

**ANALISIS SIDIK JARI DAUN PEPAYA (*Carica Papaya L*) MENGGUNAKAN METODE
SPEKTROKOPI FT-IR DAN KEMOMETRIK**

Laporan Tugas Akhir

FITRIANI

11161081



**Universitas Bhakti Kencana
Fakultas Farmasi
Program Strata I Farmasi
Bandung
2020**

**ANALISIS SIDIK JARI DAUN PEPAYA (Carica Papaya L) MENGGUNAKAN METODE
SPEKTROSKOPI FT-IR DAN KEMOMETRIK**

LEMBAR PENGESAHAN

Laporan Tugas Akhir

Diajukan untuk memenuhi syarat kelulusan Program Strata I Farmasi

FITRIANI

11161081

Bandung, 30 Juli 2020

Menyetujui,

Pembimbing Utama,

Pembimbing Serta,



(Dr. Apt Fauzan Zein Mutaqqin, M. Si)



(Anne Yuliantini, M. Si)

ABSTRAK

ANALISIS SIDIK JARI DAUN PEPAYA (*Carica Papaya L*) MENGGUNAKAN METODE SPEKTROKOPI FT-IR DAN KEMOMETRIK

Oleh :

FITRIANI

11161081

Daun pepaya merupakan bahan baku obat di Indonesia yang digunakan sebagai obat tradisional. Kurangnya kontrol kualitas standar dari obat herbal mengakibatkan banyaknya kecurangan. Analisis sidik jari merupakan metode yang dapat dimanfaatkan untuk evaluasi dan multikomponen dari bahan baku obat herbal. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan pola sidik jari daun pepaya menggunakan metode ftir yang dikombinasikan dengan PCA, kemudian memvalidasi hasil analisis PCA dari Sidik jari daun pepaya. Tahapan penelitian meliputi ekstraksi simplisia baku menggunakan metode maserasi dengan pelarut etanol 96% di ukur menggunakan FT-IR dengan panjang gelombang 4000-650 cm^{-1} dan resolusi 4 cm^{-1} dengan menggunakan aplikasi *MicroLab Expert*. Hasil pengukuran dianalisis secara kemometrik menggunakan metode PCA menghasilkan data berupa *scor* dan nilai *loadings*.

Kata Kunci: Analisis sidik jari, Kemometrik, Daun pepaya, *Principal Component Analysis* (PCA)

ABSTRACT

FINGERPRINT ANALYSIS OF PEPAYA LEAVES (*Carica Papaya L*) USING FT-IR AND CHEMOMETRIC SPECTROSCOPY METHODS

By :

FITRIANI

11161081

Papaya leaves are a medicinal raw material in Indonesia which is used as traditional medicine. Lack of standard quality control of herbal medicines results in much fraud. Fingerprint analysis is a method that can be used to evaluate and control the quality of multi-component herbal medicinal raw materials. This study aims to determine the papaya leaf fingerprint pattern using the ftir method combined with PCA, then validate the results of the PCA analysis from papaya leaf fingerprints. The research stages included the extraction of standard simplicia using the maceration method with 96% ethanol solvent measured using FT-IR with a wavelength of 4000-650 cm⁻¹ and a resolution of 4 cm⁻¹ using the MicroLab Expert application. The measurement results were analyzed chemically using the PCA method resulting in data in the form of scores and loadings values.

Keywords: *Fingerprint Analysis, Zing Chemometrics, Papaya leaf, Principal Component Analysis (PCA).*

KATA PENGANTAR

Puji syukur alhamdulillah penulis panjatkan kehadiran Allah SWT atas berkat, dan rahmatnya penyusunan skripsi yang berjudul **“Fingerprint Analysis Daun Pepaya (*Carica Papaya L*) Menggunakan Metode Spektroskopi Ft-Ir Dan Kemometrik”** dapat diselesaikan dengan baik. Maka dari itu, pada kesempatan ini penulis ingin mengucapkan banyak terima kasih kepada:

