



NON-TARGET SCREENING ZAT KONTAK PANGAN PADA KANTONG TEH CELUP BERBAHAN DASAR KERTAS

MUHAMMAD ASHARI YUSUF



**PROGRAM STUDI MAGISTER TEKNOLOGI PANGAN
FAKULTAS TEKNOLOGI PERTANIAN
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**



@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.



PERNYATAAN MENGENAI TESIS DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa tesis dengan judul “*Non-Target Screening* Zat Kontak Pangan pada Kantong Teh Celup Berbahan Dasar Kertas” adalah benar karya saya dengan arahan dari komisi pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apapun 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 tesis ini.

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

Bogor, 14 Maret 2025

Muhammad Ashari Yusuf
NIM F2502211018



RINGKASAN

MUHAMMAD ASHARI YUSUF. *Non-Target Screening* Zat Kontak Pangan pada Kantong Teh Celup Berbahan Dasar Kertas. Dibimbing oleh HANIFAH NURYANI LIOE dan NUGRAHA EDHI SUYATMA.

Migrasi senyawa ke bahan pangan merupakan isu keamanan pangan global yang semakin mendapat perhatian. Penerapan regulasi kemasan pangan di Indonesia menunjukkan perhatian negara terhadap isu ini. Migrasi senyawa ini berpotensi menimbulkan risiko kesehatan, meskipun tidak seluruhnya. Oleh karena itu, identifikasi senyawa yang bermigrasi menjadi krusial.

Kantong teh, sebagai artikel unik yang berfungsi sebagai kemasan primer dan penyaring, menarik untuk diperhatikan. Proses penyeduhan pada suhu tinggi dapat memodulasi migrasi berbagai senyawa dari kantong teh ke dalam seduhan. Kompleksitas reaksi kimia dan sumber senyawa menyebabkan senyawa-senyawa *unknown* yang bermigrasi dan sulit diidentifikasi dengan metode konvensional. Oleh karena itu, analisis nontarget dilakukan untuk mengeksplorasi senyawa-senyawa yang bermigrasi tersebut guna identifikasi awal.

Penelitian pendahuluan ini bertujuan untuk mengeksplorasi dan mengidentifikasi senyawa-senyawa yang bermigrasi dari kantong teh ke dalam air seduhan, khususnya senyawa migran yang berpotensi memiliki risiko kesehatantapi tidak terantau regulasi. Untuk mencapai tujuan tersebut, pendekatan analisis nontarget berbasis *Liquid Chromatography-Quadrupole Time-of-Flight* (LC-QToF) yang dipilih untuk mendeteksi senyawa hidrofilik dan nonvolatil. Alur kerja penelitian ini mencakup beberapa tahapan utama, mulai dari penentuan sampel, simulasi kontak pangan, hingga *clean-up* dengan *Solid Phase Extraction* (SPE). Strategi refuksi data QToF kemudian diterapkan untuk meningkatkan selektivitas dan spesifisitas identifikasi kandidat massa, menekan potensi *false positive*, serta mengolah data kompleks menjadi informasi yang lebih mudah dianalisis.

Alur kerja analisis skrining nontarget menghasilkan deteksi terhadap 56 respons pada polaritas (ESI-) dan 97 respons pada polaritas positif (ESI+), yang mengindikasikan keberadaan 27 kandidat senyawa pada ESI- dan 46 kandidat senyawa pada ESI+. Dari kandidat senyawa terdeteksi, teridentifikasi dua senyawa terduga yang berpotensi menimbulkan risiko kesehatan, yaitu glufosinat dan 9-vinylnanthracene, sehingga konfirmasi lebih lanjut dengan metode uji definitif diperlukan untuk memvalidasi temuan awal ini. Meskipun identifikasi komprehensif terhadap seluruh senyawa terdeteksi masih menjadi tantangan, pendekatan skrining nontarget dapat memberikan wawasan awal yang berharga mengenai profil senyawa yang berpotensi bermigrasi.

Kata kunci: Analisis nontarget, kantong teh, LC-QToF, migrasi, skrining

SUMMARY

MUHAMMAD ASHARI YUSUF. Non-Target Screening of Food Contact Substances in Paper-Based Tea Bags. Supervised by HANIFAH NURYANI LIOE and NUGRAHA EDHI SUYATMA

The migration of chemical compounds into food matrices is a global food safety concern of increasing prominence. The implementation of food packaging regulation in Indonesia shows the nation's attentiveness to this issue. While not all migrating compounds pose a health risk, the potential for such risks underscores the criticality of identifying these migrating substances.

Tea bags, as unique articles serving both as primary packaging and filtration device, are interesting to study further. The brewing process at high temperature has the potential to modulate the migration of a diverse array of compounds from the tea bag into the infusion. The complexity of chemical reactions and the variety of compound sources contribute to the presence of unknown compounds that migrate and are difficult to identify using conventional methods. Therefore, non-target analysis is employed to explore these migrating compounds for preliminary identification.

