

**FORMULASI PARFUM CAMPURAN FRUKTON, LIMONENA, DAN AMBROXAN
DENGAN PELARUT ETANOL MENGGUNAKAN PENDEKATAN *PERFUMERY TERNARY*
*DIAGARAM (PTD)***

SKRIPSI

diajukan untuk memenuhi salah satu syarat memperoleh Gelar Sarjana Sains
Program Studi Kimia



oleh

Riska Kurnelia Ananda
NIM 1900322

PROGRAM STUDI KIMIA
FAKULTAS PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS PENDIDIKAN INDONESIA
BANDUNG
2023

**FORMULASI PARFUM CAMPURAN FRUKTON, LIMONENA, DAN
AMBROXAN DENGAN PELARUT ETANOL MENGGUNAKAN
PENDEKATAN *PERFUMERY TERNARY DIAGRAM* (PTD)**

Oleh
Riska Kurnelia Ananda

Skripsi yang diajukan untuk memenuhi sebagian syarat memperoleh gelar
Sarjana Sains pada Program Studi Kimia Fakultas Pendidikan Matematika dan
Ilmu Pengetahuan Alam

© Riska Kurnelia Ananda 2023
Universitas Pendidikan Indonesia
Agustus 2023

Hak Cipta dilindungi Undang-Undang
Skripsi ini tidak boleh diperbanyak seluruhnya atau sebagian,
dengan dicetak ulang, difotokopi, atau cara lainnya tanpa izin dari penulis

LEMBAR PENGESAHAN

**FORMULASI PARFUM CAMPURAN FRUKTON, LIMONENA, DAN
AMBROXAN DENGAN PELARUT ETANOL DENGAN
MENGUNAKAN PENDEKATAN *PERFUMERY TERNARY DIAGRAM*
(PTD)**

Oleh,

Riska Kurnelia Ananda

1900322

Disetujui oleh:

Pembimbing I,



Prof. Dr. H. R. Asep Kadarohman, M.Si
NIP. 196305011987031002

Pembimbing II,



Prof. Dr. Rathaningsih Eko Sardjono, M. Si.
NIP. 196904191992032002

Mengetahui,

Ketua Program Studi Kimia



Prof. Fitri Khoerunnisa, Ph.D.
NIP. 197806282001122001

PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi saya dengan judul **"Formulasi Parfum Campuran Frukton, Limonena, dan Ambroxan dengan Pelarut Etanol menggunakan Pendekatan *Perfumery Ternary Diagram* (PTD)"** ini beserta seluruh isinya adalah benar-benar karya saya sendiri. Saya tidak melakukan penjiplakan atau pengutipan dengan cara-cara yang tidak sesuai dengan etika ilmu yang berlaku dalam masyarakat keilmuan. Atas pernyataan ini, saya siap menanggung risiko/sanksi apabila di kemudian hari ditemukan adanya pelanggaran etika keilmuan atau ada klaim dari pihak lain terhadap keaslian karya saya ini.

Bandung, 4 Agustus 2023

Yang Membuat Pernyataan

Riska Kurnelia Ananda

NIM 1900322

UCAPAN TERIMA KASIH

Puji dan syukur penulis panjatkan ke hadirat Allah Swt. yang telah memberikan kesehatan dan juga kemudahan dalam semua proses penelitian sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini. Dalam penelitian dan penyusunan skripsi ini penulis banyak menerima bantuan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, pada kesempatan ini penulis ingin menyampaikan rasa terima kasih kepada seluruh pihak yang telah berpartisipasi dan membantu penulis, terutama kepada:

1. Bapak Saharin dan Ibu Kurniadiani selaku orang tua penulis yang senantiasa mendoakan dan memberikan dukungan baik moril maupun material serta Barkah Akbar selaku saudara laki-laki penulis. Gelar ini saya dedikasikan untuk kedua orang tua saya tercintah.
2. Bapak Prof. Dr. H. R. Asep Kadarohman, M.Si. selaku pembimbing I yang telah memberikan arahan, bimbingan, dan masukan kepada penulis selama penelitian dan penyusunan skripsi.
3. Ibu Prof. Ratnaningsih Eko Sardjono, M.Si. selaku pembimbing II yang telah memberikan bimbingan, saran, dan arahan kepada penulis dalam proses penelitian dan penulisan skripsi.
4. Bapak Gun Gun Gumilar, M.Si. selaku Ketua KBK Kimia Hayati yang telah membeikan arahan dan masukkan selama perkuliahan.
5. Ibu Dr. Heli Siti Halimatul Munawaroh, M.Si. selaku pembimbing akademik yang selalu memberikan dukungan selama perkuliahan.
6. Ibu Prof. Fitri Khoerunnisa, Ph.D. selaku ketua Program Studi Kimia FPMIPA UPI.
7. Dosen, Laboran, serta seluruh staf Departemen Pendidikan Kimia FPMIPA UPI yang telah memberikan pengetahuan kepada penulis.
8. Akang Fikri Zaki Aditama, S.Si. dan Teh Selmi Fiqhi Khoiriah, S.Si. yang telah membantu dalam proses pemrograman.
9. Teria Lestari dan Allisa Nur Rahma selaku sahabat penulis yang telah menemani, membantu, dan mendukung penulis selama proses penelitian dan penyusunan skripsi.

Riska Kurnelia Ananda, 2023

FORMULASI PARFUM CAMPURAN FRUKTON, LIMONENA, DAN AMBROXAN DENGAN PELARUT ETANOL MENGGUNAKAN PENDEKATAN PERFUMERY TERNARY DIAGRAM (PTD)

Universitas Pendidikan Indonesia | repository.upi.edu | perpustakaan.upi.edu

10. Tio Hasparabi selaku teman seperjuangan yang telah menemani proses penelitian dan penyusunan skripsi.
11. Jihan Nurafifah Hernawan, Galih Wicaksono, Muhammad Daffa Putra, dan Sifa Aulia Rahma selaku teman satu bimbingan.
12. Jihan Nurafifah Hernawan, Deaniar Hafilah selaku teman satu kosan dan seperjuangan yang telah menemani proses penelitian dan penyusunan skripsi.
13. Teman-teman seperjuangan Kimia 2019C, KBK Kimia Hayati, serta seluruh rekan Kimia 2019.
14. Seluruh pihak yang telah membantu penulis yang tidak bisa penulis sebutkan satu per satu.
15. Saya berterima kasih banyak kepada diri saya sendiri atas perjuangan dan pengorbanan yang telah dilakukan.

Semoga seluruh amal baik yang telah diberikan akan mendapat balasan yang lebih baik dari Allah SWT.