1. Keluarga, yaitu orang tua ayah, mamah dan suami yang sangat penulis sayangi dan cintai. Terima kasih atas dukungan doa dan semangat yang telah diberikan baik moral maupun material dalam penyusunan laporan tugas akhir ini.
2. Bapak Dr. Fauzan Zein Muttaqin, M.Si., Apt selaku pembimbing utama yang senantiasa membimbing dan memberikan arahan selama penyusunan laporan tugas akhir ini.
3. Ibu Anne Yuliantini, M.Si., selaku pembimbing serta atas segala saran, waktu bimbingan, pengarahan, dan dorongan kepada penulis selama penelitian berlangsung sehingga laporan tugas akhir ini dapat terselesaikan.
4. Semua teman-teman kelas 4FA2 dan Angkatan 2016. Terima kasih atas dukungan doa dan semangat yang telah diberikan membuat penulis lebih terdorong menyelesaikan laporan tugas akhir ini.
5. Semua pihak yang telah membantu yang tidak dapat disebutkan satu persatu.

Akhirnya, dengan segala kerendahan hati penulis menyadari bahwa masih banyak terdapat kekurangan-kekurangan, sehingga penulis mengharapkan adanya saran dan kritik yang bersifat membangun demi kesempurnaan dari tugas akhir ini.

Bandung, Agustus 2020

Penulis

DAFTAR ISI

ABSTRAK	i
ABSTRACT	ii
KATA PENGANTAR	iii
DAFTAR ISI	iv
DAFTAR TABEL	v
DAFTAR GAMBAR	vi
DAFTAR LAMPIRAN	viii
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG	ix
BAB I. PENDAHULUAN	1
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA	3
BAB III. METODOLOGI PENELITIAN	14
BAB IV. PROSEDUR PENELITIAN	15
BAB V. HASIL DAN PEMBAHASAN	16
BAB VI. SIMPULAN DAN SARAN	22
DAFTAR PUSTAKA	30
LAMPIRAN	34

DAFTAR TABEL

Tabel II.1 Daerah Spektrum inframerah.....	10
Tabel VI.8 Nilai <i>Eigen Value</i>	41

DAFTAR GAMBAR

Gambar II.1 Visualisasi Daun Pepaya	3
Gambar II.3 Skema Proses Perubahan Sinyal Pada Sistem Peralatan FTIR	6
Gambar VI.2 Proses Maserasi Simplisia Daun Pepaya.....	18
Gambar VII.3 Ekstrak Kental Daun Pepaya	18
Gambar VI.3.1 Pola Spektrum FTIR Daun Pepaya Kota Bandung	19
Gambar VI.5.2 Pola Spektrum FTIR Daun Pepaya Karawang.....	20
Gambar VI.5.3 Pola Spektrum FTIR Daun Pepaya Purworejo	20
Gambar VI.5.4 Pola Spektrum FTIR Daun Pepaya Blitar	21
Gambar VI.5.5 Pola Spektrum FTIR Daun Pepaya Bengkulu.....	21
Gambar VI.5.6 Pola Spektrum FTIR Daun Pepaya NTT	22
Gambar VI.7 Hasil Score Plot Dan Loading PCA Ekstrak Daun Pepaya Kota Bandung PC-1 Terhadap PC-2	24
Gambar VI.7 Hasil Score Plot Dan Loading PCA Ekstrak Daun Pepaya Karawang PC-1 Terhadap PC-2	24
Gambar VI.7 Hasil Score Plot Dan Loading PCA Ekstrak Daun Pepaya Purworejo PC-1 1 Terhadap PC-2	25
Gambar VI.7 Hasil Score Plot Dan Loading PCA Ekstrak Daun Pepaya Kota Blitar PC-1 1 Terhadap PC-2	26
Gambar VI.7 Hasil Score Plot Dan Loading PCA Ekstrak Daun Pepaya Bengkulu PC-1 Terhadap PC-2	27
Gambar VI.7 Hasil Score Plot Dan Loading PCA Ekstrak Daun Pepaya NTT PC-1 Terhadap PC-2	27
Gambar VI. 13 Gabungan Hasil Score Plot Dan Loading PCA Ekstrak Daun Pepaya Dari Enam Daerah Bandung, Karawang, Purworejo, Blitar, Bengkulu, Dan NTT PC-1 Terhadap PC-2.....	28

Gambar VI. 14 Overlay Ekstrak Daun Pepaya Dari Enam Daerah Bandung, Karawang,
Purworejo, Blitar, Bengkulu, Dan Nusa Tenggara Timur..... 29

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1	Hasil Determinasi Tanaman Daun Pepaya	35
Lampiran 2	Perhitungan Rendemen Ekstrak Daun Pepaya	36
Lampiran 3	Data nilai X dan Y	38
Lampiran 4	Data nilai X dan Y	39
Lampiran 5	Data nilai X dan Y	40

DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG

SINGKATAN

MAKNA

PCA

Principal Component Analysis (PCA)

FTIR

Fourier Transform Infrared

BAB I. PENDAHULUAN

1.1. Latar belakang

Indonesia merupakan negara yang kaya akan sumber tanaman obat yang secara turun temurun telah digunakan sebagai ramuan obat tradisional. Masyarakat sekarang lebih memilih untuk back to nature walaupun perkembangan ilmu pengetahuan dan teknologi semakin modern, karena mereka berpikir obat tradisional lebih aman untuk kesehatan dan mengurangi efek samping yang merugikan. (Krisyanella, 2009).

Obat tradisional adalah ramuan dari berbagai macam jenis dari bagian tanaman yang mempunyai khasiat untuk menyembuhkan berbagai macam penyakit yang ada dalam tubuh, dan sudah dilakukan sejak zaman dahulu secara turun temurun (Siswoyo, 2008).

Berdasarkan hasil penelitian daun pepaya (*Carica papaya* L.) memiliki aktivitas farmakologi sebagai antelmintik, antimalaria, antibakteri, menghambat pertumbuhan sel kanker, dan antiinflamasi (Owoyele et al., 2008; Rehena, 2010; Bora, 2012; Nirosha dan Mangalanayaki, 2013).

Pola spektrum sidik jari dilakukan untuk kontrol kualitas bahan baku obat herbal, pola spektrum sidik jari dapat memberikan informasi yang lebih akurat dan realistis. Pemilihan metode ini untuk penjaminan kualitas bahan baku yang saat ini difokuskan pada komponen kimia yang menyebabkan adanya aktivitas tertentu dari tumbuhan obat. Digunakan serapan FTIR karena memiliki beberapa keunggulan yaitu, waktu analisis yang cepat, sensitifitas yang tinggi, akurasi dan reproduibilitas frekuensi yang sangat baik, serta dilengkapi dengan perangkat lunak kemometrik sebagai alat canggih untuk analisis kualitatif dan kuantitatif (Rohman, 2012).

Spektroskopi FT-IR dapat mengukur secara cepat sampel serta mampu menganalisis beberapa komponen secara serentak. Penggunaan FT-IR dalam analisis tumbuhan masih terbatas karena matriks dan spektrum yang dihasilkan cukup kompleks. Analisis sidik jari FT-IR yang dihasilkan merupakan informasi data yang sangat kompleks sehingga dapat menggambarkan secara menyeluruh karakteristik kimia suatu sampel. Perubahan yang terjadi pada posisi pita dan intensitasnya dalam spektrum FT-IR akan berhubungan dengan perubahan komposisi kimia dalam suatu sampel. Oleh karena itu, spektrum FT-IR dapat digunakan untuk membedakan suatu tumbuhan yang satu dengan

yang lainnya walupun komposisi senyawa kimianya belum diketahui secara pasti (Sun dkk., 2010)

Metode analisis ini dikembangkan dengan memanfaatkan informasi pola sidik jari yang bersifat khas, sebagai variabel yang mempengaruhi penampakan kimiawi sampel seperti aktivitas hayati dan konsentrasi (World dkk., 2001). Dari latar belakang tersebut, maka dilakukan penelitian mengenai analisis fingerprint pada daun pepaya dengan menggunakan Spektrofotometr Fourier Transform Infrared (FTIR) dan kemometrik.

1.2 . Rumusan masalah

1. Apakah metode ftir yang dikombinasikan dengan PCA mampu menganalisis sidik jari daun pepaya?
2. Bagaimana pola sidik jari daun pepaya yang diukur dengan ftir yang dikombinasikan dengan PCA ?

