

**FORMULASI PARFUM CAMPURAN HEKSIL ASETAT, FRUKTON,  
AMBROXAN, DAN HELVETOLIDA DENGAN PELARUT ETANOL  
MENGUNAKAN PENDEKATAN *ODOR VALUE* (OV)**

SKRIPSI

diajukan untuk memenuhi salah satu syarat memperoleh Gelar Sarjana Sains

Program Studi Kimia



Oleh

Erdifa Ghaniyya Hasanah

NIM 2006908

PROGRAM STUDI KIMIA

FAKULTAS PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS PENDIDIKAN INDONESIA

BANDUNG

2024

**FORMULASI PARFUM CAMPURAN HEKSIL ASETAT, FRUKTON,  
AMBROXAN, DAN HELVETOLIDA DENGAN PELARUT ETANOL  
MENGUNAKAN PENDEKATAN *ODOR VALUE* (OV)**

Oleh  
Erdifa Ghaniyya Hasanah

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

© Erdifa Ghaniyya Hasanah 2024  
Universitas Pendidikan Indonesia  
Agustus 2024

Hak Cipta dilindungi Undang-Undang  
Skripsi ini tidak boleh diperbanyak seluruhnya atau sebagian,  
D engan dicetak ulang, difoto kopi, atau cara lainnya tanpa izin dari penulis

ERDIFA GHANIYYA HASANAH

FORMULASI PARFUM CAMPURAN HEKSIL ASETAT, FRUKTON,  
AMBROXAN, DAN HELVETOLIDA DENGAN PELARUT ETANOL  
MENGUNAKAN PENDEKATAN *ODOR VALUE* (OV)

Disetujui dan disahkan oleh pembimbing:

Pembimbing I,



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

NIP. 196305091987031002

Pembimbing II,



Prof. Dr. Ratnaningsih Eko Sardjono, M.Si.

NIP. 196904191992032002

Mengetahui,

Ketua Program Studi Kimia



Prof. Fitri Khoerunnisa, Ph.D

NIP. 197806282001122001

## ABSTRAK

Kebutuhan masyarakat akan parfum yang terus meningkat menuntut para ahli parfum untuk mengembangkan formulasi yang baru. Sejalan dengan perkembangan ilmu pengetahuan, para ahli parfum telah mengembangkan formulasi parfum dengan pendekatan *Odor Value* yang diadaptasi dan dikembangkan dari pendekatan *Perfumery Ternary Diagram* (PTD). Penelitian ini bertujuan menentukan aroma parfum campuran heksil asetat, frukton, ambroxan, dan helvetolida dengan pelarut etanol menggunakan pendekatan *Odor Value*. Pembuatan program ini dilakukan dengan bantuan perangkat lunak MATLAB. Komposisi parfum yang dibuat ditentukan berdasarkan *odor threshold*, fraksi mol, koefisien aktivitas, dan *Odor Value* (OV). Parfum yang dibuat diuji berdasarkan SNI 16-4949-1998, meliputi uji organoleptik, uji daya tahan, uji tingkat kesukaan, dan uji keamanan, dengan jumlah responden sebanyak 30 orang tidak terlatih sesuai SNI 01-2346-2006. Ditemukan, *odor threshold* heksil asetat  $1,70 \times 10^{-5} \text{ g/m}^3$ , frukton  $4,06 \times 10^{-6} \text{ g/m}^3$ , ambroxan  $2,90 \times 10^{-6} \text{ g/m}^3$ , *helvetolida*  $1,70 \times 10^{-6} \text{ g/m}^3$ , dan etanol  $5,53 \times 10^{-2} \text{ g/m}^3$ . Komposisi fraksi mol heksil asetat 0,028; frukton 0,049; ambroxan 0,397; *helvetolida* 0,226; dan etanol 0,300. Koefisien aktivitas heksil asetat 1,16; frukton 1,34; ambroxan 1,28; *helvetolida* 1,03; dan etanol 2,58. *Odor Value* (OV) heksil asetat 20420,9; frukton 20478,1; ambroxan 20895,3; *helvetolida* 20889,7; dan etanol 1888,8. Parfum yang dibuat dengan pendekatan *Odor Value* memenuhi standar uji dengan ketahanan selama 10,5 jam. Jumlah responden yang menyukai aroma parfum sebanyak 97% dan semua responden tidak mengalami alergi. Aroma parfum yang dihasilkan terbukti sebagai campuran dari keempat senyawa, yaitu segar dengan sentuhan aroma buah dan sensasi yang manis.

