

KOMBINASI SPEKTROSKOPI INFRAMERAH DAN KEMOMETRIKA UNTUK AUTENTIKASI MINYAK PALA (*Myristica fragrans*)

Selvi Adelia
17/412704/PA/18023

INTISARI

Penelitian tentang kombinasi spektroskopi inframerah dan kemometrika untuk autentikasi minyak pala (*Myristica fragrans*) telah dilakukan. Tujuan dari penelitian ini adalah mempelajari kombinasi spektroskopi FTIR dengan kemometrika untuk analisis pemalsuan minyak pala serta menganalisis model yang sesuai untuk autentikasi minyak pala dalam campuran minyak nabati.

Minyak pala dianalisis dengan kromatografi gas dan spektrometer massa (GC-MS). Kemudian minyak pala dan beberapa minyak nabati lainnya diukur dengan spektrometer *Fourier transform infrared* (FTIR). Spektra berbagai minyak tersebut dianalisis dengan *principal component analysis* (PCA). Minyak pala dicampur dengan minyak jarak dan *virgin coconut oil* (VCO) dalam variasi konsentrasi, lalu diukur dengan spektrometer FTIR. Hasil pembacaan spektra berbagai minyak campuran dianalisis dengan *partial least square* (PLS) dan *discriminant analysis* (DA).

Hasil PCA menunjukkan minyak nabati yang paling mirip dengan minyak pala adalah minyak jarak dan VCO. Pada analisis PLS minyak pala dalam campuran biner dengan minyak jarak menggunakan spektroskopi FTIR dan kemometrika terpilih rentang bilangan gelombang $1550\text{-}650\text{ cm}^{-1}$. Kurva kalibrasi menunjukkan nilai R^2 sebesar 0,9993 pada persamaan $y = 0,9993x + 0,0335$ dan nilai *root mean square error of calibration* (RMSEC) sebesar 0,790%. Nilai R^2 pada validasi analisis ini sebesar 0,9993 dengan persamaan $y = 1,001x - 0,0611$ serta nilai *root mean square error of prediction* (RMSEP) yang diperoleh sebesar 0,783%. Analisis PLS minyak pala dalam campuran biner dengan VCO terpilih rentang bilangan gelombang $955\text{-}765\text{ cm}^{-1}$. Nilai R^2 pada kalibrasi sebesar 0,9985 pada persamaan $y = 0,9984x + 0,0774$ serta nilai RMSEC sebesar 1,18%. Pada validasi analisis dengan VCO menghasilkan R^2 sebesar 0,9986 dengan persamaan $y = 0,9995x + 0,1092$ dan nilai RMSEP yang diperoleh sebesar 1,12%. Pada analisis diskriminan baik untuk minyak pala dengan campuran minyak jarak maupun VCO juga dapat dengan baik mengklasifikasikan antara minyak pala yang tercampur dengan minyak pala murni.

Kata kunci: autentikasi; kemometri; minyak pala; dan spektroskopi FTIR.

COMBINATION OF INFRARED SPECTROSCOPY AND CHEMOMETRICS FOR AUTHENTICATION OF NUTMEG OIL (*Myristica fragrans*)

Selvi Adelia
17/412704/PA/18023

ABSTRACT

Research on the combination of infrared spectroscopy and chemometrics for the authentication of nutmeg oil (*Myristica fragrans*) has been carried out. The purpose of this research was to study the combination of FTIR spectroscopy with chemometrics for the analysis of nutmeg oil adulteration and analysis the appropriate model for authenticating nutmeg oil in vegetable oil mixtures with FTIR spectroscopy and chemometrics.

Nutmeg oil was analyzed by gas chromatography and mass spectrometer (GC-MS). Then the nutmeg oil and other vegetable oils were recorded using a Fourier Transform Infrared (FTIR) spectrometer. The spectra of various oils were analyzed by principal component analysis (PCA). Nutmeg oil was mixed with castor oil and virgin coconut oil (VCO) in various concentrations, then the spectra were measured using an FTIR spectrometer. The results of the spectral readings of various mixed oils were analyzed by partial least squares (PLS) and discriminant analysis (DA).

The PCA results show that the most similar vegetable oils to nutmeg oil are castor oil and VCO. The wavenumber range of $1550\text{-}650\text{ cm}^{-1}$ was selected in the PLS analysis of nutmeg oil in a binary mixture with castor oil using FTIR spectroscopy and chemometrics. The calibration curve shows the R^2 value of 0.9993 for the equation of $y = 0.9993x + 0.0335$ with the RMSEC value of 0.790%. The R^2 value in the validation of this analysis is 0.9993 for the equation $y = 1.001x - 0.0611$ with the obtained RMSEP value of 0.783%. PLS analysis of nutmeg oil in a binary mixture with VCO selected in the wavenumber range of $955\text{-}765\text{ cm}^{-1}$. The R^2 value for the calibration is 0.9985 for the equation of $y = 0.9984x + 0.0774$ with the RMSEC value of 1.18%. In the validation analysis with VCO, the R is 0.9986 for the equation of $y = 0.9995x + 0.1092$ with the obtained RMSEP value of 1.12%. In the discriminant analysis, both nutmeg oil with a mixture of castor oil and VCO can also be classified properly between nutmeg oil mixed with pure nutmeg oil.

Keywords: authentication; chemometric; FTIR spectroscopy; and nutmeg oil.