1.3. Tujuan dan manfaat penelitian

1. Menentukan pola sidik jari daun pepaya menggunakan metode ftir yang dikombinasikan dengan PCA
2. Memvalidasi hasil analisis PCA dari Sidik jari daun pepaya

1.4. Tempat dan waktu Penelitian

Lokasi penelitian di Laboratorium Universitas Bhakti Kencana Bandung, pada tanggal 05 Januari 2020

BAB II. TINJAUAN PUSTAKA

II.1 Tanaman Pepaya (*Carica papaya L.*)

Dalam sistematika (taksonomi) tumbuh-tumbuhan, tanaman pepaya (*Carica papaya L.*) sebagai berikut : (Yuniarti, 2008)



Gambar II. 1 visualisasi daun pepaya

- Kingdom : Plantae (tumbuh-tumbuhan)
Divisi : Spermatophyta (tumbuhan berbiji)
Sub-divisi : Angiospermae (biji tertutup)
Kelas : Dicotyledonae (biji berkeping dua)
Ordo : Caricales
Famili : Caricaceae
Genus : Carica
Species : Carica papaya L.

II.1.1 Morfologi Tumbuhan

Tanaman pepaya (*Carica papaya L.*) termasuk dalam famili *caricaceae* telah banyak digunakan dalam pengobatan tradisional. Pepaya (*Carica papaya L.*), adalah tumbuhan yang berasal dari Meksiko dan bagian Amerika Selatan, dan kini menyebar luas dan banyak ditanam di seluruh daerah tropis untuk diambil buahnya, daunnya, dan bunganya. *Carica papaya L.* adalah satu-satunya jenis dalam genus *Carica*. Nama pepaya dalam bahasa Indonesia diambil dari bahasa Belanda, "papaja", yang pada gilirannya juga mengambil dari nama bahasa Arawak, "papaya". Dalam bahasa Jawa pepaya disebut "katès" dan dalam bahasa Sunda "gedang". (Kalie, 2008).

Pada penelitian ini bahan baku yang digunakan yaitu pada bagian daunnya. Daun pepaya (*Carica papaya L.*) merupakan tumbuhan yang umum tiap tumbuhan mempunyai sejumlah besar daun. (Tyas, 2008) mengatakan bahwa daun pepaya merupakan daun tunggal, berukuran besar, menjari, bergerigi dan juga mempunyai bagian-bagian tangkai daun dan helaian daun (lamina). Daun pepaya mempunyai bangun bulat atau bundar, ujung daun yang lancip, tangkai daun panjang dan berongga. Permukaan daun licin sedikit mengkilat. Dilihat dari susunan tulang daunnya, daun pepaya termasuk daun-daun yang bertulang menjari.

II.1.2 Aktivitas Daun Pepaya

Kandungan kimia daun pepaya memiliki zat yang baik bagi tubuh. Daun pepaya (*Carica papaya L.*) mengandung alkaloid karpainin, karpain, pseudokarpain, vitamin C dan E, kolin, dan karposid. Daun pepaya mengandung suatu glukosinolat yang disebut benzil isotiosianat. Daun pepaya juga mengandung mineral seperti kalium, kalsium, magnesium, tembaga, zat besi, dan zink. Sementara itu, rasa pahit daun pepaya disebabkan oleh kandungan alkaloid karpain yang sangat efektif digunakan untuk menurunkan demam, mereduksi tekanan darah, dan membunuh mikroba seperti amuba. (Milind dan Gurdita, 2011)

Aktivitas farmakologi dari daun pepaya sebagai antelmintik, antimalaria, antibakteri, menghambat pertumbuhan sel kanker, dan antiinflamasi (Owoyele et al., 2008; Rehena, 2010; Bora, 2012; Nirosha dan Mangalanayaki, 2013).

II.2 Metode Ekstraksi

Maserasi

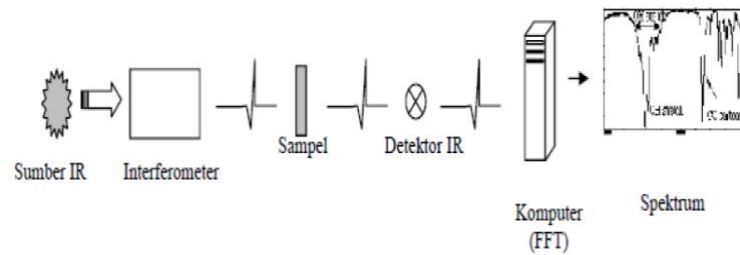
Tujuan dari ekstraksi maserasi dalam penelitian ini untuk proses pemekatan dan meningkatkan kadar dari suatu bahan baku simplisia atau bahan segar untuk menghasilkan sinyal yang lebih baik pada spektrum inframerah.. Jika menggunakan bahan baku serbuk maka hasil puncaknya kurang baik.

