



**OPTIMASI FRAKSINASI MONOASILGLISEROL (MAG)
DARI MONODIASILGLISEROL (MDAG) BERBASIS
PEMODELAN KELARUTAN MENGGUNAKAN *QUANTITATIVE
STRUCTURE PROPERTY RELATIONSHIP* (QSPR) DAN
PENDEKATAN EKSTRAKSI**

GINA LIBRIA NADJAMOEDDIN



**PROGRAM STUDI DOKTOR ILMU PANGAN
FAKULTAS TEKNOLOGI PERTANIAN
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2024**



@Hak cipta milik IPB University

IPB University

- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



PERNYATAAN MENGENAI DISERTASI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa disertasi dengan judul “Optimasi Fraksinasi Monoasilgliserol (MAG) dari Monodiasilgliserol (MDAG) Berbasis Pemodelan Kelarutan Menggunakan *Quantitative Structure Property Relationship* (QSPR) dan Pendekatan Ekstraksi” adalah karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apa pun kepada perguruan tinggi mana pun. Sumber informasi yang berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan dari penulis lain telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam Daftar Pustaka di bagian akhir disertasi ini.

Dengan ini saya melimpahkan hak cipta dari karya tulis saya kepada Institut Pertanian Bogor.

Bogor, September 2024

Gina Libria Nadjamoeddin

F2601201004

@Hak cipta milik IPB University

IPB University

- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



@Hak cipta milik IPB University

IPB University

- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

RINGKASAN

GINA LIBRIA NADJAMOEDDIN. Optimasi Fraksinasi Monoasilgliserol (MAG) dari Monodiasilgliserol (MDAG) Berbasis Pemodelan Kelarutan Menggunakan *Quantitative Structure Property Relationship* (QSPR) dan Pendekatan Ekstraksi. Dibimbing oleh DIDAH NUR FARIDAH, NURI ANDARWULAN, PURWIYATNO HARIYADI dan MOHAMMAD KHOTIB.

Monodiasilgliserol (MDAG) dan turunannya merupakan pengemulsi yang banyak digunakan dalam industri pangan. Produk MDAG dari bahan baku *Refined Bleached Deodorized Palm Stearin* (RBDPS) memiliki komposisi asam lemak jenuh yaitu asam palmitat sebesar $55,69 \pm 0,45\%$ dan asam lemak tak jenuh yaitu asam oleat sebesar $31,34 \pm 1,74\%$. Komposisi ini berbeda dengan MDAG komersial (MDAG-K) yang memiliki komposisi dominan berupa asam lemak jenuh yaitu asam palmitat sebesar $55,92 \pm 0,77\%$ dan asam stearat sebesar $42,58 \pm 0,52\%$. Perbedaan komposisi tersebut menghasilkan MDAG berbahan baku RBDPS (MDAG-RBDPS) yang memiliki karakteristik berbeda dengan MDAG-K, sehingga dapat memperkaya jenis pengemulsi nabati berbahan baku minyak sawit.

Monodiasilgliserol umumnya berupa campuran MAG, DAG dan sisa TAG. Monoasilgliserol (MAG) diketahui sebagai pengemulsi dengan kinerja lebih baik dibandingkan dalam bentuk MDAG, sehingga fraksinasi MAG telah banyak dikembangkan saat ini. Karakteristik MAG yang bersifat polimorfis dan tidak stabil pada suhu tinggi menyebabkan teknik fraksinasi MAG dan DAG sulit dilakukan. Destilasi molekuler telah dikembangkan untuk fraksinasi dan purifikasi MAG, namun teknik ini membutuhkan investasi cukup besar. Berdasarkan hal tersebut, diperlukan metode fraksinasi yang sederhana yaitu ekstraksi pelarut untuk dapat memisahkan MAG dan DAG dari MDAG.

