

KULIAH CHEMISTRY FOR COSMETIC SCIENCE

ANALISIS INSTRUMENTAL DALAM COSMETICS SCIENCE

Dosen Pengampu :

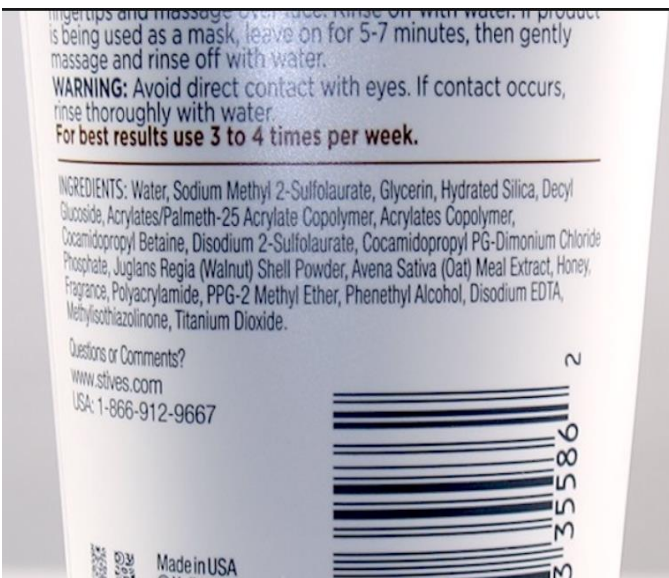
Dr. apt. Liliek Nurhidayati, M.Si.



Program Magister Farmasi (S2-Farmasi)
Fakultas Farmasi Universitas Pancasila
Genap 2024/2025

Peranan Kimia

- INCI Names: INCI (*International Nomenclature of Cosmetic Ingredients*)
→ merujuk pada komponen kimia yang terkandung dalam produk.
- Sistem terstandar untuk nama ingredient yang digunakan untuk produk kosmetika, memastikan konsistensi dan transparansi di seluruh pasar global
- Dikelola oleh: *Personal Care Products Council (PCPC)*
→ membantu konsumen, regulator, dan produsen mengidentifikasi bahan-bahan.
- https://www.personalcarecouncil.org/wp-content/uploads/2021/02/Conventions2021_v1.pdf



Kimia analisis merupakan metode yang digunakan untuk menentukan komponen kimia yang terkandung dalam produk kosmetika dan mengukur jumlah komponen tersebut.
→ untuk menunjukkan formulasi, kualitas, keamanan, dan efektivitas produk.

Peran Kimia Analisis

Memastikan keamanan dan kemurnian produk

Menjaga stabilitas dan kualitas produk

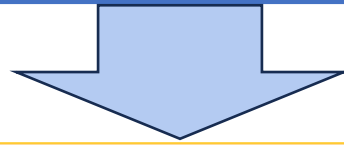
Pengembangan ingredient baru dan formulasinya

Memenuhi standar

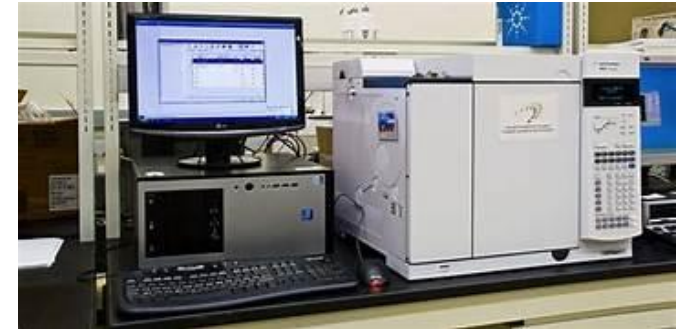
Mengatasi masalah konsumen

Mendukung riset dan pengembangan

Analisis Kimia merupakan tools yang tak tergantikan untuk memastikan keamanan, kualitas, dan efikasi kosmetika. Sebagai kebutuhan untuk produk kosmetika untuk tumbuh, produsen dan agen pembuat peraturan membutuhkan investasi teknik analisis terkini, dan teknologinya untuk memastikan produk kosmetika tetap aman, efektif, dan inovatif



Analisis Instrumental





ANALISIS INSTRUMENTAL

Memastikan
keamanan dan
kemurnian Produk

- Mengidentifikasi dan menetapkan komposisi
- Mendeteksi bahan terlarang dan kontaminan
- Kontrol kualitas

Menilai Kinerja
dan Kemanjuran
Produk

- Mengevaluasi sifat kulit
- Mengevaluasi kinerja produk kosmetika
- Menilai Perlindungan Matahari (SPF)

Teknik umum yang digunakan dalam analisis kosmetik

Kromatografi

- GC untuk menganalisis senyawa yang mudah menguap, seperti wewangian dan pelarut
- HPLC menganalisis senyawa non-volatil, seperti pengawet dan pigmen
- TLC Teknik cepat dan sederhana untuk memisahkan dan mengidentifikasi bahan

Spektroskopi

- Spektroskopi UV-Vis: → mengidentifikasi dan mengukur senyawa berdasarkan penyerapan ultraviolet dan cahaya tampak.
- Spektroskopi Inframerah (IR): → mengidentifikasi gugus fungsional dan mengkarakterisasi struktur kimia senyawa
- Spektrometri Massa (MS): → mengidentifikasi dan mengukur senyawa berdasarkan rasio massa-ke-muatan

Teknik lain

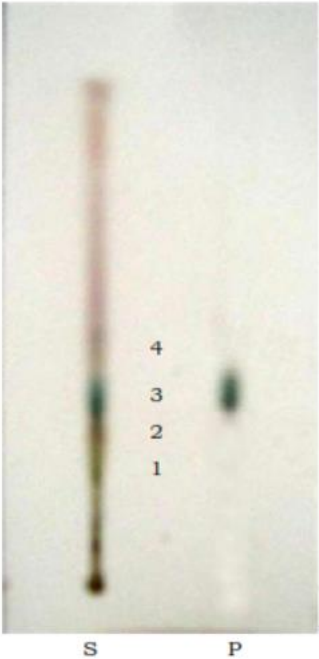
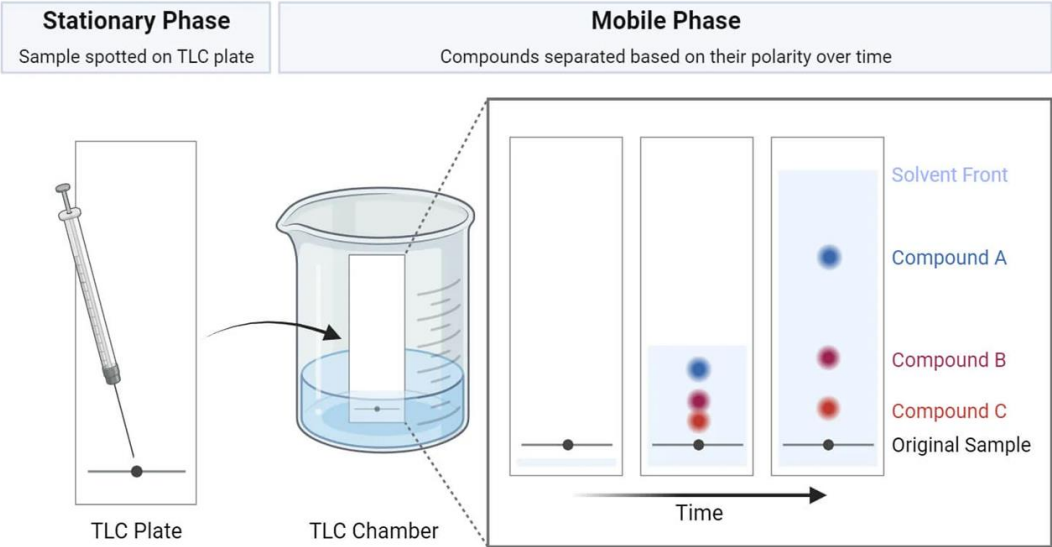
- Analisis Reologi dan Tekstur: → mengukur sifat fisik produk kosmetik, seperti viskositas dan tekstur.
- Mikroskopi: → memeriksa morfologi dan struktur bahan dan produk kosmetik.
- Analisis Termal: → mempelajari sifat termal bahan dan formulasi kosmetik.
- Analisis Elektrokimia: → mempelajari sifat elektrokimia bahan dan formulasi kosmetik.