Maserasi merupakan metode sederhana yang paling banyak digunakan. Cara ini sesuai, baik untuk skala kecil maupun skala industry. Metode ini dilakukan dengan memasukkan bahan baku tanaman dan pelarut yang sesuai ke dalam wadah yang tertutup rapat pada suhu kamar. Proses ekstraksi dihentikan ketika tercapai kesetimbangan antara konsentrasi senyawa dalam pelarut dengan konsentrasi dalam sel tanaman. Setelah proses ekstraksi, pelarut dipisahkan dari sampel dengan penyaringan. Kerugian utama dari metode maserasi ini adalah memakan banyak waktu, pelarut yang digunakan cukup banyak. Selain itu, beberapa senyawa mungkin saja sulit diekstraksi pada suhu kamar. Namun di sisi lain, metode maserasi dapat menghindari rusaknya senyawa-senyawa yang bersifat termolabil. Pemilihan pelarut yang sesuai merupakan faktor penting dalam proses ekstraksi ini. Pelarut yang digunakan adalah pelarut yang dapat menarik sebagian besar metabolit sekunder yang terdapat dalam simplisia. (Agoes, 2007).

II.3 Spektrofotometri *Fourier Transform Infrared* (FTIR).

Spektrofotometri inframerah tertransformasi *fourier* (*Fourier Transformed Infrared*, FTIR) analisis dari spektrum individu yang memungkinkan untuk mengidentifikasi senyawa kimia dalam sampel. Saat sinar inframerah melewati sampel, masing-masing kelompok fungsional bergema di dalamnya frekuensi penyerapan karakteristik spektra. FTIR dapat mengukur secara cepat gugus fungsi tanpa merusak dan mampu menganalisis beberapa komponen secara serentak. Penggunaan FTIR dalam analisis tumbuhan masih terbatas karena matriks dan spektrum yang dihasilkan cukup kompleks. Dukungan kemometrik memperluas potensi spektroskopi FTIR sebagai metode alternatif untuk menganalisis komponen tumbuhan. Metode analisis ini dikembangkan dengan memanfaatkan informasi pola sidik jari yang bersifat khas, sebagai variabel yang mempengaruhi penampakan kimiawi contoh seperti aktivitas hayati, konsentrasi, dan polarisabilitas. (Wang et al., 2014).

FTIR merupakan salah satu instrumen yang menggunakan prinsip spektroskopi. Spektroskopi adalah spektroskopi inframerah yang dilengkapi dengan transformasi fourier untuk deteksi dan analisis hasil spektrumnya. Spektroskopi inframerah berguna untuk identifikasi suatu senyawa organik karena spektrumnya yang sangat kompleks yang terdiri dari banyak puncak-puncak (Chusnul, 2011).



Gambar II. 2 Skema Proses perubahan sinyal pada sistem peralatan FTIR.(Suseno dan Firdausi, 2008).

II.3.1 Cara kerja Spektrofotometri FTIR

Cara kerja spektroskopi inframerah adalah dengan cara sampel di *scan*, yang berarti sinar inframerah akan diteruskan ke sampel, gelombang yang diteruskan oleh sampel akan ditangkap oleh detektor yang terhubung ke komputer, yang akan memberikan gambaran spektrum sampel yang diuji. Struktur kimia dan bentuk ikatan molekul serta gugus fungsi tertentu Sampel yang diuji menjadi dasar bentuk spektrum yang akan diperoleh dari hasil analisis. Dengan demikian alat ini dapat digunakan untuk pengujian secara kualitatif dan kuantitatif.

Para ahli kimia telah menetapkan ribuan spektrum inframerah dan menentukan panjang gelombang absorpsi masing-masing gugus fungsi. Vibrasi suatu gugus spesifik pada bilangan gelombang tertentu (Hart *et al.*, 2003)..

Spektroskopi inframerah disebut juga sebagai spektroskopi vibrasi, spektroskopi inframerah merupakan teknik analisis yang cepat, sensitif, tidak merusak, serta tidak memerlukan preparasi sampel yang rumit. Spektrofotometer Fourier Transform Infra Red (FTIR) mempunyai sistem optik yang sama dengan ultraviolet dan sinar tampak. Perbedaan utama yaitu terletak pada sumber energi dan sel. Sinar inframerah

mempunyai energi yang lebih rendah dari sinar ultraviolet, sehingga tebal sel yang dipakai pada spektrofotometer lebih tipis dari pada spektrofotometer lainnya.