Tahapan kritis untuk ekstraksi pelarut adalah penentuan jenis dan komposisi pelarut yang digunakan. Jenis pelarut yang digunakan sangat terbatas karena faktor keamanan pangan. Penentuan pelarut menjadi suatu tantangan tersendiri dikarenakan karakteristik MAG, jenis pelarut yang sangat terbatas, serta variasi komposisi MDAG yang sangat tergantung pada bahan baku. Pemilihan pelarut secara eksperimental membutuhkan waktu dan biaya yang tidak sedikit. Berdasarkan hal tersebut, penelitian dilakukan secara terintegrasi antara eksperimen laboratorium dan komputasi melalui pendekatan model *Quantitative Structure Property Relationships* (QSPR) untuk *screening* jenis dan komposisi pelarut yang akan digunakan untuk proses ekstraksi.

Evaluasi kelarutan MDAG-RBDPS berdasarkan diagram terner menunjukkan bahwa pelarut biner heksana: etanol (60:40) memberikan tingkat kelarutan optimum pada suhu ruang, dibandingkan dengan pelarut tunggalnya. Model QSPR untuk kelarutan MDAG-RBDPS dalam pelarut tunggal dan biner menunjukkan bahwa deskriptor Δ momen dipol ($\Delta\mu$), E HOMO, E LUMO, energi elektronik, energi *gap* HOMO-LUMO (ΔE_1 , ΔE_2), *softness* (S), indeks elektrofilitas (ω), dan transfer elektron (ΔN) memiliki dampak signifikan dalam menentukan kelarutan MDAG. Baik model kelarutan pelarut tunggal maupun biner dapat memberikan hasil prediksi yang memuaskan: kuadrat koefisien korelasi (R^2_{pred}) adalah 0,933 dan 0,948, dan kesalahan *root-mean-square* (RMSE) masing-masing adalah 0,075 dan 0,031 untuk seluruh kumpulan data.

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkannya dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Model dianggap valid karena memiliki nilai $R^2_{pred} \geq 0,6$ dan $RMSE < 0,3$. Penelitian ini memberikan metode baru dan efektif untuk memprediksi kelarutan MDAG-RBDPS dalam sistem pelarut *food grade* tunggal dan biner.

Pelarut biner heksana: etanol digunakan untuk proses ekstraksi MDAG-RBDPS. Tiga metode ekstraksi yang berbeda, yaitu ekstraksi padat-cair, ekstraksi cair-cair dan ekstraksi cair-cair berbantuan silika multi-tahap, digunakan untuk memfraksinasi MDAG-RBDPS. Ekstraksi cair-cair berbantuan silika multi-tahap memberikan kinerja pemisahan yang lebih baik daripada ekstraksi padat-cair dan cair-cair. Metode ekstraksi ini menggabungkan dua mekanisme pemisahan, yaitu adsorpsi pada silika dan kelarutan dalam pelarut yang sesuai. Metode ini memiliki potensi untuk fraksinasi MDAG-RBDPS dan produksi fraksi kaya MAG dan fraksi kaya DAG.

Ekstraksi cair-cair dengan bantuan silika multi-tahap digunakan untuk memfraksinasi MDAG-RBDPS menjadi fraksi kaya MAG dan fraksi kaya DAG. *Respon Surface Methodology* (RSM) digunakan untuk mengoptimalkan parameter ekstraksi. Perhitungan menggunakan *response optimizer* menunjukkan bahwa suhu ekstraksi $39,29\text{ }^{\circ}\text{C}$, waktu ekstraksi 30,15 menit dan konsentrasi MDAG 38,10 %b/b, mampu mencapai kemurnian MAG sebesar 89,72%. Hasil optimasi model diverifikasi secara eksternal di laboratorium. Ekstraksi dilakukan dengan menggunakan parameter optimal dan diulang 5 kali. Parameter optimal yang digunakan di laboratorium adalah suhu sebesar $39,0 \pm 1,0\text{ }^{\circ}\text{C}$, waktu ekstraksi selama $30,0 \pm 1,0$ menit dan konsentrasi MDAG sebesar $38,0 \pm 1,0\text{ } \%b/b$. Hasil eksperimen menunjukkan hasil ekstraksi pada tahap 3 memperoleh komposisi MAG sebesar $89,86 \pm 3,91\%$. Rendemen yang diperoleh pada tahap 3 sebesar $12,70 \pm 1,94\text{ } \%b/b$, menjadi tantangan bagi pengembangan metode ekstraksi ini ke depannya.