LC-MS : Liquid Chromatography dengan detektor spektrometri massa

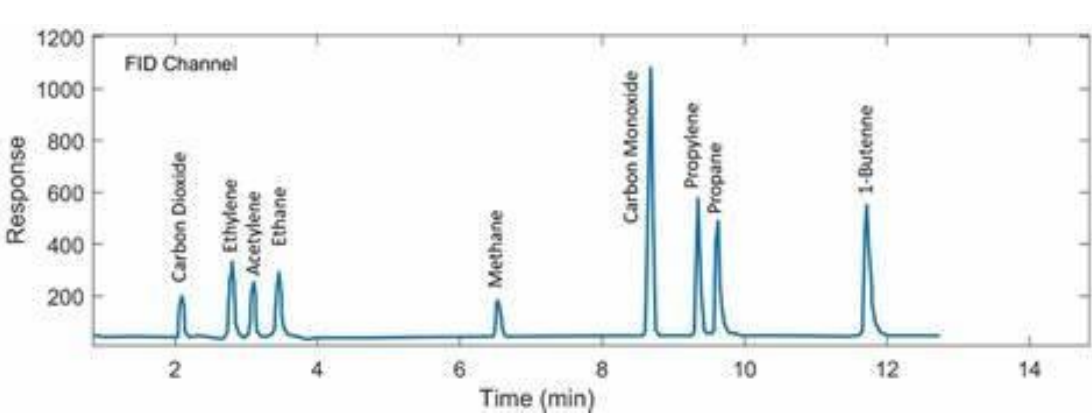
KROMATOGRAFI

- Kromatografi adalah teknik pemisahan secara fisika yang didasarkan atas perbedaan laju migrasi / distribusi analit di antara dua fase yaitu fase diam dan fase gerak
- Manfaat kromatografi adalah untuk mengatasi masalah pemisahan atau analisis campuran analit dengan komponen mayor maupun minor dalam matriks yang kompleks, misalnya: sampel bahan alam, sampel biomedik, minyak, analisis obat, makanan dll
- Output: Kromatogram