Spektrum FTIR dapat digunakan sebagai alat potensial yang memungkinkan seseorang untuk membuat diferensiasi pertama diantara lemak dan minyak karena kemampuan sebagai teknik sidik jari (Rohman *et al.*, 2012). Mekanisme yang terjadi pada spektroskopi FTIR yaitu sinar datang dari sumber sinar yang kemudian diteruskan, lalu akan dipecah oleh pemecah sinar menjadi dua bagian sinar yang saling tegak lurus. Sinar tersebut kemudian dipantulkan oleh dua cermin yakni cermin diam dan cermin bergerak. Kemudian sinar hasil pantulan dari kedua cermin tersebut akan dipantulkan kembali menuju pemecah sinar untuk saling berinteraksi. Dari pemecah sinar, sebagian sinar akan diarahkan menuju cuplikan dan sebagian diarahkan menuju sumber. Gerakan cermin yang maju mundur akan menyebabkan sinar pada detektor berfluktuasi. Sinar akan saling menguatkan ketika kedua cermin memiliki jarak yang berbeda. Fluktuasi sinar yang sampai pada detektor akan menghasilkan sinyal pada detektor yang terdapat pada interferometer (Tahid, 1994).

Pada spektroskopi inframerah, molekul-molekul dieksitasikan ke energi yang lebih tinggi pada saat molekul-molekul ini menyerap radiasi inframerah (IR). Absorpsi radiasi IR merupakan suatu proses kuantifikasi, yang berarti bahwa hanya frekuensi (energi) tertentu dari radiasi IR yang dapat diserap oleh suatu molekul (Pavia *et al.*, 2001).

Berdasarkan jurnal yang ditulis oleh Rakesh *et al* (2014), sinar inframerah dibagi atas tiga daerah, yakni:

Tabel II. 1 Daerah Spektrum IR (Rakesh et al, 2014).

Daerah	Panjang Gelombang (μm)	Bilangan Gelombang (cm^{-1})	Frekuensi, Hz	Aplikasi
Dekat	0,78-2,5	12800-4000	$3,8 \times 10^{14}$ – $1,2 \times 10^{14}$	Analisis kuantitatif

Pertengahan	2,5-50	4000-200	$1,2 \times 10^{14} - 6 \times 10^{12}$	Identifikasi gugus fungsi, analisis kuantitatif, deteksi senyawa pengganggu
Jauh	50-100	200-10	$6 \times 10^{12} - 3 \times 10^{11}$	Analisis struktur molekul
Kebanyakan Digunakan	2,5-15	4000-670	$1,2 \times 10^{14} - 2 \times 10^{13}$	Sebagian besar analisis kuantitatif

Dari tabel II.1, dapat diketahui bahwa daerah panjang gelombang yang digunakan pada alat spektrofotometer inframerah adalah pada daerah inframerah pertengahan, yaitu pada panjang gelombang 2,5 – 50 μm atau pada bilangan gelombang 4.000 – 200 cm^{-1} . Spektrum IR merupakan spektrum yang bersifat: (1) spesifik terhadap suatu molekul; (2) sidik jari; (3) kuantitatif; (4) non destruktif; sehingga masih memungkinkan untuk dilakukan analisis lebih lanjut; (5) bersifat universal dalam pengambilan sampelnya (Rohman *et al.*, 2014).

II.4 Analisis Sidik Jari

Analisis sidik jari dapat membantu dalam proses identifikasi dan autentikasi spesies tanaman untuk kendali mutunya (Borges *et al.*, 2007). Senyawa kimia yang dikandung oleh tanaman obat dapat ditampilkan dalam sidik jari kromatografi sehingga karakteristik kimia tanaman obat tersebut dapat digambarkan secara menyeluruh (Liang *et al.*, 2004).

Analisis sidik jari merupakan analisis yang dapat dimanfaatkan untuk evaluasi dan kontrol kualitas multikomponen dari tanaman obat. Komponen kimia dalam tanaman

obat sangat bergantung pada musim panen, sumber tanaman, proses pengeringan, dan faktor lainnya, sehingga perlu dilakukan penentuan komponen kimia dalam tanaman obat untuk menjamin kepercayaan dalam penelitian klinis dan farmakologis, mengetahui bioaktivitas dan kemungkinan efek samping dari komponen aktif, dan untuk meningkatkan kontrol kualitas produk (Liang dkk., 2004).