Hasil fraksinasi dikarakterisasi untuk nilai *Solid Fat Content* (SFC), titik leleh maupun titik kristalisasi menggunakan *Differential Scanning Calorimetry* (DSC). Fraksi kaya MAG dan fraksi kaya DAG memiliki kurva SFC yang lebih landai pada suhu $30-45\text{ }^{\circ}\text{C}$ dibandingkan dengan fraksi MAG-DAG, sesuai untuk diaplikasikan pada produk-produk pangan yang memiliki rentang plastisitas lebar. Sementara itu fraksi MAG-DAG memiliki kurva SFC yang cenderung lebih curam pada suhu $30-45\text{ }^{\circ}\text{C}$, sesuai untuk diaplikasikan pada produk pangan yang keras pada suhu di bawah $30\text{ }^{\circ}\text{C}$, namun segera meleleh pada perubahan suhu yang sempit. Hasil penelitian menunjukkan terdapat keterkaitan antara jenis dan komposisi asam lemak, serta profil asil gliserol terhadap karakteristik termal seperti nilai SFC, titik leleh dan titik kristalisasi. Informasi tersebut berguna untuk memprediksikan karakter termal pada sampel pengemulsi berbasis lemak.

Kata kunci: ekstraksi pelarut, model kelarutan, monodiasilgliserol, optimasi

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkannya dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

SUMMARY

GINA LIBRIA NADJAMOEDDIN. Optimization of Monoacylglycerol (MAG) Fractionation of Monodiacylglycerol (MDAG) Based on Solubility Modelling Using Quantitative Structure Property Relationship (QSPR) and Extraction Approach. Supervised by DIDAH NUR FARIDAH, NURI ANDARWULAN, PURWIYATNO HARIYADI and MOHAMMAD KHOTIB.

Monodiasilglycerol (MDAG) and its derivatives are emulsifiers that are widely used in the food industry. MDAG products from Refined Bleached Deodorized Palm Stearin (RBDPS) have a saturated fatty acid composition, namely palmitic acid of $55.69 \pm 0.45\%$ and unsaturated fatty acids, namely oleic acid of $31.34 \pm 1.74\%$. This composition is different from commercial MDAG (MDAG-K) which has a dominant composition in the form of saturated fatty acids, namely palmitic acid of $55.92 \pm 0.77\%$ and stearic acid of $42.58 \pm 0.52\%$. The difference in composition produces MDAG made from RBDPS (MDAG-RBDPS) has different characteristics from MDAG-K, thus enriching the type of vegetable emulsifier made from palm oil.

Monodiacylglycerol is generally a mixture of MAG, DAG and residual TAG. Monoacylglycerol (MAG) is known to be an emulsifier with better performance than in the form of MDAG, so MAG fractionation has been widely developed today. The characteristics of MAG which are polymorphic and unstable at high temperatures make it difficult to perform MAG and DAG fractionation techniques. Molecular distillation has been developed for fractionation and purification of MAG, but this technique requires considerable investment. Based on this, a simple fractionation method, namely solvent extraction, is needed to be able to separate MAG and DAG from MDAG.

A critical stage for solvent extraction is the determination of the type and composition of the solvent used. The types of solvents used are very limited due to food safety factors. Solvent determination is a challenge due to the characteristics of MAG, very limited types of solvents, and variations in MDAG composition that are highly dependent on raw materials. Experimental solvent selection takes a lot of resources. Based on this, the research was carried out in an integrated between laboratory and computational experiments through the Quantitative Structure Property Relationships (QSPR) model approach to screen the type and composition of solvents to be used for the extraction process.

The solubility evaluation of MDAG-RBDPS based on ternary diagrams shows that the hexane: ethanol binary solvent (60:40) provides the best solubility at room temperature, compared to its single solvent. The QSPR model for the solubility of MDAG in single and binary solvents shows that the Δ ($\Delta\mu$), E HOMO, E LUMO dipole moment descriptors, electronic energy, HOMO-LUMO ($\Delta E1$, $\Delta E2$) gap energy, softness (S), electrophilicity index (ω), and electron transfer (ΔN) have a significant impact on determining the solubility of MDAG. Both single and binary solvent solubility models can provide satisfactory prediction results: the quadratic coefficients of correlation (R^2_{pred}) are 0.933 and 0.948, and the root-

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :

a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.

