

**KOMBINASI SPEKTROSKOPI INFRAMERAH DAN KEMOMETRIKA
UNTUK AUTENTIKASI MINYAK NILAM YANG DIPALSUKAN
DENGAN MINYAK JARAK DAN MINYAK SAWIT**

Muhammad Zaki Fahmi
14/369006/PA/16336

INTISARI

Penelitian tentang kombinasi spektroskopi inframerah dan kemometrika untuk autentikasi minyak nilam yang dipalsukan dengan minyak jarak dan minyak sawit telah selesai dilakukan. Tujuan penelitian ini adalah untuk mengetahui apakah kombinasi spektroskopi FTIR dengan kemometrika dapat digunakan untuk analisis minyak nilam dalam campuran minyak jarak dan minyak sawit serta untuk mengetahui model yang sesuai untuk analisis minyak nilam dalam campuran minyak jarak dan minyak sawit dengan spektroskopi FTIR dan kemometrika.

Minyak nilam dan berbagai minyak nabati dibaca spektranya menggunakan spektrofotometer inframerah *Fourier transform* (FTIR). Spektra inframerah minyak nilam dan minyak lainnya dianalisis menggunakan *principal component analysis* (PCA). Minyak nilam dicampur dengan minyak jarak dan minyak sawit dalam berbagai konsentrasi, kemudian diukur spektranya menggunakan spektrofotometer FTIR. Analisis spektra inframerah untuk identifikasi dan kuantifikasi dilakukan dengan kemometrika kalibrasi multivariat *partial least square* (PLS). Selain itu, komposisi penyusun minyak nilam diukur dan dianalisis dengan kromatografi gas dan spektrometer massa.

Berdasarkan PCA, minyak nilam mempunyai kemiripan dengan minyak jarak dan minyak sawit. Dari hasil optimasi pada berbagai rentang frekuensi dengan PLS, spektra normal pada rentang frekuensi $1200-1000\text{ cm}^{-1}$ dipilih untuk mengukur konsentrasi minyak sawit dalam minyak nilam dengan nilai R^2 sebesar 0,9856 dan nilai RMSEC sebesar 4,57% pada model kalibrasi, sedangkan pada model validasi diperoleh R^2 sebesar 0,9984 dan nilai RMSEP sebesar 1,79%. Spektra normal pada rentang frekuensi $1200-1000\text{ cm}^{-1}$ dipilih untuk mengukur konsentrasi minyak jarak dalam minyak nilam dengan nilai R^2 sebesar 0,9816 dan RMSEC sebesar 6,89% pada kalibrasi, sedangkan pada validasi diperoleh nilai R^2 sebesar 0,9974 dan nilai RMSEP sebesar 2,57%. Kombinasi spektroskopi FTIR dan kemometrika mampu menghasilkan model yang sesuai untuk studi autentikasi minyak nilam dalam campuran minyak sawit dan minyak jarak. Klasifikasi menggunakan analisis diskriminan menunjukkan bahwa metode yang dikembangkan sukses mengklasifikasikan minyak nilam murni dan minyak nilam yang dipalsukan dengan minyak sawit maupun minyak jarak dengan tanpa kesalahan.

Kata kunci: spektroskopi inframerah, kemometrika, minyak nilam, pemalsuan.

COMBINATION OF INFRARED SPECTROSCOPY AND CHEMOMETRICS FOR ANALYSIS OF PATCHOULI OIL ADULTERATED WITH CASTOR OIL AND PALM OIL

Muhammad Zaki Fahmi
14/369006/PA/16336

ABSTRACT

Research on the combination of infrared spectroscopy and chemometrics for analysis of patchouli oil adulterated with castor oil and palm oil has been carried out. The aim of this study was to find out whether FTIR spectroscopy combined with chemometrics could be used for the analysis of patchouli oil in the mixtures with castor oil and palm oil and to find out appropriate model for the analysis of patchouli oil in both mixtures by FTIR spectroscopy and chemometrics.

The spectra of patchouli oil and various vegetable oils were scanned using Fourier Transform Infrared Spectrophotometer (FTIR). The spectra of patchouli oil and other oils were analyzed using principal component analysis (PCA). Identification and quantitative analysis of patchouli oil adulterated with castor oil and palm oil was carried out with multivariate calibration of partial least square (PLS) regression. In other hand, the composition of patchouli oil were analyzed by gas chromatography-mass spectrometer.

Based on PCA, patchouli oil has the close similarity with castor oil and palm oil. From the optimization results, FTIR normal spectra in the frequency region of 1200-1000 cm^{-1} were chosen to measure the palm oil concentration in patchouli oil with R^2 value of 0,9856 and root mean square error of calibration (RMSEC) of 4,57 % in calibration models. In addition, R^2 and root mean square error of prediction (RMSEP) values of 0,9984 and 1,79% were obtained during validation. The normal spectra in the frequency region 1200-1000 cm^{-1} was chosen to quantify the castor oil concentration in patchouli oil with R^2 value of 0,9816 and RMSEC of 6,89% in calibration, while in validation model, the R^2 value of 0,9974 and RMSEP of 2,57% were obtained. The combination of FTIR spectroscopy and chemometrics provided an appropriate model for studying the authentication of patchouli oil adulterated with palm oil and castor oil. The classification using Discriminant Analysis revealed that the developed method could successfully classify pure patchouli oil and patchouli oil adulterated with palm oil and castor oil without misclassified.

Keywords: infrared spectroscopy, chemometrics, patchouli oil, adulteration