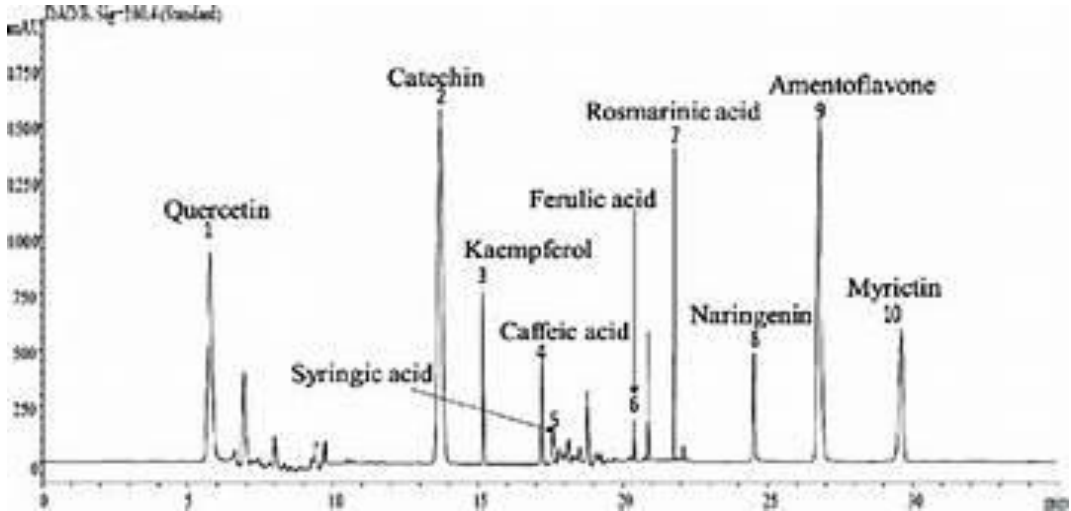
Thin Layer Chromatography



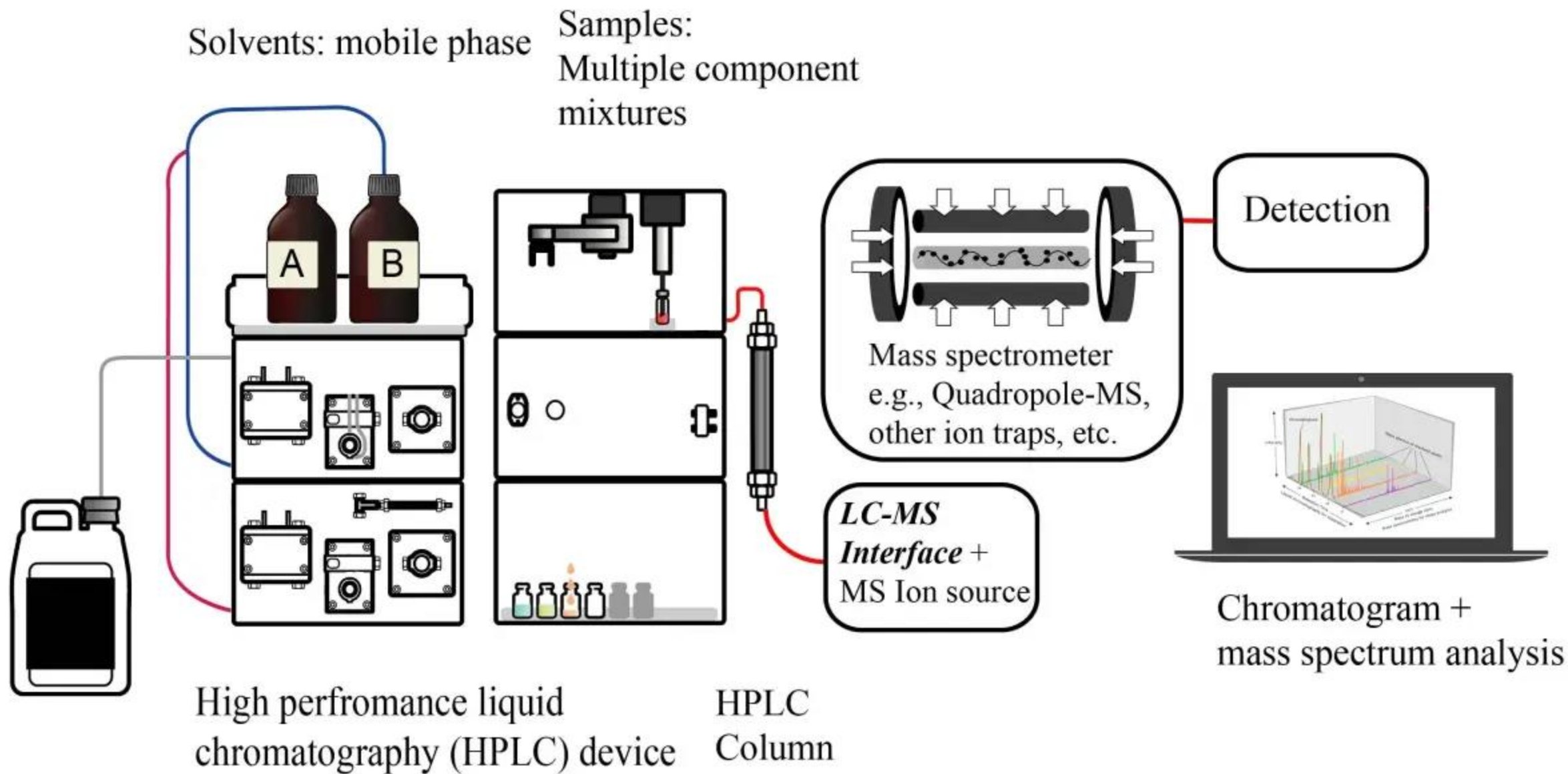
Keterangan:
S: Simplicia herba pegagan
P: Pemandang asiatikosida
 R_f pemandang asiatikosida 0,33
 R_f 1. 0,22
 R_f 2. 0,26
 R_f 3. 0,33
 R_f 4. 0,44

