

**IDENTIFIKASI KOMPONEN SENYAWA ASAM SITRAT
DAN ASAM TARTARAT DALAM SISTEM CAMPURAN
DENGAN METODE SPEKTROSKOPI ATR-FTIR
DAN PENDEKATAN KEMOMETRIKA**

SKRIPSI

**Untuk memenuhi sebagian persyaratan
mencapai derajat Sarjana Kimia**



Oleh:
Abelia Saputri
22106030046

**PROGRAM STUDI KIMIA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA
2026**

HALAMAN PENGESAHAN



KEMENTERIAN AGAMA
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
Jl. Marsda Adisucipto Telp. (0274) 540971 Fax. (0274) 519739 Yogyakarta 55281

PENGESAHAN TUGAS AKHIR

Nomor : B-1830/Un.02/DST/PP.00.9/08/2026

Tugas Akhir dengan judul : Identifikasi Komponen Senyawa Asam Sitrat dan Asam Tartarat Dalam Sistem Campuran Dengan Metode Spektroskopi ATR-FTIR dan Pendekatan Kemometrika

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : ABELIA SAPUTRI
Nomor Induk Mahasiswa : 22106030046
Telah diujikan pada : Senin, 27 Juli 2026
Nilai ujian Tugas Akhir : A

dinyatakan telah diterima oleh Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

TIM UJIAN TUGAS AKHIR



Ketua Sidang
Karmanto, S.Si., M.Sc.
SIGNED

Valid ID: 6a7d3269edf28



Penguji I
Prof. Dr. Susy Yunita Prabawati, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 6a7154d2a747c



Penguji II
Dr. Imelda Fajriati, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 6a7c5550eb4f3



Yogyakarta, 27 Juli 2026
UIN Sunan Kalijaga
Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
Prof. Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 6a7d39eda39a5

HALAMAN PERNYATAAN KEASLIAN

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Yang bertandatangan di bawah ini :

Nama : Abelia Saputri
NIM : 22106030046
Jurusan : Kimia
Fakultas : Sains dan Teknologi

Menyatakan bahwa skripsi yang berjudul **"Identifikasi Komponen Senyawa Asam Sitrat dan Asam Tartarat Dalam Sistem Campuran Dengan Metode Spektroskopi ATR-FTIR dan Pendekatan Kemometrika"** merupakan hasil penelitian saya sendiri, tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjana di suatu Perguruan Tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya juga tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan orang lain, kecuali secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Yogyakarta, 16 Juli 2026



Abelia Saputri
Abelia Saputri
NIM 22106030046

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

HALAMAN PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga



FM-UINSK-BM-05-03/R0

SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR

Hal : Persetujuan Skripsi / Tugas Akhir

Lamp :

Kepada

Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

di Yogyakarta

Assalamu'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : Abelia Saputri

NIM : 22106030046

Judul Skripsi : Identifikasi Komponen Senyawa Asam Sitrat dan Asam Tartarat

Dalam Sistem Campuran Dengan Metode Spektroskopi ATR-FTIR dan

Pendekatan Kemometrika

sudah dapat diajukan kembali kepada Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam Program Studi Kimia.

Dengan ini kami mengharap agar skripsi/tugas akhir Saudara tersebut di atas dapat segera dimunaqasyahkan. Atas perhatiannya kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 16 Juli 2026

Pembimbing

Karmanto, S.Si., MSc.

NIP: 19820504 200912 1 005

HALAMAN MOTTO

“Ternyata tidak ada salahnya berjalan pelan-pelan. Tidak ada salahnya membutuhkan waktu lebih lama, karena semuanya sudah diatur oleh-Nya. Selama kita tidak berhenti, yakin tujuan yang kita inginkan pasti tercapai”

Sobat Nuca

“Maka sesungguhnya bersama kesulitan ada kemudahan. Sesungguhnya bersama kesulitan ada kemudahan.”

QS. Al-Insyirah: 5-6

“Allah tidak membebani seseorang melainkan sesuai dengan kesanggupannya”

QS. Al-Baqarah: 286

“Boleh jadi kamu membenci sesuatu, padahal itu baik bagimu”

QS. Al-Baqarah: 216

“Keberhasilan adalah kepunyaan mereka yang senantiasa berusaha.”

-BJ Habibie

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

HALAMAN PERSEMBAHAN

Karya tulis ini penulis persembahkan dan dedikasikan untuk Ibu dan Bapak tersayang yang telah senantiasa memberikan doa, dukungan dan motivasi kepada penulis untuk dapat menyelesaikan perkuliahan dan tugas akhir.

Serta untuk almamater,

Program Studi Kimia Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta



KATA PENGANTAR

Assalamu 'alaikum Wr. Wb

Puji syukur kami panjatkan kehadirat Allah SWT atas rahmat dan hidayah-Nya, serta shalawat kepada Nabi Muhammad SAW. *Alhamdulillah*, penulis dapat melaksanakan dan menyelesaikan tugas akhir yang berjudul “Identifikasi Komponen Senyawa Asam Sitrat dan Asam Tartarat Dalam Sistem Campuran Dengan Metode Spektroskopi ATR-FTIR dan Pendekatan Kemometrika” dengan baik. Skripsi ini disusun sebagai salah satu syarat memperoleh gelar Sarjana Sains (S.Si) Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.