**Kata kunci:** Aroma, Formulasi Parfum, Pendekatan *Odor Value*

## ABSTRACT

*The increasing public demand for perfume requires perfume experts to develop new formulations. In line with the development of science, perfume experts have developed perfume formulations with the Odor Value approach which is adapted and developed from the Perfumery Ternary Diagram (PTD) approach. This study aims to determine the aroma of a mixture of hexyl acetate, fructose, ambroxane, and helvetolide perfume with ethanol solvent using the Odor Value approach. This program was created with the help of MATLAB software. The composition of the perfume made was determined based on the odor threshold, mole fraction, activity coefficient, and Odor Value (OV). The perfume made was tested based on SNI 16-4949-1998, including organoleptic tests, durability tests, preference level tests, and safety tests, with 30 untrained respondents according to SNI 01-2346-2006. It was found that the odor threshold hexyl acetate  $1,70 \times 10^{-5} \text{ g/m}^3$ , fructose  $4,06 \times 10^{-6} \text{ g/m}^3$ , ambroxan  $2,90 \times 10^{-6} \text{ g/m}^3$ , helvetolide  $1,70 \times 10^{-6} \text{ g/m}^3$ , and ethanol  $5,53 \times 10^{-2} \text{ g/m}^3$ . The composition of the mole fraction of hexyl acetate was 0.028; fructose 0.049; ambroxan 0.397; helvetolide 0.226; and ethanol 0.300. The activity coefficient of hexyl acetate was 1.16; fructose 1.34; ambroxan 1.28; helvetolide 1.03; and ethanol 2.58. Odor Value (OV) hexyl acetate 20420.9; fructose 20478.1; ambroxan 20895.3; helvetolide 20889.7; and ethanol 1888.8. The perfume made with the Odor Value approach meets the test standards with a durability of 10.5 hours. The number of respondents who like the scent of the perfume is 97% and all respondents do not have allergies. The resulting perfume aroma is proven to be a mixture of the four compounds, namely fresh with a touch of fruity aroma and a sweet sensation.*

**Keywords:** *Aroma, Odor value approach, Perfume Formulation*

## DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN .....	ii
PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI.....	iii
KATA PENGANTAR .....	iv
UCAPAN TERIMA KASIH.....	v
ABSTRAK.....	vii
ABSTRACT.....	viii
DAFTAR ISI .....	ix
DAFTAR TABEL.....	xi
DAFTAR GAMBAR .....	xii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xiii
BAB I PENDAHULUAN .....	1
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	3
1.3 Tujuan Penelitian .....	4
1.4 Manfaat Penelitian .....	4
1.5 Struktur Organisasi Skripsi.....	5
BAB II KAJIAN PUSTAKA .....	6
2.1 Parfum.....	6
2.2 Matrix Laboratory (MATLAB) .....	8
2.3 Pendekatan <i>Odor Value</i> (OV).....	8
2.4 <i>Vapor-Liquid Equilibrium</i> (VLE).....	10
2.5 Koefisien Aktivitas ( $\gamma$ ) .....	11
2.5.1 Penentuan Bagian Kontribusi Kombinatorial.....	12
2.5.2 Penentuan Bagian Kontribusi Residual .....	12
2.6 Nilai $K_i^*$ .....	13
2.7 <i>Odor Value</i> (OV) .....	14
2.8 Heksil Asetat.....	15
2.9 Frukton.....	16
2.10 Ambroxan .....	17
2.11 Helvetolida.....	18
2.12 Etanol.....	19
BAB III METODE PENELITIAN.....	20
3.1 Waktu dan Lokasi Penelitian .....	20

