-9H-xanthen-9-one #	504583	049599-09-9	51
			BENZO[B]NAPHTHO[2,1-D]THIOPHENE-6- ACETONITRILE, .ALPHA.-METHYL- §§ 2 -(6-BENZO[B]NAPHTHO[2,1-D]THIENYL) PROPANENITRILE	504533	089817-35-6	47
			Phenol, 2,4-bis(1-phenylethyl)- §§ 2,4-Bis(1-phenylethyl)phenol #	504578	002769-94-0	46
14	35.757	0.13	D:\DATABASE\DEMO.L DEHYDROABIETIC ACID 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 ,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, methyl ester, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,10a. alpha.)]- §§ Podocarpa-8,11,13-tri en-15-oic acid, 13-isopropyl-, met hyl ester §§ Methyl dehydroabietat METHYL ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OAT E §§ PHENANTHREN-1-CARBOXYLIC ACID, 1 ,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-7-ISO PROPYL-1,4A-DIMETHYL-, METHYLESTER (DEHYDROABIETINSABUREMETHYLESTER)	464556 464536	000000-00-0 001235-74-1	93 86
15	36.092	0.31	D:\DATABASE\DEMO.L PIMARA-8(14),15-DIEN-18-OIC ACID § § 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 7 -ETHENYL-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,9,10, 10A-DODECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA., 7.BETA.,10A.ALPHA.)]- §§ (+)-PIMAR IC ACID §§ .ALPHA.-PIMARIC ACID PINE ROSIN MIXTURE INDOLIZINO[1,2-B]QUINOLIN-9(11H)-O NE, 8-[(FORMYLOXY)METHYL]-7-(1-OXO PROPYL)- §§ 8-FORMYLOXYMETHYL-7-(1 -OXOPROPYL)INDOLIZINO[1,2-B]QUINOL IN-9(11H)-ONE	504609	000127-27-5	46
16	36.389	0.03	D:\DATABASE\DEMO.L Pimaric acid §§ 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 7-ethenyl-1,2,3,4,4a, 4b,5,6,7,9,10,10a-dodecahydro-1,4a ,7-trimethyl-, [1R-(1.alpha.,4a.be ta.,4b.alpha.,7.beta.,10a.alpha.)] - §§ Podocarp-8(14)-en-15-oic acid , 13.alpha.-methyl-13-vinyl- §§ D- pimaric acid Methyl abietate §§ 1-Phenanthrenec arboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6, 10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, methyl ester, [1R -(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a. alpha.)]- §§ Podocarpa-7,13-dien-1 5-oic acid, 13-isopropyl-, methyl ester §§ Abalyn	466434 480547	000127-27-5 000127-25-3	90 86

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\das\
 Data File : WLM-3-1-0-2persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 3:33
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 5 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area#	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			METHYL ABIETA-7,13-DIEN-18-OATE	58	480550	000127-25-3 86
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2,3,4,4A,4B,5,6,10,10A-DECAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, METHYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,10A.ALPHA.)]-	58	ABALY	
			N 58 ABIETIC ACID METHYL ESTER			
17	36.600	0.60	D:\DATABASE\DEMO.L			
			ROSIN ACIDS	504611	000000-00-0	95
			BENZ[A]ANTHRACENONE	513655	099707-96-7	86
			SELENOPHENO[3,4-B][1]BENZOSELENOPHEN-3(1H)-ONE	513504	039827-01-5	53
			EN-3(1H)-ONE 58 SELENOLO[3,4-B][1]BENZOSELENOPHEN-3(1H)-ONE	58	1,3-D	
			IHYDRO-3-OXO-3,4-D-SELENO BENZO(B)SELENOPHENE			
18	36.751	0.23	D:\DATABASE\DEMO.L			
			1H-NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-5,10-DIONE, 3,4-DIHYDRO-7,9-DIMETHOXY-1,3-DIMETHYL-, CIS-(+.-)-	58	(+,-)-CIS-7,9-DIMETHOXY-1,3-DIMETHYL-3,4,5,10-TETRAHYDRONAPHTHO[2,3-C]PYRAN-5,10-DIONE	513558 084018-43-9 72
			Abietic acid 58 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]-	58	Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl- 58 L-abietic acid	513378 000514-10-3 70
			Palustric acid 58 Podocarpa-8,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl- 58 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,5,6,9,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]-	58	8,13-Abietadien-18-oic acid	513439 001945-53-5 55
19	36.967	0.58	D:\DATABASE\DEMO.L			
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]-	58	Podocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid, 13-isopropyl- 58 Abieta-8,11,13-trien-18-oic acid 58 Abietic acid, dehydro-	503093 001740-19-8 99
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]-	58	(-)-DEHYDROABIETIC ACID 58 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID	503110 001740-19-8 99
			ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID 58 8,13-PODOCARPA-8,11,13-TRIEN-15-SAEUR, 13-ISOPROPYL-	58	999503-11-8	99