Penulis menyadari bahwa penyusunan skripsi ini tidak lepas dari berbagai tantangan yang dihadapi dengan baik atas doa, dukungan, dan motivasi dari orang-orang terdekat. Oleh karena itu, dengan segala kerendahan hati, penulis mengucapkan terima kasih kepada:

1. Bapak Prof. Noorhaidi Hasan, S.Ag., M.A., M. Phil., Ph.D. selaku Rektor UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta
2. Ibu Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.Si. selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
3. Ibu Prof. Dr. Maya Rahmayanti, S.Si., M.Si. selaku Ketua Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
4. Bapak Karmanto, S.Si., M.Sc. selaku Dosen Pembimbing Tugas Akhir yang telah meluangkan waktunya untuk membimbing, mengarahkan, dan memberikan dukungan serta motivasi penulis dalam menyelesaikan penyusunan skripsi ini.
5. Bapak Sudarlin, M.Si, selaku Dosen Penasihat Akademik yang telah memberikan bimbingan dan pengarahan selama studi.
6. Segenap PLP Laboratorium Kimia Terpadu UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta, khususnya Ibu Isnı Gustanti, S.Si, atas arahan, bantuan dan membimbing penulis selama melaksanakan proses penelitian.
7. Seluruh Dosen Kimia UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta yang telah memberikan ilmunya kepada penulis selama perkuliahan.

8. Terima kasih kepada kedua orang tua hebat penulis, Ibu Sainem dan Bapak Bonari, yang senantiasa memberikan dukungan moral maupun materil, serta doa yang tulus kepada penulis selama masa studi dan penyusunan tugas akhir ini. Terima kasih atas semua pengorbanan dan kerja keras yang telah dilakukan untuk mengusahakan yang terbaik kepada penulis. Terima kasih atas kepercayaan, kesabaran, motivasi, dan semangat yang selalu diberikan sehingga penulis mampu melalui setiap proses dan tantangan hingga akhirnya dapat menyelesaikan perkuliahan dan tugas akhir ini.
9. Kepada kedua kakak penulis, Angga dan Joni terima kasih atas dukungan moral maupun materil dan motivasinya, serta doa yang senantiasa diberikan kepada penulis. Terima kasih juga kepada keponakan tercinta Althaf, yang senantiasa menjadi penyemangat dan membawa kebahagiaan bagi penulis dalam setiap proses penyelesaian skripsi ini.
10. Terima kasih kepada Yumroh Dwi Utami yang telah kebersamai penulis dari awal masuk kuliah hingga selamanya, yang senantiasa membantu, mendengarkan keluh kesah dan memberikan motivasi kepada penulis. Terima kasih kepada Kakak Irlesta yang telah memberikan doa, arahan, dukungan, dan motivasi penulis selama masa studi dan proses penyusunan tugas akhir, serta atas kesediaannya untuk selalu meluangkan waktu dan kebersamai penulis dalam setiap proses, dari perkuliahan hingga menyelesaikan tugas akhir ini.
11. Kepada HMYS, Rahma, Masitha, Najwa, Ira, yang selalu menemani dalam suka maupun duka, serta selalu memberikan doa, dukungan dan motivasi. Terima kasih atas kebersamaan, kesediaan untuk selalu membantu, serta menjadi tempat penulis untuk berbagi cerita dan keluh kesah selama menjalani setiap proses.
12. Kepada Sahabat Tantrum Family Nazira, Eris, Fanes, Zunan, Heru, Harkim, Adib yang telah menemani dan senantiasa memberikan dukungan, semangat, motivasi dan doa selama studi, dan masa penyusunan tugas akhir.

13. Terima kasih kepada Yumroh, Rahma, Masitha, Najwa, Ira, Nazira, Eris, Gishella, Andhini, Annisa, Salisia, Hella, dan Cindy. Teman seperjuangan penulis yang telah kebersamai penulis.
14. Terima kasih kepada Yanti dan Lily, yang telah menemani dan memberikan motivasi, dukungan, semangat dan doa yang tulus kepada penulis. Terima kasih kepada teman perantauan yang tidak bisa disebutkan satu persatu penulis yang telah memberikan dukungan dan motivasi.
15. Terima kasih Keluarga Kimia kelas B dan Xenon 2022 yang telah berjuang bersama.
16. Terima kasih kepada seseorang yang sudah hadir, menemani penulis dari perkuliahan hingga penyelesaian tugas akhir ini. Terima kasih atas waktu, dukungan, motivasi, kesabaran dan doa yang tulus kepada penulis.
17. Terima kasih kepada diri sendiri, Abelia, yang telah bertahan, tidak menyerah dan terus berjuang meski sering merasa lelah dan ragu, dan menghadapi berbagai tantangan selama menempuh masa studi. Terima kasih karena telah memilih untuk terus melangkah, belajar dari setiap proses, serta senantiasa berusaha memberikan yang terbaik dalam setiap kesempatan. Terima kasih atas keberanian untuk bangkit setelah setiap kegagalan, kesabaran dalam menghadapi setiap kesulitan dalam menyelesaikan setiap tahapan hingga akhirnya tugas akhir ini dapat diselesaikan.

Penulis menyadari bahwa Tugas Akhir ini masih terdapat keterbatasan dan kekurangan. Oleh karena itu, penulis mengharapkan kritik dan saran yang membangun sehingga dapat memperbaiki kembali penulisan Tugas Akhir ini dan diharapkan dapat bermanfaat bagi semua pihak.

Wassalamu'alaikum Warrahmatullahi Wabarrakatuh

Yogyakarta, 16 Juli 2026

Abelia Saputri

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
HALAMAN PERNYATAAN KEASLIAN	iii
HALAMAN PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR.....	iv
HALAMAN MOTTO	v
HALAMAN PERSEMBAHAN	vi
KATA PENGANTAR.....	vii
DAFTAR ISI	x
DAFTAR TABEL.....	xii
DAFTAR GAMBAR	xiii
INTISARI.....	xv
ABSTRACT.....	1
BAB I PENDAHULUAN.....	2
A. Latar Belakang.....	2
B. Batasan Masalah	6
C. Rumusan Masalah.....	6
D. Tujuan Penelitian	7
E. Manfaat Penelitian	7
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI.....	8
A. Tinjauan Pustaka.....	8
B. Landasan Teori.....	10
1. Asam Sitrat.....	10
2. Asam Tartarat	13
3. Sistem Campuran Padatan Homogen	14
4. Spektroskopi Inframerah.....	16
5. Kemometrika	18
6. <i>Multivariate Curve Resolution (MCR)</i>	19