2. Dilarang mengumumkannya dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

mean-square (RMSE) errors are 0.075 and 0.031, respectively, for the entire dataset. The model is considered valid because it has an R^2 -pred value of ≥ 0.6 and $RMSE < 0.3$. This study provides a novel and effective method to predict the solubility of MDAG-RBDPS in single and binary food grade solvent systems.

Hexane: ethanol binary solvents is used for the extraction process of MDAG-RBDPS. Three different extraction methods, namely solid-liquid extraction, liquid-liquid extraction and multi-stage silica-assisted liquid-liquid extraction are used to fractionate MDAG-RBDPS. Multi-stage silica-assisted liquid-liquid extraction provides better separation performance than solid-liquid and liquid-liquid extraction. This extraction method combines two separation mechanisms, namely adsorption in silica and solubility in the corresponding solvent. This method has the potential for MDAG-RBDPS fractionation and the production of MAG rich-fraction and DAG rich-fraction.

Multi-stage silica-assisted liquid-liquid extraction is used to fractionate MDAG-RBDPS into MAG-rich fractions and DAG-rich fractions. The response surface methodology was used to optimize the extraction parameters. Calculations using a response optimizer showed that the extraction temperature was 39.29 °C, the extraction time was 30.15 minutes and the ratio of MDAG to solvent was 38.10%, able to achieve a MAG purity of 89.72%. The results of the model optimization are verified externally in the laboratory. Extraction was carried out using optimal parameters and repeated 5 times. The optimal parameters in laboratory are a temperature of 39.0 ± 1.0 °C, an extraction time of 30.0 ± 1.0 minutes and ratio of MDAG to solvent of 38.0 ± 1.0 %w/w. The results of the experiment showed the extraction results in stage 3, with the percentage of MAG composition of 89.86 ± 3.91 %. However, the yield obtained in phase 3 of 12.70 ± 1.94 %w/w, is a challenge for the development of this extraction method in the future.

The fractionation results are characterized for Solid Fat Content (SFC) values, melting point and crystallization point using Differential Scanning Calorimetry (DSC). The MAG-rich fraction and the DAG-rich fraction have a sloping SFC curve at 30-45 °C, suitable for application to food products that have a wide plasticity range. Meanwhile, the MAG-DAG fraction tends to be steeper, suitable for application to food products that are hard at temperature below 30 °C, but immediately melt at narrow temperature changes. At this stage, it is also known that there is a high correlation between the type, composition of fatty acids, and the glycerol acyl profile on physical characteristics such as SFC value, melting point and crystallization point. This information is useful for predicting the thermal character of fat-based emulsifier samples.

Keywords: monodiacylglycerol, optimization, solubility model, solvent extraction.



© Hak Cipta milik IPB, tahun 2024
Hak Cipta dilindungi Undang-Undang

Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan atau menyebutkan sumbernya. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah, dan pengutipan tersebut tidak merugikan kepentingan IPB.

Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apa pun tanpa izin IPB.

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.





@Hak cipta milik IPB University

IPB University

- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

**OPTIMASI FRAKSINASI MONOASILGLISEROL (MAG)
DARI MONODIASILGLISEROL (MDAG) BERBASIS
PEMODELAN KELARUTAN MENGGUNAKAN
QUANTITATIVE STRUCTURE PROPERTY RELATIONSHIP
(QSPR) DAN PENDEKATAN EKSTRAKSI**

GINA LIBRIA NADJAMOEDDIN

Disertasi
sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Doktor pada
Program Studi Ilmu Pangan

**PROGRAM STUDI ILMU PANGAN
FAKULTAS TEKNOLOGI PERTANIAN
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2024**

- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang menggunakan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



@Hak cipta milik IPB University

IPB University

Penguji Luar Komisi Pembimbing pada Ujian Tertutup Disertasi:

- 1 Dr. Drs. Zainal Alim Mas'ud D.E.A
- 2 Dr. Nur Wulandari, S.T.P., M.Si

Promotor Luar Komisi Pembimbing pada Sidang Promosi Terbuka Disertasi:

- 1 Dr. Mursiti, S.T., M.T
- 2 Dr. Nur Wulandari, S.T.P., M.Si

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.