Bandung, 4 Agustus 2023

Penulis,

Riska Kurnelia Ananda

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk menentukan fraksi mol dan aroma parfum campuran yang terdiri atas limonena, frukton, ambroxan dalam pelarut etanol menggunakan pendekatan *Perfumery Ternary Diagram* (PTD). Pembuatan program dilakukan menggunakan MATLAB. Program yang dibuat kemudian divalidasi dengan membandingkan data hasil dari program yang dibuat dengan data pada jurnal yang dirujuk. Komposisi parfum yang dibuat ditentukan berdasarkan tahapan penentuan *odor threshold*, penentuan fraksi mol, preparasi sampel untuk menentukan koefisien aktivitas, dan penentuan *odor value* (OV). Penentuan *odor threshold* frukton dilakukan menggunakan alat *olfactometer* dan data *odor threshold* senyawa lain merujuk pada data literatur yang ada. Dilakukan pengujian pada parfum meliputi uji organoleptik berdasarkan standar SNI 16-4949-1989, uji daya tahan, uji tingkat kesukaan, dan uji keamanan. Uji tingkat kesukaan dan keamanan parfum dilakukan menggunakan 30 responden tidak terlatih. Ditemukan bahwa program PTD memiliki validitas yang tinggi berdasarkan hasil perhitungan K_i^* dan koefisien aktivitas. *Odor threshold* frukton $4,06 \times 10^{-6} \text{ g/m}^3$, limonena $2,45 \times 10^{-3} \text{ g/m}^3$, ambroxan $2,90 \times 10^{-6} \text{ g/m}^3$, dan etanol $5,53 \times 10^{-2} \text{ g/m}^3$. Komposisi fraksi mol parfum hasil perhitungan PTD, frukton 0,003; limonena 0,625; ambroxan 0,072; dan etanol 0,300. Koefisien aktivitas hasil perhitungan PTD, frukton 4,47; limonena 1,25; ambroxan 1,19; dan etanol 3,16. OV hasil perhitungan PTD, frukton 3544,5; limonena 3580,5; ambroxan 3536,3; dan etanol 2311,3. Parfum yang dibuat memenuhi standar dan memiliki ketahanan lebih dari empat jam, sangat disukai serta tidak menimbulkan alergi dan iritasi. Aroma parfum yang dibuat berdasarkan fraksi mol hasil perhitungan PTD terbukti merupakan campuran ketiga aroma (frukton, limonena, dan ambroxan) bahan yang dicampurkan

Kata kunci: Formulasi, Parfum, Frukton, PTD

ABSTRACT

This study aims to determine the mole fraction and aroma of mixed perfume consisting of limonene, fructone, ambroxan in ethanol solvent using the Perfumery Ternary Diagram (PTD) approach. Programming was done using MATLAB. The program created was then validated by comparing the resulting data from the program made with data in the referenced journal. The composition of the perfume made was determined based on the stages of determining the odor threshold, determining the mole fraction, sample preparation to determine the activity coefficient, and determining the odor value (OV). Determination of fructone odor threshold was carried out using an olfactometer and other compound odor threshold data referred to the existing literature data. Tests made for perfumes included organoleptic tests based on SNI 16-4949-1989 standards, durability tests, preference level tests, and safety tests. Perfume preference and safety level tests were carried out using 30 untrained respondents. It was found that the PTD program has high validity based on the results of calculating K_i^ and activity coefficients. Odor threshold fructone was 4.06×10^{-6} g/m³, limonene 2.45×10^{-3} g/m³, ambroxan 2.90×10^{-6} g/m³, and ethanol 5.53×10^{-2} g/m³. The composition of the mole fraction calculated by PTD was fructone 0.003; limonene 0.625; ambroxan 0.072; and 0.300 ethanol. PTD calculated activity coefficient which resulted fructone 4.47; limonene 1.25; ambroxan 1.19; and ethanol 3.16. OV PTD calculation results, fructone 3544.5; limonene 3580.5; ambroxan 3536.3; and ethanol 2311.3. The perfumes that were made meet the standards and have a longevity of more than four hours, are highly preferred and do not cause allergies and irritation. The fragrance of the perfume which was made based on the mole fraction of the PTD calculation results proved to be a mixture of the three aromas (fructone, limonene, and ambroxan) which were mixed together.*

Keywords: *Formulation, Perfume, Frukton, PTD*

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI.....	iii
UCAPAN TERIMA KASIH.....	iv
ABSTRAK.....	vi
ABSTRACT.....	vii
DAFTAR ISI.....	viii
DAFTAR TABEL.....	x
DAFTAR GAMBAR.....	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
1.5 Struktur Organisasi Skripsi.....	4
Bab II Kajian Pustaka.....	5
2.1 Parfum.....	5
2.2 <i>Perfumery Ternary Diagram</i> (PTD).....	6
2.2.1 Koefisien Aktivitas (γ).....	8
2.2.1.1 Penentuan Bagian Kombinatorial.....	10
2.2.1.2 Penentuan Bagian Residu.....	10
2.2.2 Nilai K_i^*	11
2.2.3 <i>Odor Value</i> (OV).....	12
2.3 Limonena.....	15
2.4 Fruktan.....	15
2.5 Ambroxan.....	16
Bab III Metode Penelitian.....	18
3.1 Waktu dan Lokasi Penelitian.....	18
3.2 Alat dan Bahan.....	18
3.2.1 Alat.....	18