7. <i>Cosine Similarity</i>	22
C. Kerangka Berpikir dan Hipotesis Penelitian.....	24
BAB III METODE PENELITIAN.....	28
A. Waktu dan Tempat Penelitian	28
B. Alat-alat Penelitian.....	28
C. Bahan Penelitian	28
D. Cara Kerja Penelitian.....	28
1. Analisis Karakteristik Spektra Padatan Asam Sitrat dan Asam Tartarat Menggunakan FTIR.	28
2. Analisis Spektra FTIR Campuran Padatan Homogen Asam Sitrat-Asam Tartarat dengan Pendekatan MCR dalam memisahkan Spektra Campuran. 29	
3. Evaluasi Tingkat Keberhasilan Dekomposisi MCR Melalui Nilai <i>Cosine Similarity</i>	30
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	32
A. Karakterisasi Spektrum FTIR Senyawa Murni Asam Sitrat dan Asam Tartarat	32
B. Analisis Spektra Campuran Asam Sitrat-Asam Tartarat dengan Pendekatan MCR.....	39
C. Evaluasi Tingkat Keberhasilan Hasil Dekomposisi MCR Melalui Nilai <i>Cosine similarity</i>	70
BAB V PENUTUP.....	76
A. Kesimpulan.....	76
B. Saran	76
DAFTAR PUSTAKA.....	77
LAMPIRAN.....	82

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Daerah Serapan Spektrum Inframerah	16
Tabel 3.1 Variasi Campuran Asam Sitrat dan Asam Tartarat	29
Tabel 4.1 Interpretasi Pita Serapan ATR-FTIR Asam Sitrat Murni	35
Tabel 4.2 Interpretasi Pita Serapan ATR-FTIR Asam Tartarat Murni	38
Tabel 4.3 Kemiripan Titik Pengukuran dengan Spektra Murni Sampel A.....	42
Tabel 4.4 Kemiripan Titik Pengukuran dengan Spektra Murni Sampel B.....	45
Tabel 4.5 Kemiripan Titik Pengukuran dengan Spektra Murni Sampel C.....	47
Tabel 4.6 Kemiripan Komponen Hasil MCR dengan Spektra Murni Sampel A	52
Tabel 4.7 Kemiripan Komponen Hasil MCR dengan Spektra Murni Sampel B	53
Tabel 4.8 Kemiripan Komponen Hasil MCR dengan Spektra Murni Sampel C	55
Tabel 4.9 Kemiripan Komponen Hasil MCR dengan Spektra Murni Sampel A	57
Tabel 4.10 Kemiripan Komponen Hasil MCR dengan Spektra Murni Sampel B	59
Tabel 4.11 Kemiripan Komponen Hasil MCR dengan Spektra Murni Sampel A	62
Tabel 4.12 Kemiripan Komponen Hasil MCR dengan Spektra Murni Sampel B	64
Tabel 4.13 Kemiripan Komponen Hasil MCR dengan Spektra Murni Sampel C	65
Tabel 4.14 Kemiripan Komponen Hasil MCR dengan Spektra Murni Sampel A	67
Tabel 4.15 Kemiripan Komponen Hasil MCR dengan Spektra Murni Sampel B	68
Tabel 4.16 Hasil LOF, RMSE, dan R^2	71
Tabel 4.17 Hasil <i>Cosine Similarity</i>	71
Tabel 4.18 Hasil LOF, RMSE, dan R^2	72
Tabel 4.19 Hasil <i>Cosine Similarity</i>	73
Tabel 4.20 Hasil LOF, RMSE, dan R^2	73
Tabel 4.21 Hasil <i>Cosine Similarity</i>	74

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Struktur Asam Sitrat	10
Gambar 2.2 Struktur Asam Tartarat	13
Gambar 4.1 Spektra Asam Sitrat Murni	33
Gambar 4.2 Spektra Asam Tartarat Murni	36
Gambar 4.3 (a) Foto Sampel Hasil Deposisi Larutan Campuran Asam Sitrat dan Asam Tartarat, (b) Perbesaran Kristal pada Bagian Bawah, (c) Perbesaran Kristal pada Bagian Atas	39
Gambar 4.4 <i>Overlay</i> spektra FTIR hasil pengukuran beberapa titik pada campuran padatan homogen asam sitrat-asam tartarat sampel A terhadap spektra referensi (a) asam sitrat dan (b) asam tartarat	41
Gambar 4.5 <i>Overlay</i> spektra FTIR hasil pengukuran beberapa titik pada campuran padatan homogen asam sitrat-asam tartarat sampel B terhadap spektra referensi (a) asam sitrat dan (b) asam tartarat	43
Gambar 4.6 <i>Overlay</i> spektra FTIR hasil pengukuran beberapa titik pada campuran padatan homogen asam sitrat-asam tartarat sampel C terhadap spektra referensi asam sitrat	46
Gambar 4.7 Spektra Perbandingan Sampel A (a) Asam Sitrat Murni dengan Komponen Asam Sitrat (b) Asam Tartarat Murni dengan Komponen Asam Tartarat	51
Gambar 4.8 Spektra Perbandingan Sampel B Asam Sitrat Murni dengan Komponen Asam Sitrat	52
Gambar 4.9 Spektra Perbandingan Sampel C (a) Asam Sitrat Murni dengan Komponen Asam Sitrat (b) Asam Sitrat Murni dengan Komponen Asam Sitrat	54
Gambar 4.10 Spektra Perbandingan Sampel A (a) Asam Sitrat Murni dengan Komponen Asam Sitrat (b) Asam Tartarat Murni dengan Komponen Asam Tartarat	56