Judul Disertasi : Optimasi Fraksinasi Monoasilgliserol (MAG) dari Monodiasilgliserol (MDAG) Berbasis Pemodelan Kelarutan Menggunakan *Quantitative Structure Property Relationship* (QSPR) dan Pendekatan Ekstraksi
Nama : Gina Libria N
NIM : F2601201004

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Prof. Dr. Didah Nur Faridah S.T.P., M.Si.



Pembimbing 2:
Prof. Dr. Ir. Nuri Andarwulan M.Si.



Pembimbing 3:
Prof. Dr. Ir. Purwiyatno Hariyadi M.Sc.



Pembimbing 4:
Dr. Mohammad Khotib S.Si., M.Si.



Diketahui oleh

Ketua Program Studi:
Prof. Dr. Ir. Harsi Dewantari Kusumaningrum
NIP. 19640502 199303 2 004



Dekan Fakultas Teknologi Pertanian:
Prof. Dr. Ir. Slamet Budijanto M.Agr.
NIP. 19610502 198603 1 002



Tanggal Ujian: 16 Agustus 2024

Tanggal Pengesahan: 04 November 2024

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



x

@Hak cipta milik IPB University

IPB University



IPB University
— Bogor Indonesia —

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Allah SWT atas segala karunia-Nya sehingga karya ilmiah ini berhasil diselesaikan. Tema yang dipilih dalam penelitian yang dilaksanakan sejak bulan Januari 2022 sampai bulan Januari 2024 adalah optimasi metode untuk mendapatkan fraksinasi MDAG berbahan baku RBDPS dengan judul “Optimasi Fraksinasi Monoasilgliserol (MAG) dari Monodiasilgliserol (MDAG) Berbasis Pemodelan Kelarutan Menggunakan *Quantitative Structure Property Relationship* (QSPR) dan Pendekatan Ekstraksi”.

Terima kasih penulis ucapkan kepada seluruh pihak yang telah membantu penulis dalam menyelesaikan masa studi, terutama kepada para pihak berikut ini:

1. Prof. Dr. Didah Nur Faridah, sebagai ketua komisi pembimbing, yang senantiasa memberikan arahan dan masukan dalam pelaksanaan penelitian maupun penyusunan disertasi ini.
2. Prof. Dr. Nuri Andarwulan sebagai anggota komisi pembimbing yang senantiasa memberikan arahan dan masukan dalam pelaksanaan penelitian maupun penyusunan disertasi ini.
3. Prof. Dr. Purwiyatno Hariyadi sebagai anggota komisi pembimbing yang senantiasa memberikan arahan dan masukan dalam pelaksanaan penelitian maupun penyusunan disertasi ini.
4. Dr. Mohammad Khotib sebagai anggota komisi pembimbing dan kepala Laboratorium Terpadu IPB yang telah memberikan fasilitas laboratorium untuk sintesis dan pengujian selama penelitian.
5. Dr. Drs. Zainal Alim Mas’ud D.E.A dan Dr. Nur Wulandari, S.T.P., M.Si sebagai Penguji Luar Komisi Pembimbing pada Ujian Tertutup Disertasi.
6. Dr. Mursiti, S.T., M.T dan Dr. Nur Wulandari, S.T.P., M.Si sebagai Promotor Luar Komisi Pembimbing pada Sidang Promosi Terbuka Disertasi
7. Ketua Program Studi Ilmu Pangan, Ketua Departemen ITP serta Dekan Fakultas Teknologi Pertanian, yang telah memberikan kesempatan penulis untuk menempuh kuliah S3 pada program studi IPN.
8. Ibu Dwika Riandari, sebagai kepala sekolah SMK SMAK Bogor yang telah memberikan kesempatan kepada penulis untuk mengerjakan penelitian di Laboratorium SMK SMAK Bogor.
9. Badan Pengembangan Sumber Daya Manusia Industri (BPSDMI) Kementerian Perindustrian Republik Indonesia untuk Beasiswa Mandiri Doktor dari tahun 2020 -2024.
10. Seluruh teman seangkatan dan seperjuangan di Program Studi Doktor Ilmu Pangan IPB 2020.
11. Ungkapan terima kasih juga disampaikan kepada suami tercinta dan anak- anak tersayang serta seluruh keluarga besar yang telah memberikan doa, dukungan, dan kasih sayangnya kepada penulis selama menjalani pendidikan doktor di Program Studi Ilmu Pangan IPB.