Riska Kurnelia Ananda, 2023

FORMULASI PARFUM CAMPURAN FRUKTON, LIMONENA, DAN AMBROXAN DENGAN PELARUT ETANOL MENGGUNAKAN PENDEKATAN PERFUMERY TERNARY DIAGRAM (PTD)

Universitas Pendidikan Indonesia | repository.upi.edu | perpustakaan.upi.edu

3.2.2 Bahan.....	18
3.3 Desain Penelitian	19
3.4 Prosedur Penelitian	19
3.4.1 Validasi Program.....	19
3.4.1.1 Koefisien Aktivitas (γ).....	20
3.4.1.2 Program Nilai K_i^*	21
3.4.2 Penentuan <i>Odor Threshold (Thr)</i> , Fraksi Mol (x), Koefisien Aktivitas (γ), dan Odor Value (OV) Hasil Perhitungan Program PTD.....	21
3.4.3 Formulasi Parfum.....	24
Bab IV Temuan dan Pembahasan.....	26
4.1 Validasi Program	26
4.1.1 Program Koefisien Aktivitas (γ).....	26
4.1.2 Program Nilai K_i^*	28
4.2 <i>Odor Threshold (Thr)</i> , Fraksi Mol (x), Koefisien Aktivitas (γ), dan Odor Value (OV) Hasil Perhitungan PTD	29
4.3 Formulasi Parfum.....	31
Bab V Kesimpulan dan Saran.....	36
5.1 Kesimpulan.....	36
5.2 Saran.....	36
DAFTAR PUSTAKA	37
LAMPIRAN	40

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Sifat Fisika dan Kimia Senyawa Limonena	15
Tabel 2.2 Sifat Fisika dan Kimia Senyawa Frukton	16
Tabel 2.3 Sifat Fisika dan Kimia Senyawa Ambroxan	17
Tabel 3.1 Variasi Komposisi Campuran untuk Validasi.....	20
Tabel 4.1. Nomor Kelompok dan Subkelompok UNIFAC yang terdapat di Setiap Molekul dalam Campuran Parfum	26
Tabel 4.2. Perbandingan Koefisien Aktivitas Literatur dan Hasil Perhitungan.....	27
Tabel 4.3. Sifat Fisik Tiap Senyawa Campuran Parfum Uji	28
Tabel 4.4. Perbandingan Nilai K_i^* Literatur dan Nilai K_i^* Percobaan Tiap Senyawa Campuran Parfum	28
Tabel 4.5 Data Sifat Fisik Senyawa Penyusun Parfum	29
Tabel 4.6 Nomor Kelompok dan Subkelompok UNIFAC yang terdapat di Setiap Molekul dalam Campuran Parfum Uji	29
Tabel 4.7 Data Fraksi Mol, Koefisien Aktivitas, dan OV dari Limonena, Frukton, Ambroxan, dan Etanol	30
Tabel 4.8 Data Gram yang dibutuhkan dalam Formulasi Parfum	32