Gambar 4.11 Spektra Perbandingan Sampel B (a) Asam Sitrat Murni dengan Komponen Asam Sitrat (b) Asam Tartarat Murni dengan Komponen Asam Tartarat	58
Gambar 4.12 Spektra Perbandingan Sampel A (a) Asam Tartarat Murni dengan Komponen Asam Tartarat (b) Asam Tartarat Murni dengan Komponen Asam Tartarat	61
Gambar 4.13 Spektra Perbandingan Sampel B (a) Asam Tartarat Murni dengan Komponen Asam Tartarat (b) Asam Sitrat Murni dengan Komponen Asam Sitrat	63
Gambar 4.14 Spektra Perbandingan Sampel C Asam Tartarat Murni dengan Komponen Asam Tartarat	65
Gambar 4.15 Spektra Perbandingan Sampel A Asam Tartarat Murni dengan Komponen Asam Tartarat	66
Gambar 4.16 Spektra Perbandingan Sampel B Asam Tartarat Murni dengan Komponen Asam Tartarat	67

INTISARI

Identifikasi Komponen Senyawa Asam Sitrat Dan Asam Tartarat Dalam Sistem Campuran Homogen Padat Dengan Pendekatan Spektroskopi ATR-FTIR Dan Kemometrika

Oleh :

Abelia Saputri

22106030046

Pembimbing :

Karmanto, S.Si., M.Sc.

Identifikasi komponen dalam sistem campuran padatan homogen merupakan tantangan analitik karena kemiripan gugus fungsi asam sitrat dan asam tartarat. Hal ini menyebabkan tumpang tindih spektrum FTIR sehingga sulit diidentifikasi secara visual. Penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi karakteristik profil spektra komponen penyusun pada daerah gugus fungsi dan *fingerprint*, menganalisis perubahan pola spektra campuran padatan homogen pada variasi terkontrol serta kemampuan *Multivariate Curve Resolution* (MCR) dalam memisahkan komponen penyusun, dan mengevaluasi keberhasilan dekomposisi MCR melalui nilai cosine similarity terhadap spektra murni referensi. Penelitian dilakukan dengan menganalisis spektra FTIR pada rentang bilangan gelombang 4000-650 cm^{-1} terhadap sampel murni dan campuran homogen padat sampel A, sampel B, dan sampel C dengan perbandingan asam sitrat dan asam tartarat berturut-turut 1:2, 2:2, dan 2:1. Analisis dilakukan dengan pendekatan *initial guess* dan tanpa *initial guess*. Hasil menunjukkan bahwa karakteristik pita serapan asam sitrat dan asam tartarat murni sesuai dengan data referensi, dengan daerah *fingerprint* yang terbukti lebih sensitif dan diskriminatif dibandingkan daerah gugus fungsi utama dalam membedakan kedua senyawa. Spektra campuran konsisten mengikuti komposisi tanpa pergeseran bilangan gelombang signifikan. Evaluasi keberhasilan dekomposisi MCR menunjukkan nilai LOF berkisar antara 1,09%-5,71% dengan R^2 sebesar 0,9967-0,9999, serta nilai *cosine similarity* terbaik pendekatan *initial guess* di daerah *fingerprint* sebesar $\geq 0,98$ untuk asam tartarat dan $\geq 0,95$ untuk asam sitrat, mengonfirmasi bahwa metode MCR akurat untuk analisis komponen sistem campuran padatan homogen.

Kata Kunci : Asam Sitrat, Asam Tartarat, Campuran Padatan Homogen, ATR-FTIR, *Multivariate Curve Resolution*.

ABSTRACT

Identification of Citric Acid and Tartaric Acid Compound Components in a Homogeneous Solid Mixture System Using ATR-FTIR Spectroscopy and Chemometrics

By :

Abelia Saputri

22106030046

Adviser :

Karmanto, S.Si., M.Sc.

Identification of components in a homogeneous solid mixture system is an analytical challenge because of the similarity of the functional groups of citric acid and tartaric acid. This results in overlapping FTIR spectra, making visual identification difficult. This study aims to identify the characteristics of the spectral profiles of the constituent components in the functional group and *fingerprint* regions, analyze changes in the spectral patterns of homogeneous solid mixtures in controlled variations and the ability of Multivariate Curve Resolution (MCR) in separating the constituent components, and evaluate the success of MCR decomposition through cosine similarity values to the pure reference spectra. The study was conducted by analyzing FTIR spectra in the wavenumber range of 4000-650 cm^{-1} of pure samples and homogeneous solid mixtures in sample A, sample B, and sample C, with citric acid and tartaric acid ratios of 1:2, 2:2, and 2:1 respectively. The analysis was carried out with an initial guess approach and without an initial guess. The results showed that the absorption band characteristics of pure citric acid and tartaric acid were consistent with the reference data, with the *fingerprint* region proving more sensitive and discriminatory than the main functional group region in distinguishing the two compounds. The mixture spectra consistently followed the composition without significant wavenumber shifts. The evaluation of MCR decomposition success showed LOF values ranging from 1.09%-5.71% with an R^2 of 0.9967-0.9999, as well as the best cosine similarity values obtained with the initial guess approach in the *fingerprint* region of ≥ 0.98 for tartaric acid and ≥ 0.95 for citric acid, confirming that the MCR method is accurate for component analysis of homogeneous solid mixture systems.

Keywords : Citric Acid, Tartaric Acid, Homogeneous Solid Mixture, ATR-FTIR, Multivariate Curve Resolution.

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Analisis sistem campuran merupakan salah satu permasalahan penting dalam bidang kimia analitik, terutama jika unsur-unsurnya memiliki banyak kesamaan dari segi struktur kimia dan gugus fungsi. Permasalahan ini menjadi semakin kompleks ketika sistem campuran berada dalam fase padatan homogen, yang distribusi setiap komponen terjadi secara merata hingga ke tingkat molekuler tanpa adanya batas fisik yang dapat dikenali secara visual. Hal ini berbeda dengan campuran heterogen yang masih memungkinkan identifikasi komponen berdasarkan perbedaan dalam morfologi, warna, atau ukuran partikel. Sistem campuran padatan homogen memberikan tantangan analitik yang jauh lebih besar karena seluruh komponen saling tumpang tindih dan tidak dapat dibedakan secara fisik. Kondisi ini menyebabkan setiap metode analisis yang digunakan akan memberikan respons pada keseluruhan sistem campuran secara bersamaan, bukan pada setiap komponen secara individual (De Juan & Tauler, 2021).