3.2 Alat dan Bahan.....	20
3.2.1 Alat .....	20
3.2.2 Bahan.....	20
3.3 Variabel Penelitian.....	20
3.3.1 Variabel Bebas.....	21
3.3.2 Variabel Kontrol.....	21
3.3.3 Variabel Terikat.....	21
3.4 Desain Penelitian .....	21
3.5 Prosedur penelitian.....	22
3.5.1 Pembuatan Program Pendekatan <i>Odor Value</i> (OV).....	22
3.5.2 Penentuan Fraksi Mol ( $x$ ), Koefisien Aktivitas ( $\gamma$ ), dan <i>Odor Value</i> (OV) Pada Perhitungan Program Pendekatan <i>Odor Value</i> .....	23
3.5.3 Percobaan Formulasi Parfum dan Evaluasi Mutu Parfum .....	25
3.5.3.1 Uji Organoleptik .....	25
3.5.3.2 Uji Daya Tahan.....	26
3.5.3.3 Uji Tingkat Kesukaan .....	26
3.5.3.4 Uji Keamanan .....	26
BAB IV TEMUAN DAN PEMBAHASAN .....	27
4.1 Program Pendekatan <i>Odor Value</i> .....	27
4.2 Fraksi Mol ( $x$ ), Koefisien Aktivitas ( $\gamma$ ) dan <i>Odor Value</i> (OV) Hasil Perhitungan Pendekatan <i>Odor Value</i> .....	28
4.3 Formulasi Parfum Campuran dan Evaluasi Mutu Parfum.....	31
4.3.1 Formulasi Parfum Campuran Heksil Asetat, Fruktan, Ambroxan, dan Helvetolida Dalam Pelarut Etanol .....	32
4.3.2 Evaluasi Mutu Parfum .....	33
BAB V SIMPULAN, IMPLIKASI, DAN REKOMENDASI .....	38
5.1 Simpulan .....	38
5.2 Implikasi dan Rekomendasi .....	38
DAFTAR PUSTAKA .....	39
LAMPIRAN .....	43

## DAFTAR TABEL

<b>Tabel 1.1</b>	Data Sifat Fisik dan Kimia Senyawa.....	3
<b>Tabel 2.1</b>	Sifat Fisika dan Kimia Senyawa Heksil Asetat.....	15
<b>Tabel 2.2</b>	Sifat Fisika dan Kimia Senyawa Frukton.....	16
<b>Tabel 2.3</b>	Sifat Fisika dan Kimia Senyawa Ambroxan .....	17
<b>Tabel 2.4</b>	Sifat Fisika dan Kimia Senyawa Helvetolida.....	18
<b>Tabel 2.5</b>	Sifat Fisika dan Kimia Senyawa Etanol .....	19
<b>Tabel 4.1</b>	Nomor Kelompok dan Subkelompok UNIFAC Setiap Molekul pada Parfum Campuran.....	30
<b>Tabel 4.2</b>	Data Fraksi Mol ( $x$ ), Koefisien aktivitas ( $\gamma$ ), dan <i>Odor Value</i> dari senyawa Heksil asetat, Frukton, Ambroxan, Helvetolida, dan Etanol .....	30
<b>Tabel 4.3</b>	Proporsi Komposisi Setiap Komponen pada Formulasi Parfum...	32



## DAFTAR GAMBAR

<b>Gambar 2.1</b>	Struktur Parfum yang di Representasikan Piramida Carles .....	6
<b>Gambar 2.2</b>	Rumus Struktur Heksil Asetat .....	15
<b>Gambar 2.3</b>	Rumus Struktur Frukton .....	16
<b>Gambar 2.4</b>	Rumus Struktur Ambroxan.....	17
<b>Gambar 2.5</b>	Rumus Struktur Ambroxan.....	18
<b>Gambar 2.6</b>	Rumus Struktur Etanol .....	19
<b>Gambar 3.1</b>	Desain Tahapan Utama Penelitian Parfum menggunakan Konsep <i>Odor Value</i> .....	22
<b>Gambar 3.2</b>	Bagan Alir Penentuan Komposisi Formulasi Parfum .....	24
<b>Gambar 4.1</b>	Sampel <i>Eau de Parfum</i> .....	33
<b>Gambar 4.2</b>	Hasil Uji Organoleptik (Uji Kejernihan, Homogenitas, dan Bebas Partikel) .....	34
<b>Gambar 4.3</b>	Uji Organoleptik (Uji Aroma).....	34
<b>Gambar 4.4</b>	Grafik Hasil Uji Daya Tahan Aroma Parfum.....	35
<b>Gambar 4.5</b>	Diagram Hasil Tingkat Kesukaan Parfum.....	36
<b>Gambar 4.6</b>	Diagram Hasil Evaluasi Keamanan Parfum .....	37

## DAFTAR LAMPIRAN

<b>Lampiran 1</b> Perhitungan .....	43
<b>Lampiran 2</b> Dokumentasi Penelitian .....	44
<b>Lampiran 3</b> Riwayat Penulis .....	48