This preliminary study aimed to explore and identify compounds migrating from tea bags into brewed water, with a focus on migrant substances that pose potential health risks but are currently unregulated. To achieve this, a non-target analysis approach based on Liquid Chromatography-Quadrupole Time-of-Flight (LC-QtoF) was employed to detect hydrophilic and non-volatile compounds. The research workflow encompassed several stages, including sample determination, a food contact simulation, and subsequent clean-up using Solid Phase Extraction (SPE). A QtoF data reduction strategy was applied to enhance the selectivity and specificity of candidate mass identification, minimize the potential for false positives, and process complex data into more manageable information.

The analytical workflow of the non-target screening yielded the detection of 56 responses in negative polarity (ESI-) and 97 responses in positive polarity (ESI+), indicating the presence of 27 candidate compounds in ESI- and 46 candidate compounds in ESI+. Among the detected candidate compounds, two suspected compounds with potential health risk, glufosinate and 9-vinylanthracene, were identified, necessitating further confirmation through definitive testing methods to validate these preliminary findings. While comprehensive identification of all detected compounds remains a challenge, the non-target screening approach provides valuable initial insights into the profile of potentially migrating compounds.

Keywords: LC-QToF, migration, non-target analysis, screening, tea bags



- 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, tahun 2025
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 apapun tanpa izin IPB.



NON-TARGET SCREENING ZAT KONTAK PANGAN PADA KANTONG TEH CELUP BERBAHAN DASAR KERTAS

MUHAMMAD ASHARI YUSUF

Tesis

Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Magister Teknologi Pangan pada
Program Studi Magister Teknologi

**PROGRAM STUDI MAGISTER TEKNOLOGI PANGAN
FAKULTAS TEKNOLOGI PERTANIAN
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**



@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.

Tim Penguji pada Ujian Tesis:

1. Prof. Dr. Ir. Nuri Andarwulan, M.S



Judul Tesis : *Non-Target Screening* Zat Kontak Pangan pada Kantong Teh Celup Berbahan Dasar Kertas

Nama : Muhammad Ashari Yusuf

NIM : F2502211018

Disetujui oleh

Pembimbing 1:

Prof. Dr. Ir. Hanifah Nuryani Lioe, M.S



Pembimbing 2:

Prof. Dr. Nugraha Edhi Suyatma, S.T.P, DEA



Diketahui oleh

Ketua Program Studi:

Dr. Nur Wulandari, S.T.P, M.S

NIP. 19741003 200003 2 001



Dekan Fakultas Teknologi Pertanian:

Prof. Dr. Ir. Slamet Budijanto, M.Agr

NIP. 19610502 198603 1 002



Tanggal Ujian: 16 Juli 2025

Tanggal Lulus: 11 Agustus 2025



PRAKATA

Rasa syukur penulis panjatkan kepada Allah *subhanahu wa ta'ala* atas limpahan rahmat dan karunia-Nya sehingga karya ilmiah berjudul “*Non-Target Screening* Zat Kontak Pangan pada Kantong Teh Celup Berbahan Dasar Kertas” ini dapat diselesaikan. Penelitian ini dilatarbelakangi oleh inisiatif penulis dalam memanfaatkan teknologi yang tersedia di laboratorium, tempat penulis bekerja, serta keinginan untuk mengeksplorasi hal-hal baru. Proses penelitian yang berlangsung sejak Agustus 2022 hingga April 2025 ini merupakan perjalanan panjang yang penuh tantangan, tapi juga memberikan penulis sebuah wawasan lebih mendalam mengenai kompleksitas migrasi zat kontak pangan.

Penyelesaian karya ilmiah ini tidak terlepas dari dukungan dan bimbingan berbagai pihak. Penulis mengucapkan terimakasih yang sebesar-besarnya kepada Ibu Prof. Dr. Ir. Hanifah Nuryani Lioe, M.Si, selaku ketua Komisi Pembimbing, dan Bapak Prof. Dr. Nugraha Edhi Suyatma, STP, DEA, selaku anggota komisi pembimbing, atas arahan, bimbingan, dan bantuan yang diberikan selama proses penulisan tesis ini. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada Ibu Shenna Ayuningtyas, Manajer Divisi Research and Development SIG, atas izin penggunaan laboratorium SIG dalam penelitian ini. Selain itu, penulis berterima kasih kepada Bapak Insan Patria Tiastadia, Mahwan Pebrian, dan Suwiton atas saran teknis dan kesediaan berdiskusi selama penyelesaian penelitian ini. Tidak lupa, ucapan terima kasih disampaikan kepada rekan-rekan di laboratorium yang telah membantu dalam proses analisis penelitian.

Semoga karya ilmiah ini dapat memberikan kontribusi positif bagi pengembangan ilmu pengetahuan teknologi, khususnya di bidang keamanan pangan.