Permasalahan yang terdapat dalam analisis sistem campuran padatan homogen terletak pada tumpang tindih respons sinyal analitik dari semua komponen penyusun. Dalam spektroskopi FTIR, spektra yang diperoleh merupakan superposisi dari kontribusi seluruh gugus fungsi dari semua komponen secara bersamaan. Akibatnya, karakteristik pita serapan yang seharusnya menjadi identitas suatu senyawa menjadi tertutupi atau bercampur dengan pita serapan dari komponen lain yang muncul pada daerah bilangan gelombang yang berdekatan. Hal ini menimbulkan kesulitan dalam proses identifikasi kualitatif terhadap komponen penyusun secara langsung, jika hanya berdasarkan interpretasi visual spektra, terutama ketika komponen memiliki gugus fungsi yang mirip, seperti pada kasus asam sitrat dan asam tartarat (Castro dkk., 2021; Stuart, 2004).

Permasalahan selanjutnya berkaitan dengan tantangan dalam menentukan komponen penyusun pada sistem campuran padatan homogen. Ketika spektrum campuran tidak lagi merepresentasikan identitas satu senyawa murni, proses identifikasi komponen menjadi sangat terbatas apabila hanya bergantung pada pembacaan bilangan gelombang secara visual. Dalam situasi ini, seorang analis tidak dapat menyimpulkan bahwa suatu komponen tertentu terdapat dalam campuran hanya berdasarkan kemunculan pita serapan tertentu. Oleh karena itu, seluruh pita serapan yang teramati merupakan hasil kontribusi dari semua komponen penyusun sistem campuran. Kesulitan ini menjadi semakin besar apabila salah satu komponen berada dalam proporsi yang lebih kecil dibandingkan komponen lainnya, karena pita serapan khas komponen minor dapat tertutupi oleh kontribusi spektral komponen dominan. Akibatnya, identitas kimia masing-masing komponen menjadi sulit dikenali secara langsung melalui spektrum campuran. Oleh karena itu, penyelesaian permasalahan ini adalah menguraikan kontribusi spektral dari masing-masing komponen penyusun secara matematis tanpa melalui pemisahan fisik terlebih dahulu (De Juan & Tauler, 2021; Tauler, 1995).

Asam sitrat ($C_6H_8O_7$) dan asam tartarat ($C_4H_6O_6$) adalah dua asam organik polifungsional yang banyak dimanfaatkan dalam bidang industri pangan, farmasi, dan formulasi produk *effervescent*. Secara struktural, asam sitrat merupakan asam triprotik dengan tiga gugus karboksilat ($-COOH$) dan satu gugus hidroksil ($-OH$) yang terletak pada atom karbon pusat, sedangkan asam tartarat merupakan asam diprotik dengan dua gugus karboksilat dan dua gugus hidroksil yang tersusun secara stereospesifik pada dua atom karbon yang saling berdekatan. Meskipun perbedaan jumlah dan posisi gugus fungsi ini secara teoritis akan menghasilkan profil vibrasi inframerah yang berbeda, kemiripan pada jenis gugus fungsional menyebabkan kedua senyawa menghasilkan pita serapan pada rentang bilangan gelombang yang hampir sama dalam spektrum FTIR. Hal ini mengakibatkan

adanya tumpang tindih yang signifikan pada pita serapan ketika kedua senyawa dianalisis secara langsung (Stuart, 2004; Tsiptions dkk., 2024, 2025).

Terdapat keterbatasan metode pemisahan konvensional dalam menganalisis sistem campuran padatan homogen. Metode pemisahan fisik seperti *Gas Chromatography-Mass Spectrometry* (GC-MS) tidak dapat langsung digunakan untuk asam sitrat dan asam tartarat karena kedua senyawa ini bersifat *non-volatile*. *High Performance Liquid Chromatography* (HPLC) secara prinsip dapat memisahkan keduanya, namun memerlukan optimasi fase gerak yang kompleks, pemilihan kolom yang sesuai, penggunaan pelarut *grade* tinggi, serta prosedur preparasi sampel yang relatif lebih kompleks dan memerlukan waktu analisis lebih panjang. Di sisi lain, analisis *Fourier Transform Infrared* (FTIR) menawarkan berbagai keunggulan seperti preparasi sampel yang minimal, waktu analisis singkat, bersifat non-destruktif, dan kemampuannya menganalisis sampel secara langsung dalam bentuk padatan tanpa pemisahan fisik terlebih dahulu. Namun, keunggulan FTIR dalam analisis sistem campuran belum dapat dimanfaatkan secara optimal apabila interpretasi spektrum masih dilakukan secara visual, karena permasalahan tumpang tindih spektrum tetap menjadi hambatan utama dalam identifikasi komponen penyusun (Castro dkk., 2021; Kharbach dkk., 2023; Rohman, 2014).

Spektroskopi *Fourier Transform Infrared* (FTIR) bekerja berdasarkan prinsip interaksi radiasi elektromagnetik inframerah dengan materi. Ketika suatu sampel dikenai radiasi inframerah pada rentang bilangan gelombang 4000-650 cm^{-1} , energi radiasi diserap oleh molekul pada frekuensi yang sesuai dengan frekuensi vibrasi ikatan kimia spesifik. Absorpsi ini mengeksitasi vibrasi ikatan antarmolekul berupa regangan (*stretching*) dan tekukan (*bending*). Setiap jenis ikatan dan gugus fungsi memiliki frekuensi vibrasi yang khas, pola pita serapan yang dihasilkan dapat digunakan sebagai sidik jari molekuler suatu senyawa. Secara khusus, daerah *fingerprint* pada bilangan gelombang 1500-650 cm^{-1} memberikan informasi vibrasi yang lebih spesifik terhadap keseluruhan struktur

dan rangka molekul, sehingga menjadi daerah yang informatif untuk membedakan antar senyawa yang memiliki gugus fungsi serupa. Namun, pada sistem campuran padatan homogen, informasi spesifik tersebut sering kali mengalami *overlap* akibat kontribusi seluruh komponen dalam campuran, sehingga diperlukan pendekatan analisis yang mampu memisahkan kontribusi spektral masing-masing komponen secara matematis tanpa harus melakukan pemisahan fisik terlebih dahulu (Rohman, 2014; Stuart, 2004).