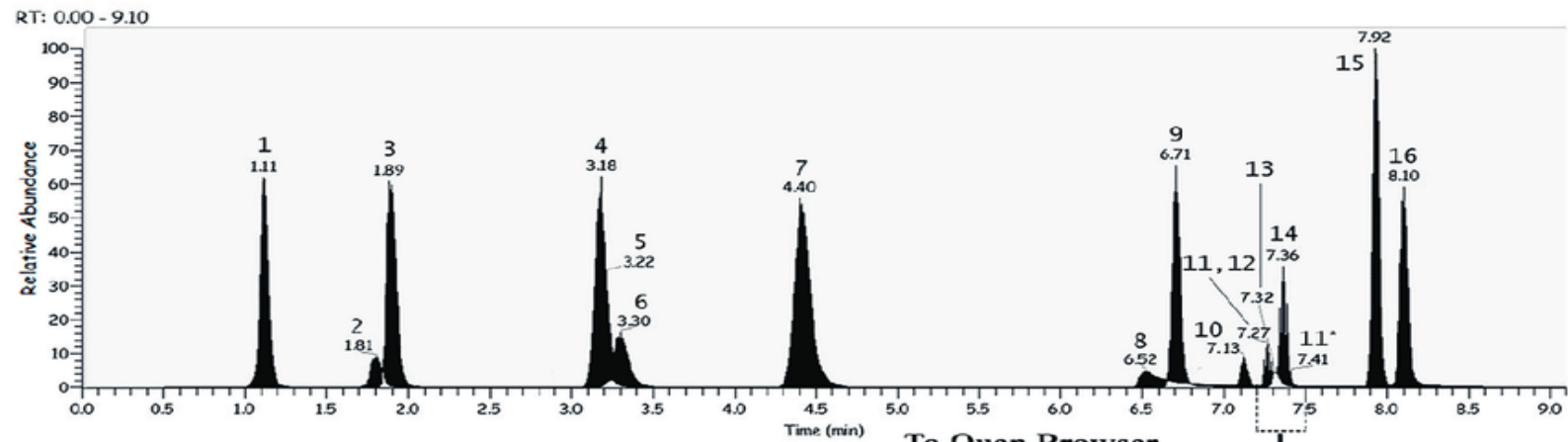


Kromatogram Gas

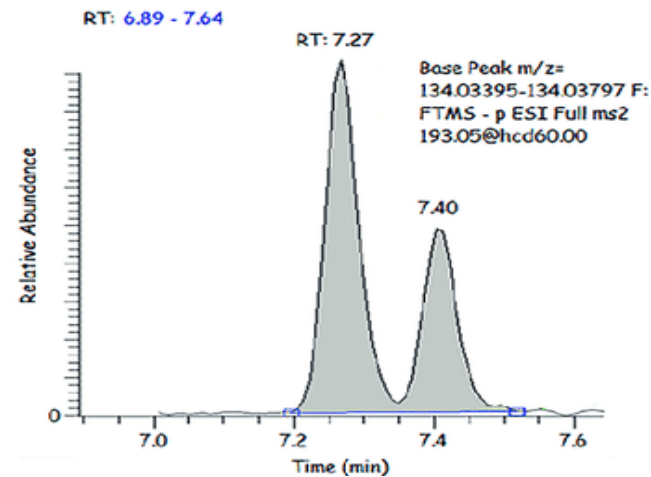


Kromatogram HPLC

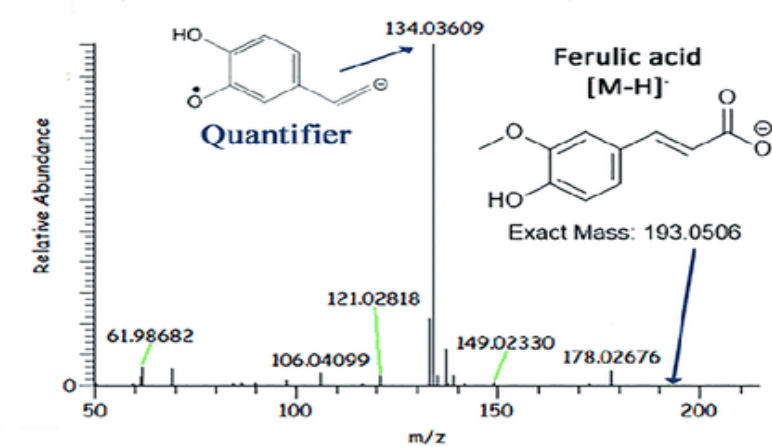




Compound 11 and 12: *cis* and *trans* ferulic acid



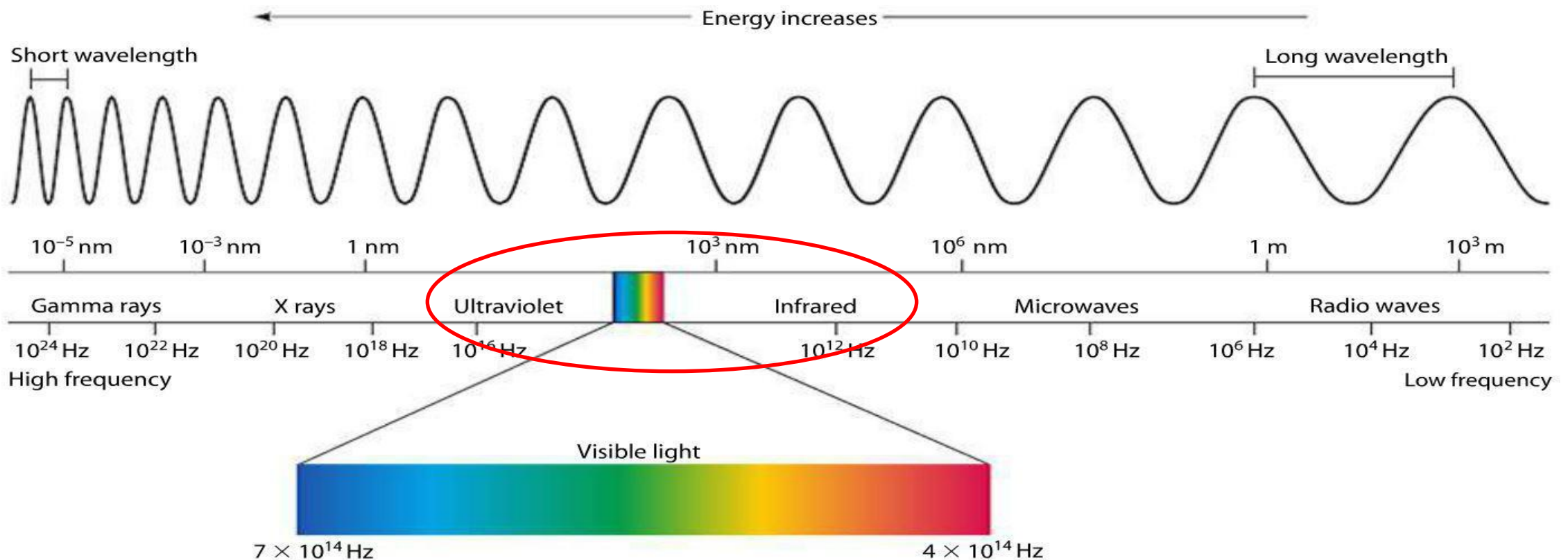
F: FTMS - p ESI Full ms2 193.05@hcd60.00 [50.00-215.00]



LC-MS chromatogram of the quantified compounds in parallel reaction monitoring (PRM) mode. *Ferulic acid (Compound 11) appears in two peaks due to *cis-trans* isomerism.

SPEKTROFOTOMETRI

- Spektrofotometri adalah metode analisis instrumental yang didasarkan atas pengukuran intensitas cahaya pada panjang gelombang yang hampir monokromatis, setelah berinteraksi dengan zat uji.
- Spektrum elektromagnetik



Kromofor, auksokrom, dan transisi elektronik

-KROMOFOR :

adalah gugus fungsional dari molekul yang mengabsorpsi cahaya dan mengandung satu atau lebih ikatan rangkap, contoh : benzen atau gugus kovalen tidak jenuh yang menyebabkan terjadinya serapan elektronik $\rightarrow$ -C=C , C=O , N=N , N=O

-AUKSOKROM :

adalah gugus fungsional yang tidak mampu menyerap cahaya, tapi dapat mengubah intensitas serapan, menggeser λ maks dari gugus kromofor suatu molekul, contoh :

-OH , -NH_2 , -Cl , -OCH_3 atau gugus fungsional jenuh yang terikat pada kromofor dan menyebabkan perubahan intensitas serapan maupun λ maks.

$\rightarrow$ gugus auksokrom sendiri tidak menyerap cahaya.

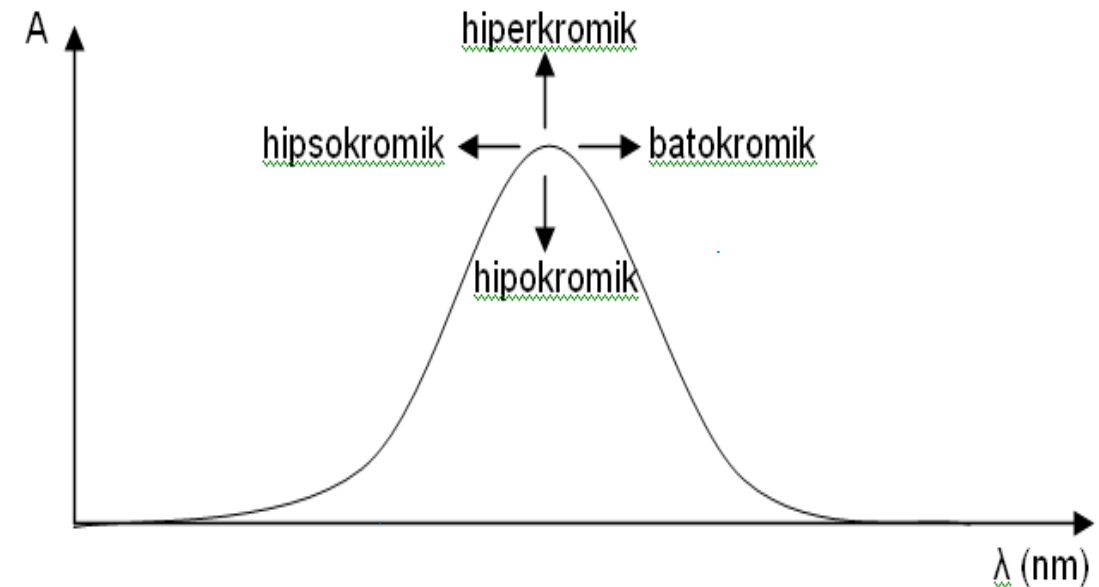
* Terikatnya gugusnya auksokrom oleh gugus kromofor $\rightarrow$ pergeseran pita absorpsi ke panjang gelombang yang lebih panjang disebut : Pergeseran merah / Batokromik (*red shift*)