## DAFTAR PUSTAKA

- Aljaff, P. M., Manhal, E., & Rasheed, B. O. (2013). Identification of synthetic perfume by infrared and optical properties. *Pure appl. Chem. Sci*, 1, 19-30. <https://doi.org/10.12988/pacs.2013.332>
- Atina. (2019). Aplikasi Matlab pada Teknologi Pencitraan Medis. *JUPITER: Jurnal Penelitian Fisika dan Terapannya*, 1(1). DOI: 10.31851/jupiter.v1i1.3123
- Behera, M. (2010). Vapor Liquid Equilibrium Modeling Using Unifac Group Contribution Method And Its Application In Distillation Column Design And Steady State Simulation. (Tesis). Sekolah doctoral, Rourkela: institute teknologi nasional
- Boelens, M., & Boelens, R. (2001). Classification of perfumes and fragrances. *Perfumer and Flavorist*, 26(6),28-39.
- Carles, J. (2006). A Method of creation & Perfumery. *Soap, perfumery & cosmetics*, 35, 328-335
- Chairunnisa, M., Kusala. K. V., Lestari. U. P., Fatoni, R., Gusmiatun, & Harismah, K. (2023). Pembuatan dan Evaluasi Parfum Eau de Toilette dari Minyak Nilam (*Pogostemon cablin*) dan Adas (*Foeniculum vulgare*) dengan Wewangian Buah. Simposium Nasional RAPI XXI.
- Deliani, E., & Zulkarnain. (2012). Perfume Bottle's Design And Its Influenced To Purchasing Intention In Adolescents. *Prosiding seminar ilmiah dies natalis universitas sumatera utasa*. Medan; usu 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. (2007). Experimental validation of perfumery ternary diagram® methodology. *AIChE Journal*, 54(1), 310–320. <https://doi.org/10.1002/aic.11353>
- Gonçalves, D., Costa, P., Rodrigues, C. E. C., & Rodrigues, A. E. (2018). Effect of Citrus Sinensis Essential Oil Deterpenation On The Aroma Profile Of The Phases Obtained By Solvent Extraction. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 116, 166–175. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2017.09.011>
- Gunawan, I., Rahayu, P., Farmasi, J., & Kesehatan Tanjung Karang, P. (2021). Formulasi dan Evaluasi Parfum Tipe Eau de Toilette (EDT) “Senarai Jingga” Formulation and Evaluation of Perfume Type Eau de Toilette (EDT) “Senarai Jingga.” In *Jurnal Kesehatan* (Vol. 12, Issue 2). Online. <http://ejurnal.poltekkes-tjk.ac.id/index.php/JK>
- Haque, A. N. M. A., Remadevi, R., & Naebe, M. (2018). Lemongrass (*Cymbopogon*): A review on its Structure, Properties, Applications, and Recent

- Developments. *Cellulose*, 25, 5455-5477. <https://doi.org/10.1007/s10570-018-1965-2>
- Hikmah, W., Aisyah, Y. & Fahrizal. (2023). Pengaruh Perbandingan Konsentrasi Minyak Nilam terhadap Kualitas Parfum Secara Sensori', *Jurnal Ilmiah Mahasiswa Pertanian*, 8(1), pp. 254–261.
- Houcque, D. (2005). Introduction to Matlab for Engineering Students. USA: northwestern university
- Kadarohman, A., Salima, G., Salim, A. H., Safitri, A., Gustiawan, K. H., Sardjono, R. E., ... & Khumaisah, L. L. (2022). Fructose Synthesis From Ethanol and Acetic Acid. *Indonesian journal of chemical science*, 11(3), 250-258. <https://doi.org/10.15294/ijcs.v11i3.57070>
- Kusala, K. V., Chairunnisa, M., Lestari, U. P., Widayatno, T., Wahyuni., & Harismah, K. (2023). PEMBUATAN DAN EVALUASI PARFUM EAU DE TOILETTE DARI MINYAK NILAM (*Pogostemon cablin*) DAN ADAS (*Foeniculum vulgare*) DENGAN WEWANGIAN BUAH. *Simposium Nasional RAPI XXI*
- Mata, V. G., Gomes, P. B., & Rodrigues, A. E. (2005a). Effect of Nonidealities in Perfume Mixtures Using The Perfumery Ternary Diagrams (PTD) Concept. *Industrial and 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., & 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>
- Marcus, J., Klossek, M. L., Touraud, D., & Kunz, W. (2013). Nano-droplet Formation in Fragrance Tinctures. *Flavour and Fragrance Journal*, 28(5), 294–299. <https://doi.org/10.1002/ffj.3172>
- Martínez-Guido, S. I., Sengupta, D., Nápoles-Rivera, F., González-Campos, J. B., del Río, R. E., Ponce-Ortega, J. M., & El-Halwagi, M. M. (2016). Life Cycle Assessment for Ambrox® Production From Different Chemical Routes. *Journal of cleaner production*, 130, 202-212.
- Maudhy, C.F., Sulaiman, I. and Murlida, E. (2023) 'Pengaruh Perbedaan Konsentrasi Pelarut (Solvent) terhadap Daya Tahan Secara Sensori', *Jurnal Ilmiah Mahasiswa Pertanian*, 8(2), pp. 346–351.
- Poling, B. E., Prausnitz, J. M., & O'Connell, J. P. (2001). Properties of Gases and Liquids Fifth Edition. *New York: McGraw-Hill Education*. DOI: 10.1036/0070116822