Analisis ini memberikan informasi komponen kimia dalam bentuk spektrogram, kromatogram, dan grafik lainnya yang diperoleh dari teknik analitik untuk menentukan identitas, kualitas, dan keaslian tanaman obat (Borges dkk., 2007). Sidik jari mengacu pada profil yang dapat menggambarkan sifat analit tertentu pada bahan baku, produk setengah jadi dan produk jadi setelah pengolahan yang tepat dan diperoleh dengan teknik analisis tertentu. Penelitian sidik jari dari obatobatan herbal merupakan penelitian interdisipliner dan komprehensif, yang didasarkan pada komposisi kimia dari produk herbal. (Zhang, 2015).

Analisis sidik jari (*fingerprint analysis*) telah diterima secara luas sebagai model evaluasi kontrol kualitas suatu bahan baku, karena perbedaan kondisi suatu negara, tradisi, pola pikir maka penelitian dan metode fingerprint menjadi beragam di berbagai negara. Sidik jari umumnya dibagi menjadi sidik jari kimia dan pola biologi. Sidik jari kimia digunakan untuk menganalisis kandungan kimia di tanaman herbal, terdiri dari sidik jari kromatografi dan sidik jari spektral. Sidik jari kromatografi terdiri dari kromatografi lapis tipis (KLT), kromatografi berkinerja tinggi cair (HPLC), kromatografi gas (GC), elektroforesis kapiler (CE), sedangkan sidik jari spektral, misalnya UV, IR, MS, X-ray dan sebagainya. Sidik jari biologis terutama mengacu pada genomik sidik jari, karena komposisi genetik adalah unik untuk setiap individu, metode DNA untuk identifikasi produk herbal kurang dipengaruhi oleh usia, kondisi fisiologis, faktor lingkungan, panen, penyimpanan, metode pengolahan, dan deteksi adulterant (Zhang, 2015).

II. 5 Analisis Data Kemometrik

II.5.1 Kemometrik

Pola spektrum inframerah yang kompleks menyebabkan interpretasi secara langsung dan visual menjadi tidak mudah. Untuk lebih memudahkannya diperlukan bantuan teknik kemometrik seperti analisis multivariat (Gad dkk., 2012).

Kemometrik merupakan suatu disiplin ilmu kimia yang menggunakan metoda matematika dan statistika yang digunakan untuk mengolah, mengevaluasi dan menginterpretasikan sejumlah besar data dan memilih desain analisis untuk memilih prosedur dan hasil eksperimen yang paling baik serta untuk memberikan informasi yang relafan. Memudahkan dalam interpretasi data dengan kemometrik menggunakan software komputer sehingga didapat hasil analisis yang tepat, mudah dan cepat (Otto, 2007). Teknik kombinasi spektrum FT-IR dengan metode kemometrik telah banyak digunakan, salah satunya seperti kontrol kualitas bahan baku obat, dan deteksi pemalsuan atau diskriminasi bahan baku pangan atau obat herbal (Liu dkk., 2008).

Metode kemometrik digunakan untuk menemukan korelasi statistika yang telah diketahui dari sampel. Dukungan kemometrik memperluas potensi spektroskopi FT-IR sebagai metode alternatif untuk menganalisis komponen tumbuhan. Penggunaan data spektrum pada kisaran tertentu dapat meningkatkan hasil analisis kemometrik (Vazquez dkk., 2000). Metode analisis ini dikembangkan dengan memanfaatkan informasi pola sidik jari yang bersifat khas, sebagai variabel yang mempengaruhi penampakan kimiawi sampel seperti aktivitas hayati dan konsentrasi (Wold dkk., 2001).

Metode kemometrik ini dapat menganalisis data berupa hasil derivatisasi data spektrum. Selanjutnya data spektrum yang diperoleh akan diolah dan disederhanakan oleh *Principal Component analysis* (PCA), yang selanjutnya dapat dianalisis secara kuantitatif dengan *Multiple Linear Regresion* (MLR), *Principle Component Regresion* (PCR), *Partial Least Square* (PLS), dan *Artificial Neural Network* (ANN) (Miller, 2005).