*** Pergeseran batokromik juga terjadi pada dua ikatan rangkap terkonyugasi : $-C=C-C=C-$ butadien**



Empat efek kemungkinan perubahan pita absorpsi

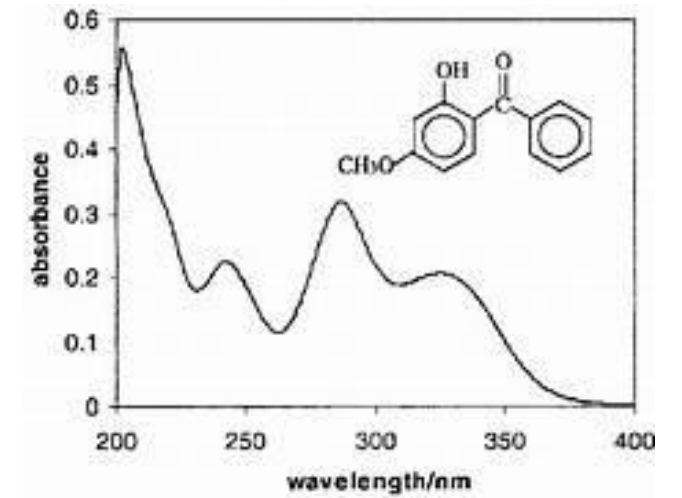
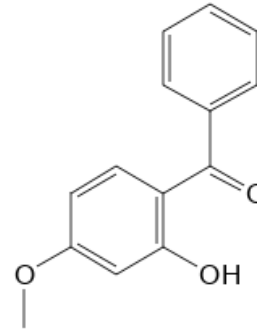
- 1. Pergeseran Batokromik (Red shift): pergeseran ke panjang gelombang yang lebih panjang /kearah frekuensi labih rendah
- 2. Pergeseran Hipsokromik (Blue shift): pergeseran ke panjang gelombang lebih pendek/ frekuensi lebih tinggi
- 3. Efek Hiperkromik : → kenaikan intensitas
- 4. Efek Hipokromi : → penurunan intensitas



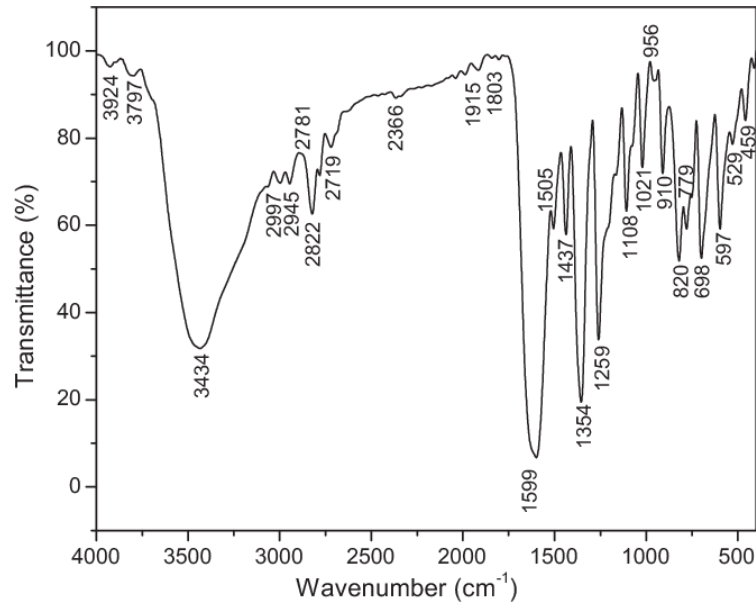
Gambar: Efek batokromik, hipsokromik, hiperkromik, dan hipokromik pada spektrum serapan ultraviolet – cahaya tampak

APLIKASI

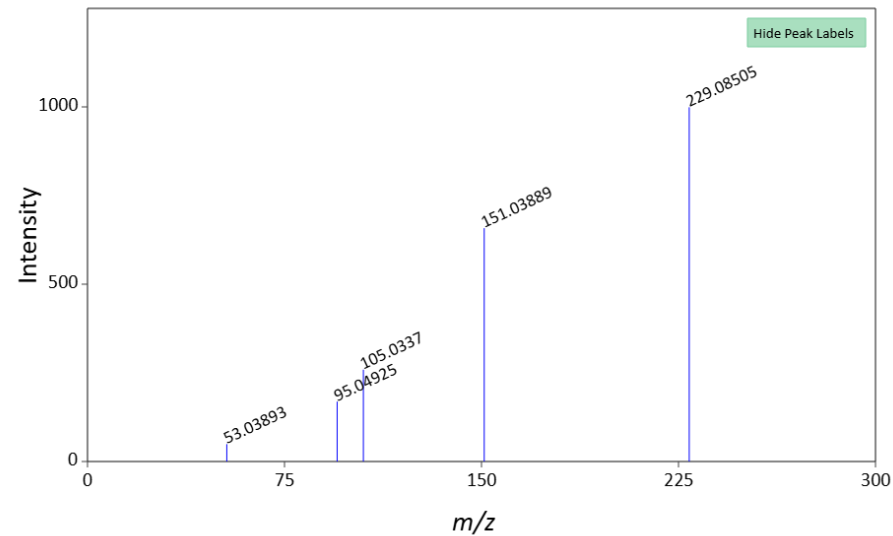
IDENTIFIKASI OXYBENZONE (2-Hydroxy-4-methoxybenzophenone)