058.M Thu Oct 10 10:05:42 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-3-1-0-2persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 3:33
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 5 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
20	37.037	0.41	D:\DATABASE\DEMO.L 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2 ,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DI METHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1. ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$S (\$ -)-DEHYDROABIETIC ACID \$S 1,2,3,4, 4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHY L-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE CARBOXYLIC ACID	503110	001740-19-8	86
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 ,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1. alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$S P odocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid , 13-isopropyl- \$S Abieta-8,11,13- trien-18-oic acid \$S Abietic acid, dehydro-	503093	001740-19-8	86
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 ,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1. alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$S P odocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid , 13-isopropyl- \$S Abieta-8,11,13- trien-18-oic acid \$S Abietic acid, dehydro-	503082	001740-19-8	80
21	37.221	0.24	D:\DATABASE\DEMO.L ABIETA-7,13-DIEN-18-OIC ACID \$S 1- PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2,3 ,4,4A,4B,5,6,10,10A-DECAHYDRO- \$S	168420	000514-10-3	78
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2 ,3,4,4A,4B,5,6,10,10A-DECAHYDRO-1, 4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1 R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,10A .ALPHA.)]- ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID \$ 503112 \$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1 ,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A- DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1S-(1.ALPHA.,4A.ALPHA.,10A.BETA.)]- \$S 13-ISOPROPYLPODOCARPA-8,11,13-TRI EN-16-OIC ACID \$S 4-EPIABIETIC ACI D, DEHYDRO-	005155-70-4	74	
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 ,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1S-(1. alpha.,4a.alpha.,10a.beta.)]- \$S P odocarpa-8,11,13-trien-16-oic acid , 13-isopropyl- \$S Callitrisic aci d \$S 4-Epiabietic acid, dehydro-	503094	005155-70-4	74
22	37.712	2.20	D:\DATABASE\DEMO.L Abietic acid \$S 1-Phenanthrenecarb oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10, 10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$S Podo carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is	513378	000514-10-3	99

058.M Thu Oct 10 10:05:42 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-3-1-0-2persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 3:33
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 5 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			opropyl- 55 1-abietic acid			
			1,4-DIHYDRO-9-ISOPROPYLIDENE-5,6,7	513581	000000-00-0	90
			,8-TETRAMETHOXY-1,4-METHANONAPHTHA			
			LENE			
			2,7-PHENANTHRENE-9,10-DIHYDRO	513565	039499-93-9	90
			-3,4,6-TRIMETHOXY- 55 2,7-DIHYDROX			
			Y-3,4,6-TRIMETHOXY-9,10-DIHYDRO-PHE			
			NANTRENE			
23	38.501	0.01	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Abietic acid 55 1-Phenanthrenecarb	513344	000514-10-3	87
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,			
			10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m			
			ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet			
			a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podo			
			carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is			
			opropyl- 55 1-abietic acid			
			3-(7-ACETYL-6-HYDROXY-2,5-DIMETHYL	513561	066395-48-0	83
			-1-BENZOFURAN-3-YL)-2,4-PENTANEDIO			
			NE 55 7-ACETYL-3-(DIACETYLMETHYL)-			
			6-HYDROXY-2,5-DIMETHYLBENZOFURAN			
			5-AZULENEPROPANAL, 6-FORMYLDECAHYD	294173	069301-45-7	68
			RO-3A,6-DIMETHYL-.BETA.-METHYLENE-			
			1-(1-METHYLETHENYL)-, (1.ALPHA.,3			
			A.BETA.,5.ALPHA.,6.BETA.,8A.ALPHA.			
)- 55 3,4-DIOXO-3,4-SECOCLAVULARA-			
			17-ENE			