Bogor, April 2025

Muhammad Ashari Yusuf



DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
I PENDAHULUAN	
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	2
1.4 Manfaat	2
1.5 Ruang Lingkup	2
II TINJAUAN PUSTAKA	
2.1 Kemasan Pangan	4
2.2 Kantong Teh dan Produk Teh Celup	4
2.3 Migrasi Zat Kontak Pangan	5
2.4 Quadrupole Time-of-Flight Mass Spectrometry (QToF-MS)	8
2.5 Skrining Nontarget	9
III METODE	
3.1 Waktu dan Tempat Penelitian	10
3.2 Alat dan Bahan	10
3.3 Prosedur Penelitian	
3.3.1 Survei dan Penentuan Sampel Uji	10
3.3.2 Preparasi Porsi Uji	11
3.3.3 Pengukuran Gramatur	11
3.3.4 Simulasi Kontak Kantong Teh	11
3.3.5 <i>Clean-up</i> Larutan Ekstrak	12
3.3.6 Analisis Nontarget dengan LC-QToF	12
3.3.7 Analisis Data dan Alur Kerja Skrining	13
3.3.8 Identifikasi Senyawa <i>Unknown</i>	15
3.3.9 Analisis Statistik	16
IV HASIL DAN PEMBAHASAN	
4.1 Pencuplikan Sampel	17
4.2 Pengukuran Gramatur	18
4.3 Simulasi Kontak Kantong Teh Uji Pendahuluan Perlakuan <i>Clean-up</i> Alur Kerja Skrining Nontarget	19
4.4 Uji Pendahuluan Perlakuan <i>Clean-up</i>	20
4.5 Alur Kerja Skrining	22
4.6 Elusidasi	27
4.7 Evaluasi Identitas Tentatif	30

SIMPULAN DAN SARAN

5.1	Simpulan	39
5.2	Saran	39

DAFTAR PUSTAKA

RIWAYAT HIDUP	47
LAMPIRAN	48

DAFTAR TABEL

Persyaratan khusus bahan kontak pangan jenis kertas dan karton (Perba 2019)	6
Batas migrasi spesifik untuk beberapa konstituen atau kontaminan (EDQM 2021)	7
3. Data registrasi BPOM untuk produk teh tahun 2022	18
4. Gramatur kertas sampel kantong teh	19
5. Identitas tentatif senyawa <i>unknown</i> dan hipotesis sumbernya berdasarkan studi pendahuluan	32

DAFTAR GAMBAR

1. Klasifikasi NIAS (Geuke 2018)	8
2. Skema dari QToF <i>analyzer</i> , gabungan antara <i>triple quadrupole analyzer</i> (TQs) dengan <i>time-of-flight analyzer</i> (TOF) (Haag 2016)	9
3. Diagram alir umum identifikasi senyawa <i>unknown</i> (Peters <i>et al.</i> 2019)	14
4. Skema strategi memperoleh informasi struktural dalam elucidasi struktur molekular (De Vijlder <i>et al.</i> 2017)	16
5. Contoh potongan kertas kantong teh yang sudah dipreparasi untuk spesimen pengukuran gramatur	18
6. Kantong teh kertas yang sudah dipreparasi untuk porsi uji	20
7. <i>Cartridge</i> SPE HLB yang dipasangkan pada <i>vacuum manifold</i>	21
8. Kromatogram hasil uji pendahuluan, (a) sampel tanpa perlakuan <i>clean-up</i> dan (b) sampel dengan perlakuan <i>clean-up</i> SPE HLB	22
9. <i>Total ion chromatogram</i> (TIC) sampel dan blangko yang diperoleh dari set data ESI- dengan mode akuisisi MS ^E	23
10. <i>Total ion chromatogram</i> (TIC) sampel dan blangko yang diperoleh dari set data ESI+ dengan mode akuisisi MS ^E	24
<i>Binary Comparison</i> , (a) komparasi ulangan sampel simplo-duplo dan (b) komparasi perbedaan sampel-blanko proses	26
Spektrum massa (a) ion induk dan fragmen (dari prediksi <i>in silico</i>) untuk senyawa U-44, diduga sebagai 9-vinilantrasena dan (b) ion induk	31

senyawa U-50, diduga sebagai glufosinat

- | | | |
|-----|---|----|
| 13. | Hasil PCA set data ESI- dari analisis nontarget LC-QtoF pada seduhan kantong teh menggunakan R: (a) <i>loading plot</i> dan (b) <i>score plot</i> | 35 |
| 14. | Hasil PCA set data ESI+ dari analisis nontarget LC-QtoF pada seduhan kantong teh menggunakan R: (a) <i>loading plot</i> dan (b) <i>score plot</i> | 36 |

DAFTAR LAMPIRAN

- | | | |
|----|--|----|
| 1. | Daftar perpustakaan data eksternal yang digunakan dalam anotisasi dan elusidasi senyawa <i>unknown</i> | 49 |
| 2. | Identitas tentatif senyawa <i>unknown</i> unik pada mode polaritas negatif (ESI-) | 53 |
| 3. | Identitas tentatif senyawa <i>unknown</i> unik pada mode polaritas positif (ESI+) | 59 |
| 4. | Senyawa <i>unknown</i> (toleransi massa 2 mDa dan waktu retensi 0.1 menit) dengan identitas tentatif | 68 |
| 5. | Spektrum massa senyawa dengan identitas tentatif | 75 |