- Rahim, F., & Gustin, A. (2021). Formulasi Parfum Padat dari Beberapa Varian Biang Parfum. In *Prosiding Seminar Kesehatan Perintis E* (Vol. 4, Issue 2).
- Rodrigues, A. E., Nogueira, I., & Faria, R. P. V. (2021). Perfume and flavor engineering: A chemical engineering perspective. *Molecules*, *26*(11). <https://doi.org/10.3390/molecules26113095>
- Saragih, R. R. (2016). Pemrograman dan Bahasa pemrograman. STMIK-STIE Mikroskil, 1-91
- Setiyaningsih, Anik. (2014). Aplikasi Sitronela Minyak Sereh Wangi pada Produk Eau de Toilette dengan Bahan Pewangi Alami. (Skripsi). Sekolah Sarjana, Bogor: Institut Pertanian Bogor
- Sugiyono. (2016). Metode Penelitian Kuantitatif, kualitatif, dan R&D (Cetakan ke-23). Bandung: CV Alfabeta.
- Teixeira, M. A., Barrault, L., Rodríguez, O., Carvalho, C. C., & Rodrigues, A. E. (2014). Perfumery radar 2.0: A step toward fragrance design and classification. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, *53*(21), 8890–8912. <https://doi.org/10.1021/ie403968w>
- Teixeira, M. A., & Rodrigues, A. E. (2014). Coupled extraction and dynamic headspace techniques for the characterization of essential oil and aroma fingerprint of *Thymus* species. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, *53*(23), 9875–9882. <https://doi.org/10.1021/ie501301u>
- Teixeira, M. A., Rodríguez, O., Mata, V. G., & Rodrigues, A. E. (2009a). Perfumery quaternary diagrams for engineering perfumes. *AIChE Journal*, *55*(8), 2171–2185. <https://doi.org/10.1002/aic.11811>
- Teixeira, M. A., Rodríguez, O., Mata, V. G., & Rodrigues, A. E. (2009b). 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., Rodríguez, O., & Rodrigues, A. E. (2010a). Perfumery radar: A predictive tool for perfume family classification. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, *49*(22), 11764–11777. <https://doi.org/10.1021/ie101161v>
- Teixeira, M. A., Rodríguez, O., & Rodrigues, A. E. (2010b). The perception of fragrance mixtures: A comparison of odor intensity models. *AIChE Journal*, *56*(4), 1090–1106. <https://doi.org/10.1002/aic.12043>
- Teixeira, M. A., Rodríguez, O., & Rodrigues, A. E. (2013). Diffusion and performance of fragranced products: Prediction and validation. *AIChE Journal*, *59*(10), 3943–3957. <https://doi.org/10.1002/aic.14106>
- Teixeira, M. A., Rodrigues, O., Gomes, P., Mata, V., & Rodrigues, A. (2012). Perfume engineering: design, performance and classification. Butterworth-Heinemann.

- Teixeira, M. A., Rodríguez, O., Rodrigues, A. E., Selway, R. L., Riveroll, M., & Chieffi, A. (2013a). Prediction model for the odor intensity of fragrance mixtures: A valuable tool for perfumed product design. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 52(2), 963–971. <https://doi.org/10.1021/ie302538c>
- Teixeira, M. A., Rodríguez, O., Rodrigues, A. E., Selway, R. L., Riveroll, M., & Chieffi, A. (2013b). Prediction model for the odor intensity of fragrance mixtures: A valuable tool for perfumed product design. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 52(2), 963–971. <https://doi.org/10.1021/ie302538c>
- Wasitaatmadja. (1997). *Penuntun Kosmetik Medik*. Jakarta: Universitas Indonesia
- Yan, L., Liu, J., Wang, G., & Wu, C. (2014). An Odor Interaction Model of Binary Odorant Mixtures by a Partial Differential Equation Method. *Sensors (Switzerland)*, 14(7), 12256–12270. <https://doi.org/10.3390/s140712256>