Untuk mengatasi keterbatasan interpretasi visual spektrum FTIR pada sistem campuran padatan, pendekatan kemometrika dapat digunakan untuk memisahkan kontribusi spektral masing-masing komponen secara matematis tanpa melalui pemisahan fisik, tanpa penggunaan reagen tambahan, dan dengan tetap menghasilkan profil spektral yang bermakna kimiawi. *Multivariate Curve Resolution* (MCR) adalah metode kemometrika berbasis model *bilinear* $D = CS^T + E$ yang dapat mendekomposisi matriks data spektrum campuran (D) menjadi matriks profil konsentrasi (C) dan matriks spektrum komponen murni (S^T), disertai matriks residual (E). Berbeda dengan *Principal Component Analysis* (PCA) atau *Partial Least Squares* (PLS) yang lebih berorientasi pada ekstraksi informasi statistik, MCR mampu menghasilkan spektrum komponen yang tetap memiliki makna kimiawi sehingga dapat dihubungkan langsung dengan identitas gugus fungsi dan struktur molekul komponen penyusun campuran. Dengan demikian, pendekatan ini memungkinkan proses identifikasi komponen dilakukan tanpa pemisahan fisik dan tanpa penggunaan reagen tambahan, namun tetap mempertahankan interpretasi kimia yang relevan terhadap sistem yang dianalisis (Camp, 2019; De Juan & Tauler, 2021; Tauler, 1995).

Penelitian yang secara spesifik mengkaji kemampuan MCR dalam mendekomposisi sistem campuran padatan homogen asam sitrat-asam tartarat menggunakan spektroskopi FTIR masih sangat terbatas, terutama penelitian yang menghubungkan hasil dekomposisi matematis dengan validasi kemiripan spektral berbasis *cosine similarity* sebagai bukti kemiripan kimiawi terhadap spektrum

senyawa murni. Sebagian besar penelitian terdahulu yang menggunakan pendekatan kemometrika pada sistem campuran organik masih lebih banyak dilakukan pada fase cair atau larutan, serta lebih banyak menggunakan pendekatan PCA atau PLS yang menghasilkan interpretasi statistik tanpa bukti menunjukkan spektrum komponen yang secara langsung dapat diinterpretasikan secara kimiawi. Oleh karena itu, penelitian ini dilakukan untuk melengkapi celah penelitian sebelumnya melalui integrasi spektroskopi FTIR pada sistem campuran padatan homogen dengan pendekatan MCR menggunakan *initial guess* spektra murni serta validasi *cosine similarity* yang menghubungkan hasil dekomposisi matematis dengan identitas kimia masing-masing komponen penyusun (Castro dkk., 2021; De Juan & Tauler, 2021; Jaumot dkk., 2015).

B. Batasan Masalah

Batasan masalah untuk menghindari perluasan topik dalam penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Sampel yang digunakan adalah campuran biner padatan homogen asam sitrat-asam tartarat dengan variasi sampel A, sampel B, dan sampel C.
2. Analisis dilakukan menggunakan spektroskopi FTIR-ATR pada rentang bilangan gelombang 4000-650 cm^{-1} .
3. Pemisahan komponen spektral dilakukan menggunakan pendekatan kemometrika *Multivariate Curve Resolution* (MCR).
4. Evaluasi keberhasilan dekomposisi dilakukan menggunakan *cosine similarity* antara spektra hasil MCR dan spektra murni referensi.

C. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas, maka rumusan masalah dalam penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Bagaimana karakteristik profil spektra komponen penyusun, asam sitrat dan asam tartarat murni, pada daerah gugus fungsi dan *fingerprint*?

2. Bagaimana karakteristik perubahan pola spektra campuran padatan homogen asam sitrat-asam tartarat pada variasi terkontrol dan kemampuan MCR dalam pemisahan komponen penyusun?
3. Bagaimana tingkat kemiripan antara spektra hasil dekomposisi MCR dengan spektra murni masing-masing komponen berdasarkan nilai *cosine similarity*?

D. Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian mengacu pada pengkajian rumusan masalah sehingga tujuan penelitian ini sebagai berikut:

1. Mengidentifikasi karakteristik profil spektra komponen penyusun, asam sitrat dan asam tartarat murni, pada daerah gugus fungsi dan *fingerprint*.
2. Menganalisis perubahan pola spektra campuran padatan homogen asam sitrat-asam tartarat pada variasi terkontrol dan kemampuan MCR dalam pemisahan komponen penyusun.
3. Mengevaluasi keberhasilan dekomposisi MCR melalui nilai *cosine similarity* antara spektra hasil MCR dan spektra murni referensi.

E. Manfaat Penelitian

Manfaat yang diharapkan diperoleh dari penelitian ini, yaitu sebagai berikut:

1. Memberikan informasi mengenai karakteristik spektra asam sitrat dan asam tartarat sebagai acuan identitas spektral dalam analisis sistem campuran padatan homogen.
2. Memberikan bukti keberhasilan MCR sebagai metode pemisahan komponen spektral tanpa pemisahan fisik dan tanpa reagen, sebagai alternatif yang cepat, non-destruktif, dan ramah lingkungan.
3. Memberikan kontribusi metodologis bagi pengembangan analisis kemometrika berbasis FTIR untuk sistem campuran padatan homogen di bidang kimia analitik.