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-3-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 4:22 (#1); 5 Oct 2019 4:21 (#2)
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 6 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
1	1.962	1.24	D:\DATABASE\DEMO.L Methyl Alcohol \$\$ Methanol \$\$ Carb inol \$\$ Methyl hydroxide METHANOL \$\$ HYDROXYMETHANE \$\$ ALCO HOL, METHYL \$\$ ALCOOL METHYLIQUE Methyl Alcohol \$\$ Methanol \$\$ Carb inol \$\$ Methyl hydroxide	5073 5075 5072	000067-56-1 000067-56-1 000067-56-1	2 2 2
2	2.135	0.06	D:\DATABASE\DEMO.L Pentane, 2,4-dimethyl- \$\$ 2,4-Dime thylpentane Pentane, 2,4-dimethyl- \$\$ 2,4-Dime thylpentane PENTANE, 2,4-DIMETHYL- \$\$ 2,4-DIME THYLPENTANE \$\$ PENTANE, 2,4-DIMETH YL	18750 18753 65648	000108-08-7 000108-08-7 000108-08-7	90 83 78
3	2.200	6.09	D:\DATABASE\DEMO.L HEXANE, 3-METHYL- \$\$ 3-METHYLHEXAN E \$\$ 2-ETHYLPENTANE \$\$ HEXANE, 3-M ETHYL Hexane, 3-methyl- \$\$ 2-Ethylpentan e \$\$ 3-Methylhexane HEPTANE \$\$ ALIPHATIC HYDROCARBON \$ \$ DIPROPYL METHANE \$\$ DIPROPYLMETH ANE	18994 18743 18986	000589-34-4 000589-34-4 000142-82-5	68 62 58
4	2.243	2.24	D:\DATABASE\DEMO.L Cyclopentane, 1,3-dimethyl-, cis- \$\$ cis-1,3-Dimethylcyclopentane \$\$ 1,3-Dimethylcyclopentane cis \$\$ 1 ,3-Dimethylcyclopentane # 1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE \$\$ CYCLOP ENTANE, 1,3-DIMETHYL-, CIS- \$\$ 1,3 -DIMETHYLCYCLOPENTANE (CIS) \$\$ 1,3 -DIMETHYLCYCLOPENTANE CIS Cyclopentane, 1,2-dimethyl-, cis- \$\$ cis-1,2-Dimethylcyclopentane \$\$ 1,cis-2-Dimethylcyclopentane \$\$ 1 ,2-Dimethylcyclopentane #	62231 62286 62234	002532-58-3 002532-58-3 001192-18-3	93 93 90
5	2.330	3.66	D:\DATABASE\DEMO.L CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL OHEXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$ CYCLOHEXANE, METHYL Cyclohexane, methyl- \$\$ Cyclohexyl methane \$\$ Hexahydrotoluene \$\$ Met hylcyclohexane CYCLOHEXANE, METHYL- \$\$ METHYLCYCL OHEXANE \$\$ 1-METHYLCYCLOHEXANE \$\$ CYCLOHEXANE, METHYL	141469 141386 141467	000108-87-2 000108-87-2 000108-87-2	96 96 96
6	2.416	76.44	D:\DATABASE\DEMO.L 1,5-Heptadien-3-yne \$\$ (5E)-1,5-He ptadien-3-yne # BENZENE, METHYL- \$\$ METHYLBENZENE \$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A BENZENE, METHYL- \$\$ METHYLBENZENE \$\$ TOLUENE \$\$ ANTISAL 1A	6415 158628 158624	003511-27-1 000108-88-3 000108-88-3	83 80 62

