

INTISARI

Cananga odorata form. *macrophylla* merupakan spesies kenanga khas Asia Tenggara dengan nilai ekonomi tinggi di Indonesia, yang rentan terhadap pemalsuan. Penelitian ini bertujuan untuk mengembangkan metode kombinasi ATR-FTIR dan PLS dalam memperkirakan konsentrasi pemalsu linalool dan β -kariofilen pada minyak kenanga serta PCA dalam mendeteksi keberadaan pemalsu linalool dan β -kariofilen dalam minyak kenanga komersial.

Penelitian dilakukan secara eksperimental dengan sampel berupa minyak kenanga murni, seri campuran minyak kenanga dengan pemalsu linalool serta pemalsu β -kariofilen, pemalsu murni, dan minyak kenanga komersial. Pengukuran menggunakan instrumen ATR-FTIR dengan resolusi 8 cm^{-1} , 32 kali *scanning*, dan pada rentang bilangan gelombang $4000\text{--}650\text{ cm}^{-1}$. Data dilakukan 3 jenis perlakuan (tanpa pra-pemrosesan, pra-pemrosesan 1st, dan pra-pemrosesan 2nd *derivative*). Rentang bilangan gelombang spektra FTIR dioptimasi pada rentang *fingerpint* dengan bantuan analisis PLS (berdasarkan nilai R^2 kalibrasi dan RMSEC).

Hasil analisis PLS kalibrasi menunjukkan bilangan gelombang optimasi yaitu $1475\text{--}1350\text{ cm}^{-1}$ pada data 2nd *derivative* untuk campuran minyak kenanga-pemalsu linalool serta $1475\text{--}1350\text{ cm}^{-1}$ pada data mentah untuk campuran minyak kenanga-pemalsu β -kariofilen. Hasil analisis PLS pada model kalibrasi menghasilkan nilai R^2 yang tinggi (0,9988 dan 0,9996), menunjukkan korelasi baik antara konsentrasi aktual dan terprediksi. Selain itu, analisis juga menunjukkan kesalahan kecil pada (berturut-turut pada kedua pemalsu) kalibrasi (RMSEC: 0,0117% dan 0,0060%), validasi internal (RMSECV: 0,0144% dan 0,0090%), dan validasi eksternal (RMSEP: 0,0413% dan 0,0168%), sehingga kedua model tersebut dapat digunakan untuk memperkirakan konsentrasi pemalsu linalool dan β -kariofilen dalam minyak kenanga (*Cananga odorata* form. *macrophylla*). PCA berhasil melihat pengelompokkan data sampel secara inheren, menunjukkan bahwa minyak kenanga komersial yang diuji tidak mengandung pemalsu linalool dan β -kariofilen. Metode kombinasi ATR-FTIR dan PCA terbukti efektif untuk autentikasi minyak kenanga dan mendeteksi keberadaan pemalsu.

Kata Kunci: Analisis, Adulterasi, ATR-FTIR, Kemometrika, Minyak Kenanga

ABSTRACT

Cananga odorata form. *macrophylla* is a typical Southeast Asian cananga species with high economic value in Indonesia, which is vulnerable to adulteration. This study aims to develop a combination method of ATR-FTIR and PLS in estimating the concentration of linalool and β -caryophyllene adulterants in ylang oil and PCA in detecting the presence of linalool and β -caryophyllene adulterants in commercial cananga oil.

The study was conducted experimentally with samples in the form of pure ylang oil, a series of mixtures of cananga oil with linalool adulterant and β -caryophyllene adulterant, pure adulterant, and commercial cananga oil. The measurement used ATR-FTIR instrument with a resolution of 8 cm^{-1} , 32 times scanning, and in the range of wave numbers $4000\text{-}650\text{ cm}^{-1}$. The data were subjected to 3 types of treatment (no pre-processing, 1st pre-processing, and 2nd derivative pre-processing). The wave number range of FTIR spectra was optimized in the fingerprint range with the help of PLS analysis (based on calibration R^2 and RMSEC values).

The results of the calibration PLS analysis showed the optimized wave numbers of $1475\text{-}1350\text{ cm}^{-1}$ in the 2nd derivative data for the linalool-cannabis oil mixture and $1475\text{-}1350\text{ cm}^{-1}$ in the raw data for the β -caryophyllene-cannabis oil mixture. The results of PLS analysis on the calibration models yielded high R^2 values (0.9988 and 0.9996), indicating a good correlation between actual and predicted concentrations. In addition, the analysis also showed small errors in (respectively on both adulterants) calibration (RMSEC: 0.0117% and 0.0060%), internal validation (RMSECV: 0.0144% and 0.0090%), and external validation (RMSEP: 0.0413% and 0.0168%), so both models can be used to estimate the adulterant concentrations of linalool and β -caryophyllene in cananga (*Cananga odorata* form. *macrophylla*) oil. PCA was successful in seeing the inherent clustering of the sample data, indicating that the commercial cananga oil tested did not contain linalool and β -caryophyllene adulterants. The combined method of ATR-FTIR and PCA proved effective for the authentication of cananga oil and detecting the presence of adulterants.

Keywords: Analysis, Adulteration, ATR-FTIR, Chemometrics, Cananga Oil