Metode kemometrik yang digunakan pada analisis ini adalah PCA (*Principal Component Analysis*). PCA merupakan interpretasi data yang dilakukan dengan reduksi data, dimana jumlah variable dalam suatu matriks dikurangi untuk menghasilkan variable baru dengan tetap mempertahankan informasi yang dimiliki oleh

data. Variable baru yang dihasilkan berupa skor atau komponen utama (Rohman, 2012).

II.6 Validasi Metode Analisis PCA

Validasi metode yang digunakan dalam analisis kemometrik ini adalah *Principal Component Analysis* (PCA) sebuah teknik statistik yang digunakan untuk periksa keterkaitan antara seperangkat variabel secara berurutan untuk mengidentifikasi struktur dasar dari variabel-variabel tersebut juga disebut analisis faktor. Tujuan utama PCA yaitu untuk mengeliminasi komponen utama, sehingga dapat meminimalkan efek dari kesalahan pengukuran, komponen utama merupakan komponen yang dapat mengekstrak informasi sebanyak-banyaknya dari suatu data. (Miller, 2005)

Pada PCA ada dua komponen yaitu statistik dan Matriks Algebra (nilai eigen dan faktor eigen adalah matriks dasar dari PCA).

Statistik meliputi data sebagai berikut :

A. Standar Deviasi (SD)

1. Varians, yaitu ukuran lain dari penyebaran data dalam kumpulan data. Sebenarnya hampir identik dengan standar deviasi.
2. Kovarian adalah ukuran, kovariansi selalu diukur antara 2 dimensi.
3. Kovarian matriks.

B. Matriks Algebra, bagian ini berfungsi untuk memberikan latar belakang aljabar matriks yang dibutuhkan di PCA (nilai eigen dan factor eigen).

1. Eigen factor

Eigen factor adalah komponen utama (dari komponen PCA-komponen prafipal) mencerminkan varians umum dan varians yang unik dan dapat dilihat sebagai pendekatan yang berfokus pada varian yang berusaha mereproduksi varians variabel total dengan semua komponen dan untuk mereproduksi korelas. PCA jauh lebih umum dari pada PFA, dan biasanya menggunakan "faktor" secara bergantian dengan

"komponen". Komponen utama adalah kombinasi linier dari variabel asli yang dibobot oleh kontribusinya untuk menjelaskan varians dalam dimensi ortogonal tertentu.

2. Eigen Value

Eigen value disebut juga ciri khas akar, nilai eigen untuk faktor tertentu mengukur varians dalam semua variabel yang diketahui oleh faktor tersebut. Rasio nilai eigen adalah rasio faktor jelas terhadap faktor-faktor yang berkenaan dengan variabel. Jika sebuah faktor memiliki nilai rendah, maka sedikit kontribusi terhadap varians varians dan dapat diabaikan sebagai faktor yang lebih penting. Nilai eigen mengukur jumlah variasi dalam total sampel yang dicatat oleh masing-masing faktor. Nilai dasar eigen faktor dihitung sebagai jumlah pemuatan faktor kuadrat untuk semua variabel. Perhatikan bahwa nilai eigen yang terkait dengan solusi yang tidak dilepas dan diputar akan berbeda, meskipun jumlahnya akan sama (Smith, 2002).

Eigen factors dan Eigen values

Misalkan C adalah matriks $n \times n$ dengan I sebagai matriks identitasnya. Nilai eigen dari C didefinisikan sebagai akar dari persamaan :

$$\text{Determinan } (C - \alpha I) = |(C - \alpha I)| = 0 \quad (1)$$

Persamaan diatas disebut persamaan polinomial karakteristik C dan memiliki n akar. Terkait dengan masing-masing nilai eigen adalah seperangkat koordinat yang menentukan arah sumbu utama yang terkait. Ini disebut sebagai vektor eigen (x) dan dihitung sebagai:

$$Cx = \alpha x \quad (2)$$

Jadi, besaran nilai eigen menggambarkan panjang dan vektor eigen menggambarkan arah sumbu utama (Gupta, dkk., 2013)

Jika terdapat suatu matriks A berukuran $n \times n$ dan vector tak nol x berukuran, $x \in \mathbb{R}^n$, maka dapat dituliskan :

$$Ax = \alpha x \quad (3)$$

Keterangan

Ax : faktor berukuran $n \times n$

α : skalar riil yang memenuhi persamaan, disebut nilai eigen (karakteristik).

X : faktor eigen