

## INTISARI

Pasar minyak atsiri global pada 2023 diperkirakan bernilai \$11,41 miliar dan akan terus tumbuh hingga mencapai \$27,82 miliar pada 2032. Pertumbuhan ini mendorong praktik adulterasi, seperti pencampuran minyak serai wangi dengan minyak terpentin yang lebih murah. Meskipun metode gas kromatografi-massa (GC-MS) sering digunakan untuk autentikasi minyak serai wangi, metode ini tergolong mahal, memakan waktu, rumit, dan tidak ramah lingkungan. Penelitian ini menggunakan ATR-FTIR dan kemometrika untuk autentikasi minyak serai wangi, baik secara kualitatif maupun kuantitatif. Sampel disiapkan dengan berbagai konsentrasi adulterasi minyak serai wangi terhadap minyak terpentin (0% hingga 100%) dan beberapa produk komersial. Data spektra dianalisis menggunakan *Principal Component Analysis* (PCA) untuk model kualitatif, dengan interpretasi melalui *score plot* dan *loading plot*. Model kuantitatif dikembangkan dengan *Partial Least Square Regression* (PLS), dengan parameter  $R^2$ , RMSEC, dan RMSEP untuk menguji linearitas hubungan antara konsentrasi dan bilangan gelombang ATR-FTIR. Hasil penelitian menunjukkan bahwa pada analisis PCA, model terbaik diperoleh dengan menggunakan spektra normal tanpa perlakuan pada rentang bilangan gelombang  $1200 - 900 \text{ cm}^{-1}$ . Model ini menunjukkan kemampuan diskriminasi yang tinggi dengan nilai eigen PC1 sebesar 95,65% dan PC2 sebesar 3,84%. Untuk analisis PLS, model terbaik dikembangkan dengan menggunakan spektra yang telah diberi perlakuan turunan pertama pada rentang bilangan gelombang  $3600 - 1600 \text{ cm}^{-1}$ . Model kalibrasi PLS menghasilkan persamaan  $y = 0,99998x - 0,00001$ , dengan nilai  $R^2$  sebesar 1,0000, serta nilai RMSEC sebesar 0,00038, menunjukkan linearitas yang sangat tinggi. Model validasi PLS memberikan persamaan  $y = 1,0094x - 0,0007$ , dengan nilai  $R^2$  sebesar 0,9998 dan RMSEP sebesar 0,0085, menegaskan keakuratan dan presisi model dalam mendeteksi konsentrasi minyak serai wangi yang teradulterasi dengan minyak terpentin.

**Kata kunci : autentikasi, ATR-FTIR, minyak serai wangi, PCA, PLS**

## ABSTRAK

*The global essential oil market in 2023 is estimated to be valued at \$11.41 billion and is expected to grow to \$27.82 billion by 2032. This growth has encouraged adulteration practices, such as mixing citronella oil with cheaper turpentine oil. Although gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) is commonly used for citronella oil authentication, this method is expensive, time-consuming, complex, and not environmentally friendly. This study utilized ATR-FTIR and chemometrics for both qualitative and quantitative authentication of citronella oil. Samples were prepared with various adulteration concentrations of citronella oil with turpentine oil (0% to 100%) and several commercial products. Spectral data were analyzed using Principal Component Analysis (PCA) for the qualitative model, interpreted through score plots and loading plots. A quantitative model was developed using Partial Least Square Regression (PLS), with parameters  $R^2$ , RMSEC, and RMSEP used to evaluate the linearity between concentration and ATR-FTIR wavenumbers. The results showed that in PCA analysis, the best model was obtained using normal spectra without any pretreatment in the wavenumber range of  $1200 - 900 \text{ cm}^{-1}$ . This model demonstrated high discrimination ability with eigenvalues of 95.65% for PC1 and 3.84% for PC2. For PLS analysis, the best model was developed using first-derivative pretreated spectra in the wavenumber range of  $3600 - 1600 \text{ cm}^{-1}$ . The PLS calibration model produced the equation  $y = 0.99998x - 0.00001$ , with an  $R^2$  value of 1.0000 and an RMSEC of 0.00038, indicating excellent linearity. The PLS validation model resulted in the equation  $y = 1.0094x - 0.0007$ , with an  $R^2$  value of 0.9998 and an RMSEP of 0.0085, confirming the accuracy and precision of the model in detecting citronella oil adulterated with turpentine oil.*

**Keywords : authentication, ATR-FTIR, citronella oil, PCA, PLS**