Spektrum serapan

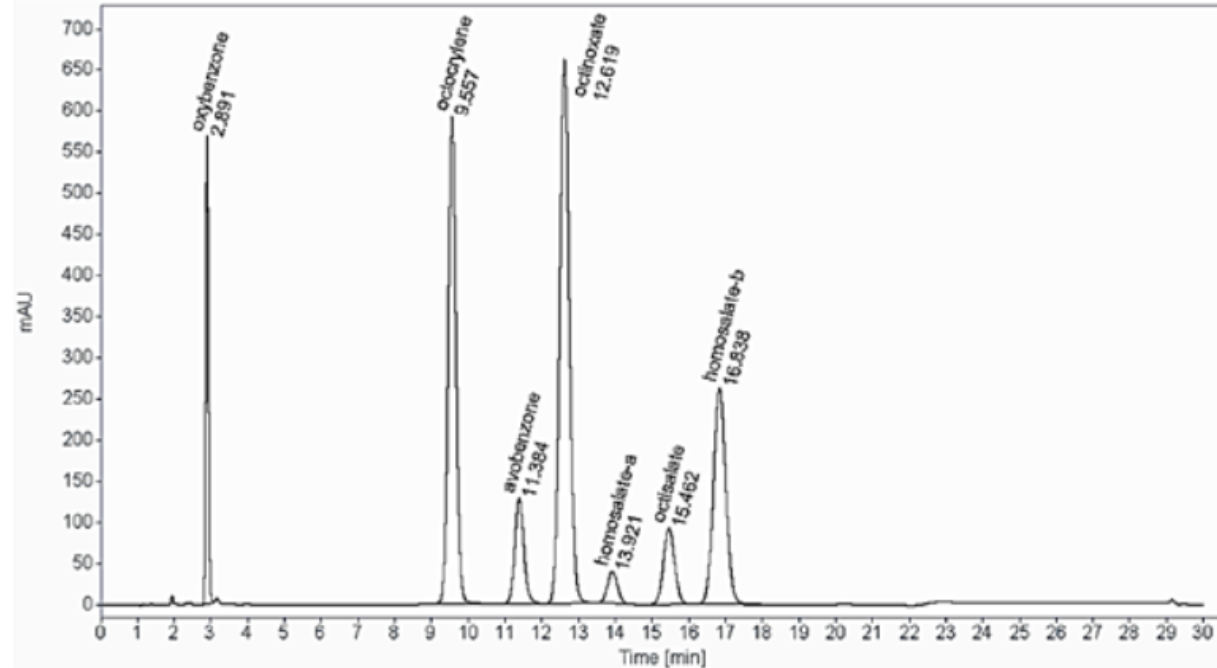


Spektrum FTIR



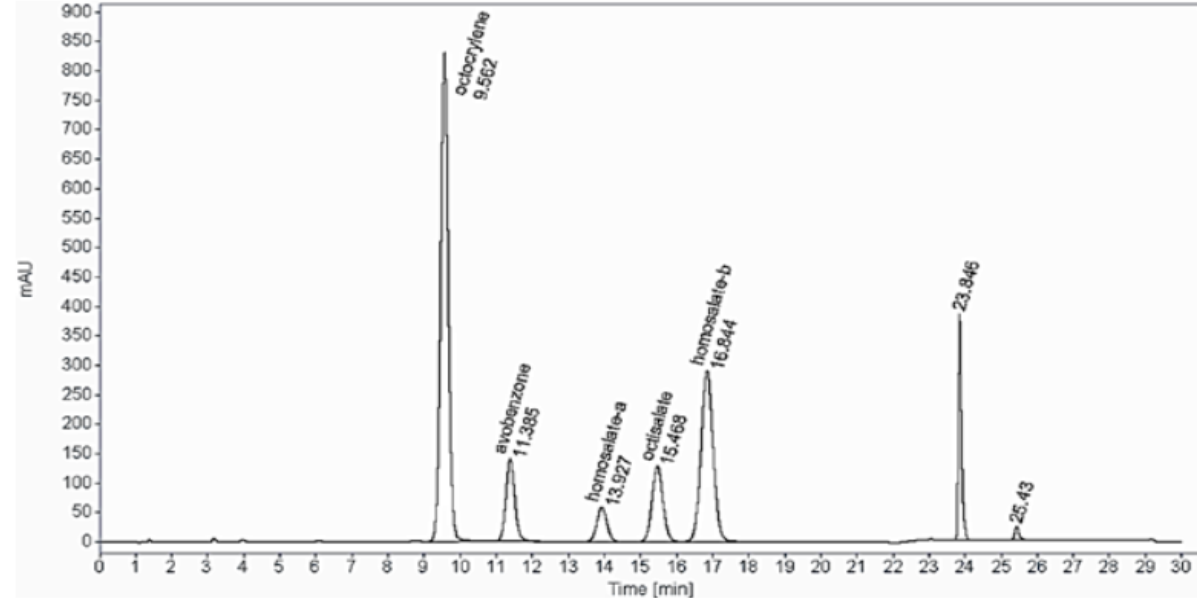
LC-ESI-QFT

Figure 1. HPLC-DAD Chromatogram Mixed Standard Solution



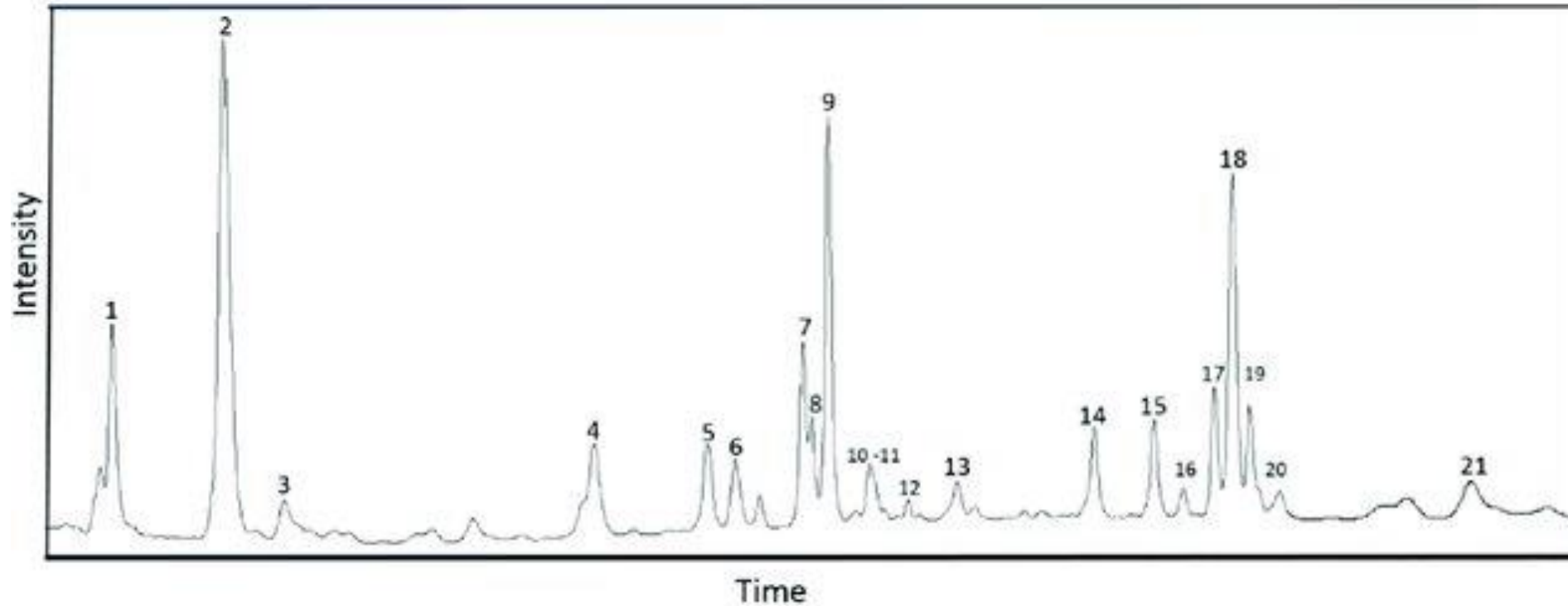
Identification and Quantitation of Oxybenzone, Octocrylene, Avobenzone, Octinoxate, Homosalate and Octisalate in Sunscreen Products by High Performance Liquid Chromatography-Diode Array Detection (HPLC-DAD)

Figure 2. HPLC-DAD Chromatogram Sample (Spray) Solution



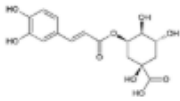
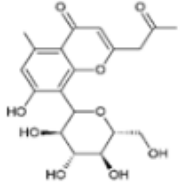
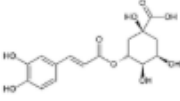
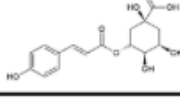
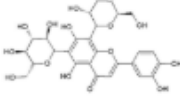
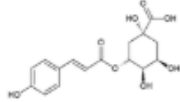
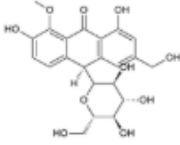
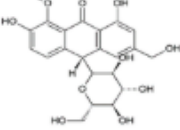
(Morgan L. Hudson-Davis, Gary R. Wong, Laurenee A. London-Adeoshun, Michael A. Staake, Yvonne Wu, Johnnie A. Walker, Esther Gamallo-Herrera, Jennifer Gogley- FDA)

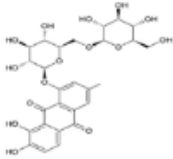
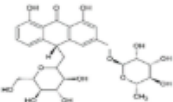
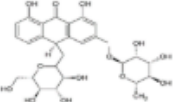
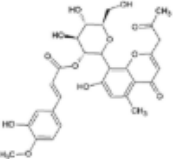
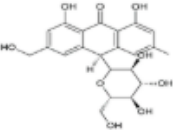
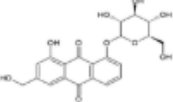
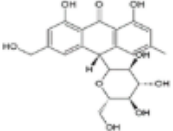
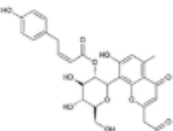
KARAKTERISASI EKSTRAK

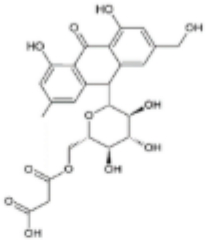
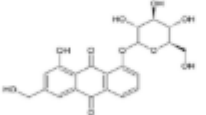
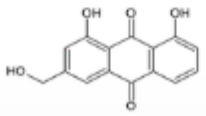


HPLC-MS/MS chromatogram of *Aloe vera* extract (Mbarga Manga Joseph Arsene et al, Fermentation, 2022)

Table 1. Phytochemical composition of *Aloe vera* extract.