058.M Thu Oct 10 10:06:51 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-3-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 4:22 (#1); 5 Oct 2019 4:21 (#2)
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 6 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
7	2.745	0.47	D:\DATABASE\DEMO.L Cyclohexane, ethyl- exane	141525	001678-91-7	95
			Cyclohexane, ethyl- exane	141506	001678-91-7	93
			CYCLOHEXANE, ETHYL- EXANE	141561	001678-91-7	93
			ETHYL CYCLOHEXANE			
8	30.301	0.03	D:\DATABASE\DEMO.L Phenanthrene, 7-ethenyl-1,2,3,4,4a ,5,6,7,8,9,10,10a-dodecahydro-1,1, 4a,7-tetramethyl- lene	481092	055255-56-6	93
			1,1,4A-TRIMETHYL-6-METHYLENE-5-(3- METHYLENE-4-PENTENYL)DECAHYDRONAPH THALENE	481157	000511-02-4	83
			THALENE			
			1,1,4A-TRIMETHYL-6-METHYLENE-5-(3- METHYLENE-4-PENTENYL)-, [4AS-(4A.A LPHA.,5.ALPHA.,8A.BETA.)]-	481093	000511-02-4	83
			A-8(20),13(16),14-TRIENE			
			Naphthalene, decahydro-1,1,4a-trim ethyl-6-methylene-5-(3-methylene-4 -pentenyl)-, [4aS-(4a.alpha.,5.alp ha.,8a.beta.)]-			
			ne			
9	33.493	0.10	D:\DATABASE\DEMO.L ANDROST-5-ENE, 4,4-DIMETHYL-, (13. ALPHA.)-	492912	073495-94-0	90
			-ANDROST-5-ENE 5-HYDROXY-1,3,4-TRIMETHOXY-7-METHY L-6-PROPARGYNAPHTHALENE	492890	000000-00-0	83
			PHENANTHRENE, 7-ETHENYL-1,2,3,4,4A ,5,6,7,8,9,10,10A-DODECAHYDRO-1,1, 4A,7-TETRAMETHYL-, [4AS-(4A.ALPHA. ,7.ALPHA.,10A.BETA.)]-	481161	018319-61-4	64
			(9),15-DIENE			
			.ALPHA.-METHYL-13-VINYL-			
10	33.855	0.06	D:\DATABASE\DEMO.L 10,13-DIMETHYL-4,5,6,7,8,9,10,11,1 2,13,14,15-DODECAHYDRO-1H-CYCLOPEN TA[A]PHENANTHRENE	466180	999466-18-8	96
			-DIENE			
			1-Methyl-10,18-bisnorabieta-8,11,1 3-triene	466158	999466-16-6	94
			4-(N-METHYLAMINO)-6,7-(1,2,3,4-TET RAHYDRO-1,1,4,4-TETRAMETHYLBENZO)I NDOLE	466219	000000-00-0	83
11	34.309	0.04	D:\DATABASE\DEMO.L Benzene, 1,1'-(1-methylethylidene) bis[4-methoxy- xyphenyl]propane	466137	001568-83-8	55
			enzene			