Akhir kata, semoga disertasi ini dapat bermanfaat dan berkontribusi bagi masyarakat dan kemajuan ilmu pengetahuan.

Bogor, September 2024



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	xv
DAFTAR GAMBAR	xv
DAFTAR LAMPIRAN	xvi
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Tujuan	4
1.4 Manfaat	5
1.5 Ruang Lingkup	5
1.6 Kebaruan (<i>novelty</i>)	5
1.7 Hipotesis	5
II SINTESIS DAN KARAKTERISASI MONODIASILGLISEROL (MDAG) BERBAHAN BAKU <i>REFINED BLEACHED DEODORIZED PALM STEARIN</i> (RBDPS)	7
2.1 Pendahuluan	7
2.2 Metode	8
2.3 Hasil dan Pembahasan	13
2.4 Simpulan dan Saran	22
III EVALUASI KELARUTAN MDAG-RBDPS PADA PELARUT <i>FOOD GRADE</i> (HEKSANA, ETANOL, ASETON, AIR) MELALUI PENDEKATAN MODEL <i>QUANTITATIVE STRUCTURE – PROPERTY RELATIONSHIPS</i> (QSPR) ¹	23
3.1 Pendahuluan	23
3.2 Metode	24
3.3 Hasil dan Pembahasan	26
3.4 Simpulan dan Saran	37
IV EKSTRAKSI CAIR-CAIR BERBANTUAN SILIKA MULTI-TAHAP UNTUK FRAKSINASI MDAG-RBDPS ²	38
4.1 Pendahuluan	38
4.2 Metode	39
4.3 Hasil dan Pembahasan	41
4.4 Simpulan dan Saran	48
V OPTIMASI MENGGUNAKAN <i>RESPONSE SURFACE METHODOLOGY</i> (RSM) UNTUK FRAKSINASI MDAG-RBDPS MELALUI EKSTRAKSI CAIR-CAIR BERBANTUAN SILIKA MULTI-TAHAP	49
5.1 Pendahuluan	49
5.2 Metode	50
5.3 Hasil dan Pembahasan	52
5.4 Simpulan dan Saran	57
VI EVALUASI KARAKTERISTIK FISIK HASIL FRAKSINASI MDAG-RBDPS	59
6.1 Pendahuluan	59

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

6.2	Metode	60
6.3	Hasil dan Pembahasan	62
6.4	Simpulan dan Saran	72
VII PEMBAHASAN UMUM		73
VIII SIMPULAN DAN PERSPEKTIF MASA DEPAN		76
8.1	Simpulan	76
8.2	Perspektif Masa Depan	77
8.3	Saran Penelitian Lanjutan	77
DAFTAR PUSTAKA		79
LAMPIRAN		87
RIWAYAT HIDUP		93