BAB V

PENUTUP

A. Kesimpulan

Berdasarkan penelitian dan pembahasan yang diperoleh, dapat disimpulkan bahwa:

1. Spektra ATR-FTIR asam sitrat murni menunjukkan pita O-H pada bilangan gelombang 3285 cm^{-1} dan pita C=O pada 1753, 1722, serta 1686 cm^{-1} , sedangkan asam tartarat murni menunjukkan pita O-H pada bilangan gelombang 3401 dan 3330 cm^{-1} serta pita C=O tunggal pada 1718 cm^{-1} . Daerah *fingerprint* terbukti lebih spesifik dan diskriminatif dibandingkan dengan daerah gugus fungsi utama.
2. Spektra campuran padatan homogen asam sitrat-asam tartarat pada sampel A, sampel B, dan sampel C, berubah konsisten mengikuti komposisi tanpa pergeseran bilangan gelombang. MCR berhasil mendekomposisi campuran menjadi profil komponen yang dapat diinterpretasikan, dengan pendekatan *initial guess* daerah *fingerprint* memberikan kualitas pemisahan terbaik.
3. Evaluasi keberhasilan dekomposisi MCR menunjukkan nilai *cosine similarity* $\geq 0,90$ pada seluruh pendekatan yang teridentifikasi, dengan hasil tertinggi pada pendekatan *initial guess* di daerah *fingerprint* yaitu, $\geq 0,98$ untuk asam tartarat dan $\geq 0,95$ untuk asam sitrat, membuktikan MCR akurat memisahkan komponen campuran padatan homogen tanpa pemisahan fisik.

B. Saran

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan, saran yang dapat diusulkan untuk penelitian lebih lanjut antara lain:

1. Melakukan variasi komposisi dengan proporsi komponen minor yang lebih kecil untuk menentukan batas kemampuan optimal MCR.
2. Menerapkan metode MCR pada sistem campuran multikomponen.

DAFTAR PUSTAKA

- Aleixandre-Tudo, J. L., Castello-Cogollos, L., Aleixandre, J. L., & Aleixandre-Benavent, R. (2022). Chemometrics in food science and technology: A bibliometric study. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 222, 104514. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2022.104514>
- Behera, B. C., Mishra, R., & Mohapatra, S. (2021). Microbial citric acid: Production, properties, application, and future perspectives. *Food Frontiers*, 2(1), 62–76. <https://doi.org/10.1002/fft2.66>
- Camp, C. H. (2019). pyMCR: A Python Library for Multivariate Curve Resolution Analysis with Alternating Regression (MCR-AR). *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology*, 124, 1–10. <https://doi.org/10.6028/jres.124.018>
- Castro, R. C., Ribeiro, D. S. M., Santos, J. L. M., & Páscoa, R. N. M. J. (2021). Comparison of near infrared spectroscopy and Raman spectroscopy for the identification and quantification through MCR-ALS and PLS of peanut oil adulterants. *Talanta*, 230, 122373. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2021.122373>
- Coates, J. (2000). Interpretation of Infrared Spectra, A Practical Approach. Dalam R. A. Meyers (Ed.), *Encyclopedia of Analytical Chemistry* (1 ed.). Wiley. <https://doi.org/10.1002/9780470027318.a5606>
- De Juan, A., & Tauler, R. (2021). Multivariate Curve Resolution: 50 years addressing the mixture analysis problem – A review. *Analytica Chimica Acta*, 1145, 59–78. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2020.10.051>
- De Meutter, J., & Goormaghtigh, E. (2021). Protein Structural Denaturation Evaluated by MCR-ALS of Protein Microarray FTIR Spectra. *Analytical Chemistry*, 93(40), 13441–13449. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.1c01416>

- Fahelbom, K. M., Saleh, A., Al-Tabakha, M. M. A., & Ashames, A. A. (2022). Recent applications of quantitative analytical FTIR spectroscopy in pharmaceutical, biomedical, and clinical fields: A brief review. *Reviews in Analytical Chemistry*, 41(1), 21–33. <https://doi.org/10.1515/revac-2022-0030>
- Grassi, S., Tarapoulouzi, M., D'Alessandro, A., Agriopoulou, S., Strani, L., & Varzakas, T. (2022). How Chemometrics Can Fight Milk Adulteration. *Foods*, 12(1), 139. <https://doi.org/10.3390/foods12010139>
- Husein, S. G., Firmansyah, A., & Yusuf, F. F. (2020). ANALISIS KEMOMETRIKA SPEKTRUM Fourier transformed infrared (FTIR) DARI MINYAK NABATI. *Jurnal Sains dan Teknologi Farmasi Indonesia*, 9(2), 45. <https://doi.org/10.58327/jstfi.v9i2.189>
- Jaumot, J., De Juan, A., & Tauler, R. (2015). MCR-ALS GUI 2.0: New features and applications. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 140, 1–12. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2014.10.003>
- Jessica, A., Sari, E., Yenti, R., & Zaini, E. (2023). Pembentukan dan Karakterisasi Dispersi Padat Kandesartan Sileksetil-HPMC dengan Teknik Solvent Co-Evaporation. *Jurnal Sains Farmasi & Klinis*, 10(1), 71–77. <https://doi.org/10.25077/jsfk.10.1.71-77.2023>
- Kharbach, M., Alaoui Mansouri, M., Taabouz, M., & Yu, H. (2023). Current Application of Advancing Spectroscopy Techniques in Food Analysis: Data Handling with Chemometric Approaches. *Foods*, 12(14), 2753. <https://doi.org/10.3390/foods12142753>
- Książek, E. (2023). Citric Acid: Properties, Microbial Production, and Applications in Industries. *Molecules*, 29(1), 22. <https://doi.org/10.3390/molecules29010022>
- Kulzumia, C. J., Dina Qoyima, D., Wasito, H., & Susilowati, S. S. (2017). Spektrofotometri dengan Pendekatan Kemometrika untuk Analisis Asam Benzoat dan Asam Salisilat Secara Simultan dalam Sediaan Larutan. *MPI*