058.M Thu Oct 10 10:06:51 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-3-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 4:22 (#1); 5 Oct 2019 4:21 (#2)
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 6 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			is(4-methoxybenzene)			
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 7-e	466507	003582-26-1	46
			thenyl-1,2,3,4,4a,5,6,7,8,9,10,10a			
			-dodecahydro-1,4a,7-trimethyl-, me			
			thyl ester, [1R-(1.alpha.,4a.beta.			
			,7.beta.,10a.alpha.)]- 88 Podocarp			
			-8-en-15-olic acid, 13.alpha.-methy			
			l-13-vinyl-, methyl ester			
			Naphthalene, 6-ethyl-1,2,3,4-tetra	466156	301643-35-6	43
			hydro-1,1,4,4-tetramethyl-7-(1-met			
			hylethenyl)- 88 6-Ethyl-7-isopropo			
			nyl-1,1,4,4-tetramethyl-1,2,3,4-te			
			tetrahydronaphthalene *			
12	34.536	0.05	D:\DATABASE\DEMO.L			
			1,2,4-TRIAZOLO(3,4-C)(1,2,4)-BENZO	282352	000000-00-0	25
			TRIAZIN-1(5H)-ONE			
			2,2,5,5-TETRAMETHYL-4-PHENYL-3-IMI	398512	039753-69-0	22
			DAZOLINE-1-OXIDE			
			5,5-Dimethyl-4-phenyl-spiro[1,2]he	283196	999283-19-9	18
			xane-3-imidazoline-3-oxide-1-oxide			
13	35.028	0.01	D:\DATABASE\DEMO.L			
			4,5-Bis-dimethoxymethyl-octanedioi	124248	999124-25-1	53
			c acid, dimethyl ester			
			1-(Dichloromethyl)dimethylsilyloxy	123094	999123-09-7	53
			-3-methylbut-2-ene			
			1-Ethyl-2-dimethyl(dichloromethyl)	123537	999123-54-0	53
			silyloxycyclohexane			
14	35.130	0.02	D:\DATABASE\DEMO.L			
			KAUR-16-EN-18-OIC ACID 88 KAUR-16-	168418	020316-84-1	30
			EN-18-OIC ACID, (4.BETA.)- 88 (-)-			
			KAURNENOIC ACID 88 (4-BETA)-KAUR-1			
			6-EN-18-OIC ACID			
			Benzaldehyde, 3-ethyl- 88 3-Ethylb	288339	034246-54-3	25
			enzaldehyde			
			4-Aminomethyl-2-methyl-2H-phthalaz	318944	042476-81-3	18
			in-1-one 88 4-(Aminomethyl)-2-meth			
			yl-1(2H)-phthalazinone *			
15	35.206	0.02	D:\DATABASE\DEMO.L			
			2-PHENYLTETRAHYDRO-4H-[1,3,2]DIOXA	319295	053225-62-0	53
			BOROLO(4,5-C)PYRAN-6-OL 88 .BETA.-			
			D-ERYTHRO-PENTOPYRANOSE, CYCLIC 3,			
			4-(PHENYLBORONATE) 88 BETA-D-ERYTH			
			RO-PENTOPYRANOSE, CYCLIC 3,4-(PHEN			
			YLBORONATE) 88 D-.BETA.-RIBOSE, 2-			
			DEOXY-3,4-O-(PHENYLBORANDIYL)-			
			.beta.-D-Erythro-Pentopyranose, cy	319284	053225-62-0	53
			cllic 3,4-(phenylboronate) 88 2-Phe			
			nyltetrahydro-4H-[1,3,2]dioxaborol			
			c[4,5-c]pyran-6-ol *			
			2-PHENYLTETRAHYDRO-4H-[1,3,2]DIOXA	319291	053225-62-0	53
			BOROLO(4,5-C)PYRAN-6-OL 88 D-BETA-			
			RIBOSE, 2-DEOXY-3,4-O-(PHENYLBORAN			
			DIYL)-			
16	35.508	2.06	D:\DATABASE\DEMO.L			