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Struktur Parfum diwakili oleh Piramida Carles	5
Gambar 2.2 Skema Diagram Terner yang Mewakili Satu Komposisi	7
Gambar 2.3. Struktur Limonena	15
Gambar 2.4 Struktur Fruktan.....	16
Gambar 2.5 Struktur Ambroxan.....	16
Gambar 3.1 Desain Penelitian Formulasi Parfum menggunakan Pendekatan PTD	19
Gambar 3.2 Bagan Alir Penentuan Komposisi Parfum.....	22
Gambar 4.1 Diagram Terner Komposisi Parfum	31
Gambar 4.2 Sampel <i>Juice</i> Parfum (Kiri) dan Sampel Parfum <i>Eau De Parfum</i> (Kanan).....	32
Gambar 4.3 Grafik Uji Ketahanan Wangi	33
Gambar 4.4 Grafik Tingkat Kesukaan Sampel Parfum <i>Eau De Parfum</i>	34
Gambar 4.5 Grafik Reaksi Alergi dan Iritasi	35

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Foto Pengamatan.....	40
Lampiran 2. Perhitungan Formulasi Parfum.....	42
Lampiran 3. Tingkat Kesukaan	43

DAFTAR PUSTAKA

- Adli, K. N., & Pramudono, B. (2015). Studi Campuran Surfactant untuk Menentukan Fungsi Solubilizer dan Fixative pada Industri Parfum. *Indonesian Journal of Mathematics and Natural Sciences*, 38(1), 57-67. <https://doi.org/10.15294/ijmns.v38i1.5487>
- Api, A. M., Belsito, D., Botelho, D., Bruze, M., Burton Jr, G. A., Buschmann, J., ... & Tsang, S. (2018). RIFM fragrance ingredient safety assessment, ethyl 2-methyl-1, 3-dioxolane-2-acetate, CAS Registry Number 6413-10-1. *Food and Chemical Toxicology*, 122, S438-S444. <https://doi.org/10.1016/j.fct.2018.09.076>
- Cain, W. S., Schiet, F. T., Olsson, M. J., & de Wijk, R. A. (1995). Comparison of models of odor interaction. *Chemical senses*, 20(6), 625-637. <https://doi.org/10.1093/chemse/20.6.625>
- Calkin, R. R., & Jellinek, J. S. (1994). *Perfumery: practice and principles*. John Wiley & Sons.
- Carles, J. (2006). A method of creation in perfumery. *Fafai Journal*, 8(3), 43.
- Cussler, E. L. (2009). *Diffusion: mass transfer in fluid systems*. Cambridge university press.
- Fredenslund, A., Jones, R. L., & Prausnitz, J. M. (1975). Group-contribution estimation of activity coefficients in nonideal liquid mixtures. *AIChE Journal*, 21(6), 1086-1099. <https://doi.org/10.1002/aic.690210607>
- Gomes, P. B., Mata, V. G., & Rodrigues, A. E. (2008). Experimental validation of perfumery ternary diagram® methodology. *AIChE journal*, 54(1), 310-320. <https://doi.org/10.1002/aic.11353>
- Gunawan, I., & Rahayu, P. (2021). Formulasi dan Evaluasi Parfum Tipe Eau de Toilette (EDT)“Senarai Jingga”. *Jurnal Kesehatan*, 12(2), 257-265. <http://dx.doi.org/10.26630/jk.v12i2.2637>
- Halder, G. (2014). *Introduction to chemical engineering thermodynamics*. PHI Learning Pvt. Ltd.
- Hindmarsh, A. C. (1976). *Preliminary documentation of GEARIB: solution of implicit systems of ordinary differential equations with banded Jacobian* (No. UCID-30130). California Univ., Livermore (USA). Lawrence Livermore Lab.