- (*Media Pharmaceutica Indonesiana*), 1(3), 164–173.
<https://doi.org/10.24123/mpi.v1i3.269>
- Li, Y., Li, N., Tu, S., Alon, Y., Li, Z., Betker, M., Sun, D., Kurmanbay, A., Chen, W., Liang, S., Shi, S., Roth, S. V., & Müller-Buschbaum, P. (2024). Drop-Cast Hybrid Poly(styrene)-b-Poly(ethylene oxide) Metal Salt Films: Solvent Evaporation and Crystallinity-Dependent Evolution of Film Morphology. *Small*, 20(51), 2406279. <https://doi.org/10.1002/sml.202406279>
- Mendieta, J., Díaz-Cruz, M. S., Esteban, M., & Tauler, R. (1998). Multivariate curve resolution: A possible tool in the detection of intermediate structures in protein folding. *Biophysical journal*, 74(6), 2876–2888.
- Menzel, C. (2020). Improvement of starch films for food packaging through a three-principle approach: Antioxidants, cross-linking and reinforcement. *Carbohydrate Polymers*, 250, 116828.
- Miseo, E. V., & Larkin, P. J. (2025). Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) Diamond Attenuated Total Reflection (ATR) Measurements: The Good, the Bad, and the (Really) Ugly. *Applied Spectroscopy Practica*, 3(2), 27551857251336262. <https://doi.org/10.1177/27551857251336262>
- Nagai, Y., & Katayama, K. (2021). Multivariate curve resolution combined with estimation by cosine similarity mapping of analytical data. *The Analyst*, 146(16), 5045–5054. <https://doi.org/10.1039/D1AN00362C>
- Nandiyanto, A. B. D., Ragadhita, R., & Fiandini, M. (2023). Interpretation of Fourier transform infrared spectra (FTIR): A practical approach in the polymer/plastic thermal decomposition. *Indonesian Journal of Science and Technology*, 8(1), 113–126.
- Nur Lestriyani, Mutiara Aulia Putri, Nurul Khotimah, & Raka Puja Susanto. (2025). Literatur Review Artikel: Metode Spektrofotometri Inframerah Sebagai Penetapan Kadar Obat Pada Sediaan Farmasi. *Jurnal Ilmu Kedokteran dan Kesehatan Indonesia*, 5(1), 259–268.
<https://doi.org/10.55606/jikki.v5i1.6904>

- Rohman, A. (2014). *Spektroskopi inframerah dan kemometrika untuk analisis farmasi*.
- Sastrohamidjojo, H. (2021). *Spektroskopi* (Edisi Kedua). Liberty.
- Silverstein, R. M., Webster, F. X., Kiemle, D. J., & Bryce, D. L. (2014). *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, Eighth Edition, John Wiley & Sons. Inc., NJ.
- Socrates, G. (2004). *Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies: Tables and Charts*. John Wiley & Sons.
- Stuart, B. H. (2004). *Infrared spectroscopy: Fundamentals and applications*. John Wiley & Sons.
[https://www.google.com/books?hl=en&lr=&id=xQVog8RrJKcC&oi=fnd&pg=PR5&dq=Stuart,+B.+H.+\(2004\).+Infrared+spectroscopy:+fundamentals+and+applications.+John+Wiley+%26+Sons.&ots=LlcNcuaMJn&sig=8YcoagxN9nKPt0nVjU1oJbqwWUE](https://www.google.com/books?hl=en&lr=&id=xQVog8RrJKcC&oi=fnd&pg=PR5&dq=Stuart,+B.+H.+(2004).+Infrared+spectroscopy:+fundamentals+and+applications.+John+Wiley+%26+Sons.&ots=LlcNcuaMJn&sig=8YcoagxN9nKPt0nVjU1oJbqwWUE)
- Tauler, R. (1995). Multivariate curve resolution applied to second order data. *Chemometrics and intelligent laboratory systems*, 30(1), 133–146.
- Tsiptsias, C., Matsia, S., Salifoglou, A., Georgiadis, K. E., Kyriakouli, K., Ritzoulis, C., Tsivintzelis, I., & Panayiotou, C. (2025). Revisiting the Thermal Behavior and Infrared Absorbance Bands of Anhydrous and Hydrated DL-Tartaric Acid. *Molecules*, 30(8), 1732. <https://doi.org/10.3390/molecules30081732>
- Tsiptsias, C., Panagiotou, A., & Mitlianga, P. (2024). Thermal Behavior and Infrared Absorbance Bands of Citric Acid. *Applied Sciences*, 14(18), 8406. <https://doi.org/10.3390/app14188406>
- Wardoyo, R. G. R., & Buwono, H. P. (2025). Pengaruh kecepatan pengaduk ganda dan waktu pengadukan pada mesin pencampur terhadap homogenitas sampel organik dalam proses pengomposan. *Jurnal Teknik Mesin, Industri, Elektro Dan Informatika*, 4(1), 47–58.

- Yan, C. (2025). A review on spectral data preprocessing techniques for machine learning and quantitative analysis. *iScience*, 28(7), 112759. <https://doi.org/10.1016/j.isci.2025.112759>
- Yang, M., Chen, D., Hu, J., Zheng, X., Lin, Z.-J., & Zhu, H. (2022). The application of coffee-ring effect in analytical chemistry. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 157, 116752.
- Yu, C., Wang, Y., Cao, H., Zhao, Y., Li, Z., Wang, H., Chen, M., & Tang, Q. (2020). Simultaneous Determination of 13 Organic Acids in Liquid Culture Media of Edible Fungi Using High-Performance Liquid Chromatography. *BioMed Research International*, 2020, 2817979. <https://doi.org/10.1155/2020/2817979>