058.M Thu Oct 10 10:06:51 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-3-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 4:22 (#1); 5 Oct 2019 4:21 (#2)
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 6 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			(+)-CIS-3,4,6,9-TETRAHYDRO-10-HYDROXY-7-METHOXY-1,3,8-TRIMETHYL-1H-NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-6,9-DIONE [(+)-VENTILAGONE 7-METHYL ETHYL]	504601	124821-09-6	90
			ROSIN ACIDS	504611	000000-00-0	70
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 7-E	466436	005835-26-7	49
			THENYL-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,8,10,10A-DODECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,7.ALPHA.,10A.ALPHA.)]- \$ \$ ISOPIMARIC ACID \$ \$ PODOCARP-7-EN-15-OIC ACID, 13.BETA.-METHYL-13-VINYL-			
17	35.660	0.09	D:\DATABASE\DEMO.L			
			BENZ[A]ANTHRACENONE	513655	099707-96-7	68
			Xanthen-9-one, 1-hydroxy-3,5,8-trimethoxy- \$ \$ 5,8-Dimethylbellidifol in \$ \$ 1-Hydroxy-3,5,8-trimethoxyxanthen-9-one \$ \$ 1-Hydroxy-3,5,8-trimethoxy-9H-xanthen-9-one #	504583	049599-09-9	51
			Phenol, 2,4-bis(1-phenylethyl)- \$ \$ 2,4-Bis(1-phenylethyl)phenol #	504578	002769-94-0	47
18	35.757	0.24	D:\DATABASE\DEMO.L			
			DEHYDROABIETIC ACID	464556	000000-00-0	96
			METHYL ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OATE \$ \$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2,3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, METHYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$ \$ DEHYDROABIETIC ACID METHYL ESTER \$ \$ METHYL DEHYDRO	464550	001235-74-1	93
			ABIETATE			
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, methyl ester, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$ \$ Podocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid, 13-isopropyl-, methyl ester \$ \$ Methyl dehydroabietate	464538	001235-74-1	93
19	35.919	0.06	D:\DATABASE\DEMO.L			
			1H-NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-5,10-DIONE, 3,4-DIHYDRO-7,9-DIMETHOXY-1,3-DIMETHYL-, CIS-(+.-)- \$ \$ (+,-)-CIS-7,9-DIMETHOXY-1,3-DIMETHYL-3,4,5,10-TETRAHYDRONAPHTHO[2,3-C]PYRAN-5,10-DIONE	513558	084018-43-9	90
			O-HYDROGEN PERDEUTERIO HEXADECANOIC ACID	504545	039756-30-4	56
			Phenol, 2,4-bis(1-phenylethyl)- \$ \$ 2,4-Bis(1-phenylethyl)phenol #	504578	002769-94-0	50
20	36.097	0.38	D:\DATABASE\DEMO.L			
			INDOLIZINO[1,2-B]QUINOLIN-9(11H)-ONE, 8-[(FORMYLOXY)METHYL]-7-(1-OXOPROPYL)- \$ \$ 8-FORMYLOXYMETHYL-7-(1-OXOPROPYL)INDOLIZINO[1,2-B]QUINOLIN-9(11H)-ONE	504762	054318-62-6	92