- Kim, Y. W., Kim, M. J., Chung, B. Y., Bang, D. Y., Lim, S. K., Choi, S. M., ... & Lee, B. M. (2013). Safety evaluation and risk assessment of d-limonene. *Journal of Toxicology and Environmental Health, Part B*, 16(1), 17-38. <https://doi.org/10.1080/10937404.2013.769418>
- Kotseridis, Y., Baumes, R., & Skouroumounis, G. K. (1998). Synthesis of labelled [2H4] β -damascenone, [2H2] 2-methoxy-3-isobutylpyrazine, [2H3] α -ionone, and [2H3] β -ionone, for quantification in grapes, juices and wines. *Journal of Chromatography A*, 824(1), 71-78. [https://doi.org/10.1016/S0021-9673\(98\)00650-5](https://doi.org/10.1016/S0021-9673(98)00650-5)
- Madsen, N. K., & Sincovec, R. F. (1979). Algorithm 540: PDECOL, general collocation software for partial differential equations [D3]. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 5(3), 326-351. <https://doi.org/10.1145/355841.355849>
- Martínez-Guido, S. I., González-Campos, J. B., del Río, R. E., Ponce-Ortega, J. M., Nápoles-Rivera, F., Serna-González, M., & El-Halwagi, M. M. (2014). A multiobjective optimization approach for the development of a sustainable supply chain of a new fixative in the perfume industry. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 2(10), 2380-2390. <https://doi.org/10.1021/sc500409g>
- Mata, V. G., Gomes, P. B., & Rodrigues, A. E. (2005a). Effect of nonidealities in perfume mixtures using the perfumery ternary diagrams (PTD) concept. *Industrial & engineering chemistry research*, 44(12), 4435-4441. <https://doi.org/10.1021/ie048760w>
- Mata, V. G., Gomes, P. B., & Rodrigues, A. E. (2005b). Engineering perfumes. *AIChE journal*, 51(10), 2834-2852. <https://doi.org/10.1002/aic.10530>
- Mata, V. G., Gomes, P. B., & Rodrigues, A. E. (2005c). Perfumery ternary diagrams (PTD): a new concept applied to the optimization of perfume compositions. *Flavour and fragrance journal*, 20(5), 465-471. <https://doi.org/10.1002/ffj.1590>
- Mata, V. G., & Rodrigues, A. E. (2006). A new methodology for the definition of odor zones in perfumery ternary diagrams. *AIChE journal*, 52(8), 2938-2948. <https://doi.org/10.1002/aic.10894>
- Mustakim, M. N., & Sari, M. (2019). Pemanfaatan Minyak Biji Kopi (Fine Robusta Toyomerto) sebagai Bahan Baku Pembuatan Parfum Eau De Toilette. *Agroindustrial Technology Journal*, 3(1), 20-28. <https://doi.org/10.21111/atj.v3i1.3793>

- Pybus, D. H., & Sell, C. S. (Eds.). (1999). *The chemistry of fragrances* (Vol. 17). Royal Society of Chemistry.
- Poling, B. E., Prausnitz, J. M., & O'Connell, J. P. (2001). *Properties of gases and liquids*. McGraw-Hill Education.
- Reid, R. C., Prausnitz, J. M., & Poling, B. E. (1987). *The Properties of Gases and Liquids*. McGraw-Hill, New York.
- Rodrigues, A. E., Nogueira, I., & Faria, R. P. (2021). Perfume and Flavor Engineering: A Chemical Engineering Perspective. *Molecules*, 26(11), 3095. <https://doi.org/10.3390/molecules26113095>
- Teixeira, M. A., Rodríguez, O., Mata, V. G., & Rodrigues, A. E. (2009). The diffusion of perfume mixtures and the odor performance. *Chemical Engineering Science*, 64(11), 2570-2589. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2009.01.064>
- Teixeira, M. A., Rodriguez, O., & Rodrigues, A. E. (2010). The perception of fragrance mixtures: A comparison of odor intensity models. *AIChE journal*, 56(4), 1090-1106. <https://doi.org/10.1002/aic.12043>
- Tricahyani, I. A. K., & Wrsiati, L. P. (2019). Strategi Peningkatan Pemasaran Produk Body Scrub Di Pt. Arjuna Yoga Sakti Denpasar. *Jurnal Rekayasa dan Manajemen Agroindustri ISSN*, 2503, 488X.
- Van Gemert, L. J. (2011). Odour thresholds. *Compilations of odour threshold values in air, water and other media*, 2. The Netherlands: Oliemans Punter & Partners BV.