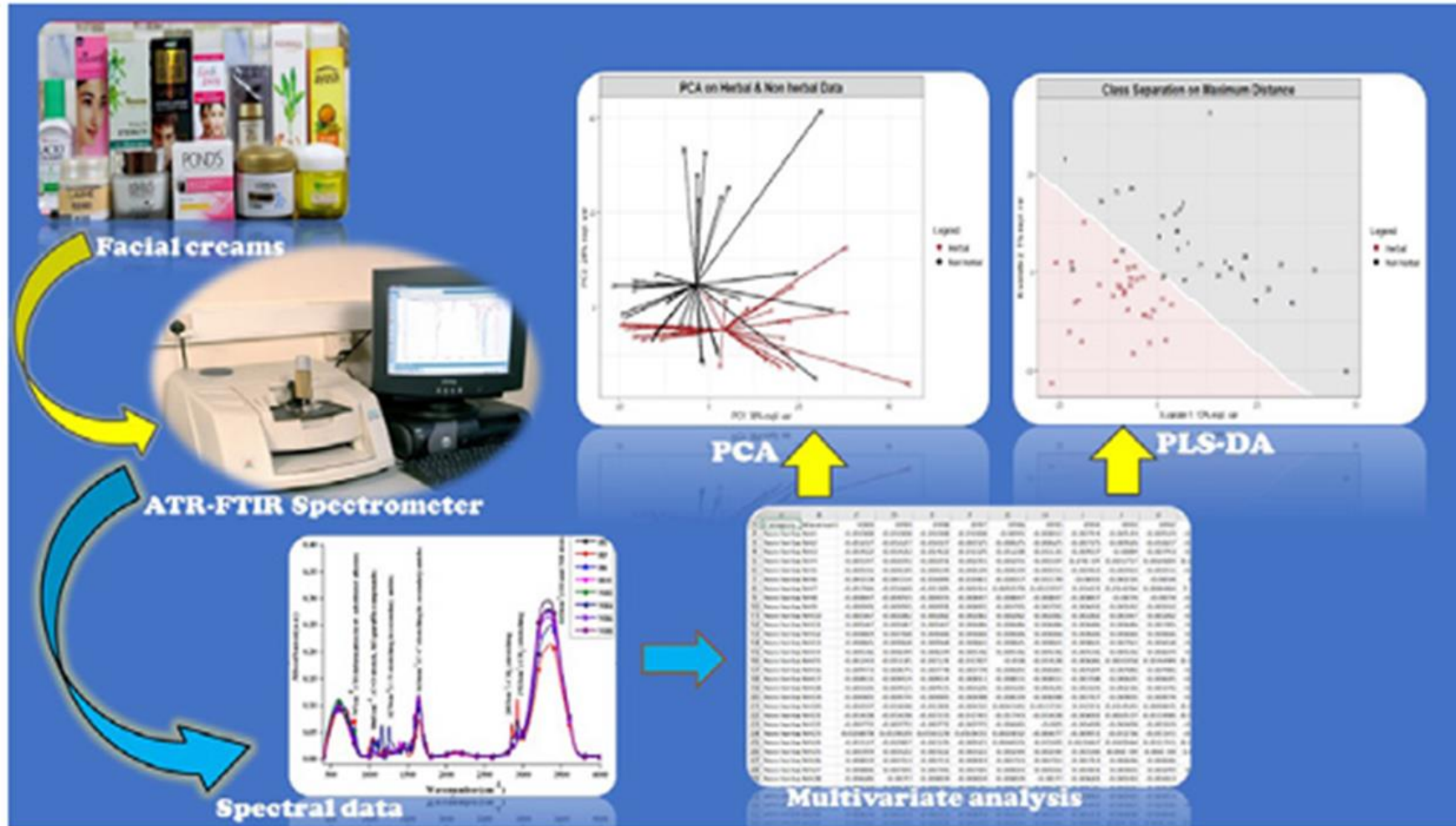
No.	Compound	Retention Time, min	Molecular Formula	Structural Formula	Molecular Mass, Da	m/z, Registration of Positive Ions	m/z, Registration of Negative Ions	Content, %	References
1	Trans-5-O-Caffeoylquinic acid	3.52	C ₁₆ H ₁₈ O ₉		354	355 [M + H] ⁺ , 377 [M + Na] ⁺ , 731 [2M + Na] ⁺	191 [C ₇ H ₁₁ O ₆] ⁻ , 353 [M-H] ⁻ , 707 [2M-H] ⁻	6.68 ± 0.45	[25,26,27]
2	Aloesin	5.34	C ₁₉ H ₂₂ O ₉		394	395 [M + H] ⁺ , 811 [2M + Na] ⁺	393 [M-H] ⁻	30.22 ± 0.43	[25,26,28,29]
3	Chlorogenic acid (3-O-Caffeoylquinic acid)	6.63	C ₁₆ H ₁₈ O ₉		354	355 [M + H] ⁺ , 377 [M + Na] ⁺ , 731 [2M + Na] ⁺	191 [C ₇ H ₁₁ O ₆] ⁻ , 353 [M-H] ⁻ , 707 [2M-H] ⁻	1.71 ± 0.05	[25,26]
4	Trans-5-p-Coumaroylquinic acid	10.75	C ₁₆ H ₁₈ O ₈		338	147 [C ₉ H ₇ O ₂] ⁺ , 339 [M + H] ⁺	337 [M-H] ⁻ , 675 [2M-H] ⁻	6.86 ± 0.39	[25,27]
5	Luteolin 6,8-di-C-glucoside	12.47	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₆		610	287 [C ₁₅ H ₁₁ O ₆] ⁺ , 449 [M-glu] ⁺ , 611 [M + H] ⁺ , 633 [M + Na] ⁺	285 [C ₁₅ H ₉ O ₆] ⁻ , 447 [M-glu] ⁻ , 609 [M-H] ⁻	3.34 ± 0.01	[24,25,26,27]
6	Cis-5-p-Coumaroylquinic acid	12.92	C ₁₆ H ₁₈ O ₈		338	147 [C ₉ H ₇ O ₂] ⁺ , 339 [M + H] ⁺	337 [M-H] ⁻ , 675 [2M-H] ⁻	2.83 ± 0.01	[25,27]
7	8-O-Methyl-7-hydroxyaloin B	13.88	C ₂₂ H ₂₄ O ₁₀		448	449 [M + H] ⁺ , 471 [M + Na] ⁺	447 [M-H] ⁻	1.03 ± 0.01	[25,28,30,31]
8	8-O-Methyl-7-hydroxyaloin A	13.91	C ₂₂ H ₂₄ O ₁₀		448	449 [M + H] ⁺ , 471 [M + Na] ⁺	447 [M-H] ⁻	7.40 ± 0.08	[25,28,30,31]