158.M Thu Oct 10 10:06:51 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\das\
 Data File : WLM-3-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 4:22 (#1); 5 Oct 2019 4:21 (#2)
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 6 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			FINE ROSIN MIXTURE	504612	000000-00-0	48
			PIMARA-8(14),15-DIEN-18-OIC ACID \$	504608	000127-27-5	35
			\$ 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 7			
			-ETHENYL-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,9,10,			
			10A-DECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-,			
			[1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,			
			7.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$\$ (+)-PIMAR			
			IC ACID \$\$.ALPHA.-PIMARIC ACID			
21	36.384	0.10	D:\DATABASE\DEMO.L			
			METHYL ABIETA-7,13-DIEN-18-OATE \$\$	480551	000127-25-3	97
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,			
			2,3,4,4A,4B,5,6,10,10A-DECAHYDRO-1			
			,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, M			
			ETHYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA			
			.,4B.ALPHA.,10A.ALPHA.)]- \$\$ ABALY			
			N \$\$ ABIETIC ACID METHYL ESTER			
			Methyl abietate \$\$ 1-Phenanthrene	480547	000127-25-3	83
			carboxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,			
			10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(
			1-methylethyl)-, methyl ester, [1R			
			-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.			
			alpha.)]- \$\$ Podocarpa-7,13-dien-1			
			5-oic acid, 13-isopropyl-, methyl			
			ester \$\$ Abalyn			
			METHYL ABIETA-7,13-DIEN-18-OATE \$\$	480550	000127-25-3	83
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,			
			2,3,4,4A,4B,5,6,10,10A-DECAHYDRO-1			
			,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, M			
			ETHYL ESTER, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA			
			.,4B.ALPHA.,10A.ALPHA.)]- \$\$ ABALY			
			N \$\$ ABIETIC ACID METHYL ESTER			
22	36.605	0.73	D:\DATABASE\DEMO.L			
			(+-)-CIS-3,4,6,9-TETRAHYDRO-10-HYD	504601	124821-09-6	90
			ROXY-7-METHOXY-1,3,8-TRIMETHYL-1H-			
			NAPHTHO[2,3-C]PYRAN-6,9-DIONE[+-]			
			-VENTILAGONE 7-METHYL ETHYL]			
			FINE ROSIN MIXTURE	504612	000000-00-0	86
			ROSIN ACIDS	504611	000000-00-0	83
23	36.756	0.42	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Abietic acid \$\$ 1-Phenanthrenecarb	513378	000514-10-3	92
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,			
			10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-m			
			ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.bet			
			a.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- \$\$ Podo			
			carpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-is			
			opropyl- \$\$ L-abietic acid			
			1H-2,10A-ETHANOPHENANTHRENE, KAUR-	513651	006730-83-2	58
			16-EN-18-OIC ACID DERIV. \$\$ KAUR-1			
			6-EN-18-OIC ACID \$\$ KAUR-16-EN-18-			
			OIC ACID, (4.ALPHA.)- \$\$ (-)-ENT-K			
			AUR-16-EN-19-OIC ACID			
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 7-E	466436	005835-26-7	45
			THENYL-1,2,3,4,4A,4B,5,6,7,8,10,10			
			A-DECAHYDRO-1,4A,7-TRIMETHYL-, [
			1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,7.			
			ALPHA.,10A.ALPHA.)]- \$\$ ISOPIMARIC			

058.M Thu Oct 10 10:06:51 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-3-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 4:22 (#1); 5 Oct 2019 4:21 (#2)
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 6 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			ACID \$\$ PODOCARP-7-EN-15-OIC ACID , 13.BETA.-METHYL-13-VINYL-			
24	36.994	0.88	D:\DATABASE\DEMO.L 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2 , 3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DI METHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1. ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$\$ (-)-DEHYDROABIETIC ACID \$\$ 1,2,3,4, 4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHY L-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE CARBOXYLIC ACID	503110	001740-19-8	99
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 , 3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1. alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$\$ P odocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid , 13-isopropyl- \$\$ Abieta-8,11,13- trien-18-oic acid \$\$ Abietic acid, dehydro-	503093	001740-19-8	99
			ABIETA-8,11,13-TRIEN-18-OIC ACID \$ \$ PODOCARPA-8,11,13-TRIEN-15-SABUR E, 13-ISOPROPYL-	503106	999503-11-8	96
25	37.053	0.75	D:\DATABASE\DEMO.L 1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 , 3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1. alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$\$ P odocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid , 13-isopropyl- \$\$ Abieta-8,11,13- trien-18-oic acid \$\$ Abietic acid,	503081	001740-19-8	78
			dehydro- 1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2 , 3,4,4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DI METHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1. ALPHA.,4A.BETA.,10A.ALPHA.)]- \$\$ (-)-DEHYDROABIETIC ACID \$\$ 1,2,3,4, 4A,9,10,10A-OCTAHYDRO-1,4A-DIMETHY L-7-(1-METHYLETHYL)-1-PHENANTHRENE CARBOXYLIC ACID	503110	001740-19-8	74
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2 , 3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-di methyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1. alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]- \$\$ P odocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid , 13-isopropyl- \$\$ Abieta-8,11,13- trien-18-oic acid \$\$ Abietic acid, dehydro-	503093	001740-19-8	74
26	37.237	0.46	D:\DATABASE\DEMO.L 1H-2,10A-ETHANOPHENANTHRENE, KAUR- 16-EN-18-OIC ACID DERIV. \$\$ KAUR-1 6-EN-18-OIC ACID \$\$ KAUR-16-EN-18- OIC ACID, (4.ALPHA.)- \$\$ (-)-ENT-K AUR-16-EN-19-OIC ACID	513651	006730-83-2	70
			ABIETA-7,13-DIEN-18-OIC ACID \$\$ 1- PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2,3 , 4,4A,4B,5,6,10,10A-DECAHYDRO- \$\$	168420	000514-10-3	58