DAFTAR TABEL

2.1 Komposisi gliserol dalam MDAG	14
2.2 Spesifikasi mutu dari RBDPS dan MDAG-RBDPS	16
2.3 Komposisi asam lemak RBDPS dan MDAG-RBDPS	17
2.4 Profil asilgliserol pada bahan baku RBDPS dan MDAG-RBDPS	18
2.5 Suhu transisi dan nilai entalpi dari RBDPS dan MDAG-RBDPS	19
2.6 Perbandingan karakteristik <i>crude</i> MDAG-RBDPS dengan MDAG-K (E471)	20
3.1 Komposisi sistem biner untuk pengukuran kelarutan MDAG-RBDPS	25
3.2 Kelarutan MDAG-K dan MDAG-RBDPS pada pelarut tunggal	26
3.3 Validasi internal MDAG-RBDPS dalam model pelarut tunggal	28
3.4 Indeks polaritas pelarut dan kelarutan MDAG-RBDPS	31
3.5 Validasi internal dalam model pelarut biner	32
3.6 Ringkasan deskriptor molekuler pada model yang diusulkan	34
4.1 Komposisi dihasilkan dari fraksinasi MDAG-RBDPS dengan ekstraksi padat-cair	42
4.2 Komposisi MAG dan DAG pada ekstraksi tahap 1 (pelarut heksana)	46
4.3 Persentase MDAG dipertahankan pada silika	48
5.1 Desain eksperimen berdasarkan Model <i>Box Behnken</i>	52
5.2 Hubungan antara variabel independen dengan variabel respon dalam RSM	54
5.3 Koefisien variabel respons dan validasi model	55
5.4 Hasil fraksinasi dalam proses verifikasi RSM secara eksperimental	57
6.1 Komposisi kimia dari produk fraksinasi MDAG dan GMS-K	64
6.2 Komposisi asam lemak dan profil asil gliserol sampel uji	67
6.3 Data titik leleh dan titik kristalisasi	68
6.4 Data SFC pada beberapa produk fraksinasi MDAG	68
6.5 Model regresi linear persamaan SFC	69
6.6 Model regresi linear untuk titik kristalisasi (CP) dan titik leleh (MP)	71

DAFTAR GAMBAR

2.1 Profil kromatogram dari RBDPS/bahan baku dan MDAG-RBDPS	18
2.2 Termogram pelelehan (A) dan kurva SFC (B) dari RBDPS dan MDAG-RBDPS	19
2.3 Termogram pelelehan (A), kurva SFC (B) dan spektrum FTIR (C) dari MDAG-RBDPS dan MDAG-K	21
3.1 Struktur molekul dari MAG (A), DAG (B) dan TAG (C) (Feltes et al. 2013)	23
3.2 Regresi antara Log S(exp) dan Log S(pred) MDAG-RBDPS berdasarkan model kelarutan pada pelarut tunggal	28
3.3 Regresi antara Log S(exp) dan Log S(pred) MDAG-K berdasarkan model kelarutan pada pelarut tunggal	29
3.4 Diagram terner MDAG-RBDPS/heksana/etanol	30

3.5 Regresi antara Log S (exp) dan Log S (pred) MDAG-RBDPS berdasarkan model QSPR untuk kelarutan pada pelarut biner	32
3.6 Regresi antara Log S(exp) dan Log S(pred) MDAG-K berdasarkan model kelarutan pada pelarut biner	33
4.1 Diagram terner komponen heksana-etanol-MDAG RBDPS pada suhu kamar	41
4.2 Komposisi fase organik (A) dan fraksi <i>aqueous</i> (B) dari ekstraksi cair-cair	44
4.3 Komposisi asil gliserol dari hasil ekstraksi cair-cair berbantuan silika multi-tahap	46
5.1 Optimasi respons fraksinasi MDAG-RBDPS	56
6.1 Kurva SFC fraksi kaya MAG vs GMS-K (A); grafik DSC fraksi kaya MAG vs GMS-K (B)	65
6.2 Kurva SFC dari MDAG-RBDPS, MDAG-K, GMS-K dan fraksi-fraksi MDAG-RBDPS	67
6.3 Regresi antara SFC (exp) dan SFC (pred)	70
6.4 Regresi antara CP prediksi (CP pred) dan CP eksperimen (CP exp)	71
6.5 Regresi antara MP prediksi (MP pred) dan MP eksperimen (MP exp)	72

DAFTAR LAMPIRAN

1 Diagram alir penelitian	88
2 Prosedur, prosedur, dan produk gliserolisis MDAG berbahan baku RBDPS	89
3 Sistem biner untuk pengukuran kelarutan MDAG dan prosedur pemilihan deskriptor	90
4 Kromatogram dari MDAG RBDPS dan hasil fraksinasi	90
5 Hasil fraksinasi MDAG-RBDPS	92