9	Aloe-emodine-diglucoside	14.29	$C_{27}H_{30}O_{15}$		594	595 [M + H] ⁺ , 617 [M + Na] ⁺	593 [M-H] ⁻	12.58 ± 0.34	[24,32]
10	Aloinoside B	14.72	$C_{27}H_{32}O_{13}$		564	565 [M + H] ⁺	563 [M-H] ⁻	1.81 ± 0.01	[24,28]
11	Unidentified component, MM = 716 Da	14.9	-	-	716	717 [M + H] ⁺	715 [M-H] ⁻	1.92 ± 0.08	
12	Aloinoside A	15.2	$C_{27}H_{32}O_{13}$		564	565 [M + H] ⁺	563 [M-H] ⁻	0.51 ± 0.01	[24,28,29]
13	Unidentified component, MM = 716 Da	16.18	-	-	716	717 [M + H] ⁺	715 [M-H] ⁻	1.25 ± 0.01	
14	2'-O-Feruloylooesin	18.23	$C_{29}H_{30}O_{12}$		570	571 [M + H] ⁺	569 [M-H] ⁻	3.65 ± 0.03	[24]
15	Aloin B	19.12	$C_{21}H_{22}O_9$		418	419 [M + H] ⁺ , 441 [M + Na] ⁺	297 [C ₁₇ H ₁₃ O ₅] ⁻ , 418 [M-H] ⁻	1.16 ± 0.02	[24,25,26,28,29,32]
16	Aloe-emodin-glucoside	19.55	$C_{27}H_{30}O_{15}$		432	271 [C ₁₅ H ₁₁ O ₅] ⁺ , 433 [M + H] ⁺	269 [C ₁₅ H ₉ O ₅] ⁻ , 431 [M-H] ⁻	0.80 ± 0.01	[24,26,29]
17	Aloin A	20.02	$C_{21}H_{22}O_9$		418	419 [M + H] ⁺ , 441 [M + Na] ⁺	297 [C ₁₇ H ₁₃ O ₅] ⁻ , 418 [M-H] ⁻	1.29 ± 0.07	[24,25,26,28,29,32]
18	2'-p-Methoxycoumaroylaloeresin B	20.28	$C_{29}H_{30}O_{11}$		554	555 [M + H] ⁺	553 [M-H] ⁻	9.64 ± 0.13	[26,29]

19	6'-Malonylnataloin	20.53	$C_{24}H_{24}O_{12}$		504	505 [M + H] ⁺ , 527 [M + Na] ⁺	459 [C ₂₃ H ₂₃ O ₁₀] ⁻ , 503 [M-H] ⁻	0.94 ± 0.04	[24,26]
20	Aloe-emodin-glucoside	20.66	$C_{21}H_{20}O_{10}$		432	271 [C ₁₅ H ₁₁ O ₅] ⁺ , 433 [M + H] ⁺	269 [C ₁₅ H ₉ O ₅] ⁻ , 431 [M-H] ⁻	3.89 ± 0.15	[26,29]
21	Aloe-emodin	24.57	$C_{15}H_{10}O_5$		270	271 [C ₁₅ H ₁₁ O ₅] ⁺	269 [C ₁₅ H ₉ O ₅] ⁻	0.82 ± 0.01	[25,28,29]

KOMBINASI FTIR - KEMOMETRIK

A rapid and non-destructive ATR-FTIR spectroscopy method supported by chemometrics for discriminating between facial creams and the classification into herbal and non-herbal brands



Contoh aplikasi

Mengidentifikasi dan Menetapkan kuantitas Bahan:

Metode instrumental dapat digunakan untuk menentukan konsentrasi bahan aktif, pengawet, dan aditif lainnya dalam produk kosmetik.

Mendeteksi Kotoran dan Kontaminan:

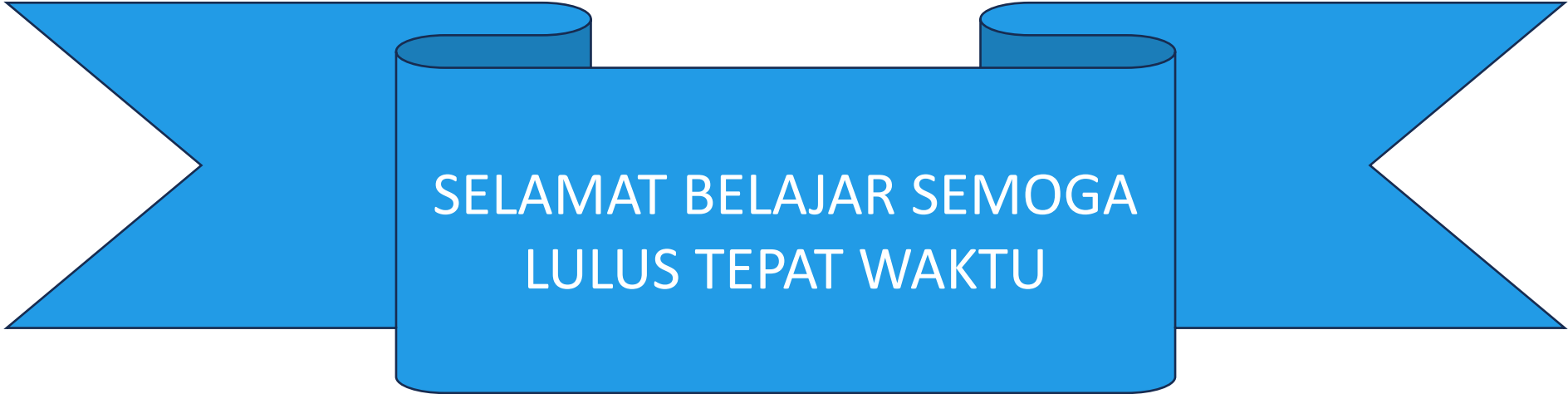
Teknik-teknik ini dapat membantu mengidentifikasi dan mengukur kontaminan potensial, seperti logam berat atau mikroorganisme dalam produk kosmetik.

Menilai Stabilitas Produk:

Metode instrumental dapat digunakan untuk mempelajari stabilitas produk kosmetik dari waktu ke waktu dan dalam kondisi penyimpanan yang berbeda.

Mengevaluasi Kinerja Produk:

Metode instrumental dapat digunakan untuk menilai kinerja produk kosmetik, seperti kemampuannya untuk menghidrasi kulit, melindungi dari radiasi UV, atau memperbaiki tekstur



SELAMAT BELAJAR SEMOGA
LULUS TEPAT WAKTU