058.M Thu Oct 10 10:06:51 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\daa\
 Data File : WLM-3-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 4:22 (#1); 5 Oct 2019 4:21 (#2)
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 6 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

PK#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			1-PHENANTHRENECARBOXYLIC ACID, 1,2,3,4,4A,4B,5,6,10,10A-DECAHYDRO-1,4A-DIMETHYL-7-(1-METHYLETHYL)-, [1R-(1.ALPHA.,4A.BETA.,4B.ALPHA.,10A.ALPHA.)]-			
			1-Phenanthrenecarboxylic acid, 1,2,3,4,4a,9,10,10a-octahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,10a.alpha.)]-	503082	001740-19-8	56
			Podocarpa-8,11,13-trien-15-oic acid, 13-isopropyl-			
			Abieta-8,11,13-trien-16-oic acid			
			Abietic acid, dehydro-			
27	37.745	3.23	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Abietic acid	513378	000514-10-3	99
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]-			
			Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl-			
			L-abietic acid			
			Abietic acid	513347	000514-10-3	93
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]-			
			Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl-			
			L-abietic acid			
			Abietic acid	513344	000514-10-3	90
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]-			
			Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl-			
			L-abietic acid			
28	38.512	0.03	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Abietic acid	513344	000514-10-3	96
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]-			
			Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl-			
			L-abietic acid			
			.beta.-Pimaric acid	513374	000079-54-9	86
			.delta.6,8(14)-Abietadienoic acid			
			1-Pimaric acid			
			Sapletic acid			
			5-AZULENEPROPANAL, 6-FORMYLDECAHYDRO-3A,6-DIMETHYL-.BETA.-METHYLENE-1-(1-METHYLETHENYL)-, (1.ALPHA.,3A.BETA.,5.ALPHA.,6.BETA.,8A.ALPHA.)-	294173	069301-45-7	68
)-			
			3,4-DIOXO-3,4-SECOCLAVULARA-17-ENE			
29	38.534	0.04	D:\DATABASE\DEMO.L			
			Abietic acid	513344	000514-10-3	87
			oxylic acid, 1,2,3,4,4a,4b,5,6,10,10a-decahydro-1,4a-dimethyl-7-(1-methylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]-			

058.M Thu Oct 10 10:06:51 2019

Library Search Report

Data Path : F:\DATA MS\das\
 Data File : WLM-3-1-0-3persen.D
 Acq On : 5 Oct 2019 4:22 (#1); 5 Oct 2019 4:21 (#2)
 Operator :
 Sample :
 Misc :
 ALS Vial : 6 Sample Multiplier: 1

Search Libraries: D:\DATABASE\DEMO.L Minimum Quality: 0

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

Pk#	RT	Area%	Library/ID	Ref#	CAS#	Qual
			ethylethyl)-, [1R-(1.alpha.,4a.beta.,4b.alpha.,10a.alpha.)]- 55 Podocarpa-7,13-dien-15-oic acid, 13-isopropyl- 55 L-abietic acid			
			5-AZULENEPROPANAL, 6-FORMYLDECAHYDRO-3A,6-DIMETHYL-.BETA.-METHYLENE-1-(1-METHYLETHENYL)-, (1.ALPHA.,3A.BETA.,5.ALPHA.,6.BETA.,8A.ALPHA.)- 55 3,4-DIOXO-3,4-SECOCLAVULARA-17-ENE	294173	069301-45-7	76
			.beta.-Pimaric acid 55 .delta.6,8(14)-Abietadienoic acid 55 l-Pimaric acid 55 l-Sapietic acid	513374	000079-54-9	53

Lampiran 7. Dokumentasi

