

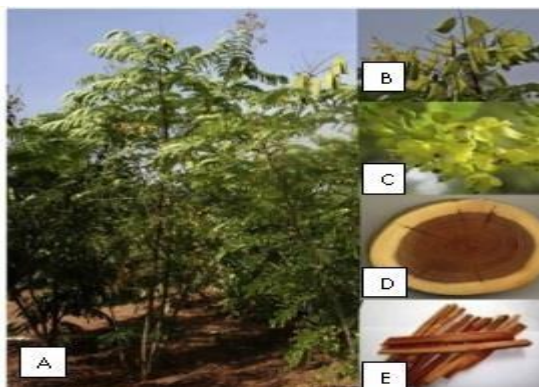
BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Tanaman Secang (*Caesalpinia sappan* L.)

Tanaman secang pertama kali ditemukan oleh Kimichi, seorang berkebangsaan Spanyol, di wilayah Brazil. Oleh karena itu, tanaman ini dikenal dengan nama ‘kayu Brazil’ atau *Brazil wood*. Meski demikian, ada pula pendapat yang menyebutkan bahwa tanaman ini berasal dari India dan kemudian menyebar melalui Burma, Thailand, Indochina, hingga Malaysia, lalu meluas ke Indonesia, Filipina, Sri Lanka, Taiwan, dan Hawaii. Saat ini, tanaman ini tumbuh subur dan tersebar luas di berbagai wilayah seperti Eropa, Amerika, dan Asia. Secang yang memiliki nama ilmiah *Caesalpinia sappan* (sinonim: *Biancheae*) dikenal dengan berbagai nama lokal, seperti ‘sibukao’ di Filipina, ‘teingnyet’ di Burma, ‘sbaeng’ di Kamboja, ‘fang deeng’ di Laos, dan ‘faang’ di Thailand (R. Sari & Suhartati, 2016).

Tanaman secang (*Caesalpinia sappan* L.) yang berupa pohon kecil hingga sedang dengan diameter batang hingga 14 cm. Kulit kayu secang memiliki tonjolan yang berbeda dan banyak duri berwarna coklat ke abu-abuan serta ranting dan kuncup muda yang berbulu kecoklatan yang digambarkan pada Gambar 1. Pembungaan dapat terjadi setelah 1 tahun pertumbuhan dan biasanya pada musim hujan serta berbuah 6 bulan kemudian (Orwa *et al.*, 2009).



Gambar 1. Bagian tanaman secang. (a) Tanaman secang, (b) Buah secang, (c) Bunga secang, (d) Kayu secang, (e) Bagian dalam batang kayu secang (Nirmal *et al.*, 2015)

Klasifikasi secang adalah (Sari & Suhartati, 2016):

Regnum : Plantae

Divisi	: Spermatophyta
Sub divisi	: Angiospermae
Kelas	: Dicotyledoneae
Ordo	: Rosales
Famili	: Caesalpiniaceae
Genus	: Caesalpinia
Spesies	: <i>Caesalpinia sappan</i> L.

2.2 Kandungan Kimia dan Farmakologi Kayu Secang (*Caesalpinia sappan* L.)

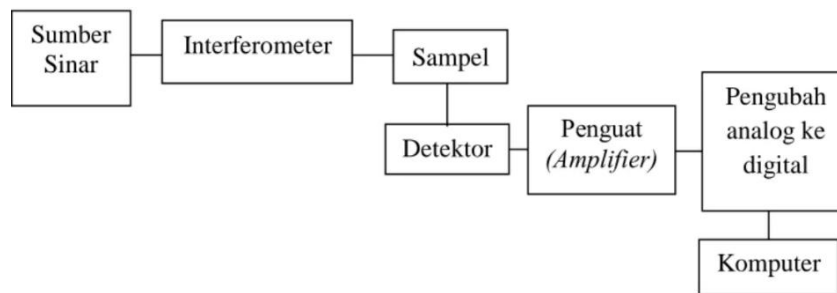
Kayu secang diketahui mengandung berbagai komponen kimia, di antaranya asam galat, tanin, resin, resorsin, brazilin, brazilein, d-phellandrene, ocimene, serta minyak atsiri (Sari & Suhartati, 2016). Hasil analisis fitokimia menunjukkan bahwa tanaman ini mengandung senyawa triterpenoid, flavonoid, fenolik, dan steroid (A. N. Sari *et al.*, 2022). Senyawa fenolik ditemukan melimpah pada bagian kayu, sedangkan kandungan alkaloid lebih dominan pada batang dan daun. Adapun buah secang dilaporkan mengandung sekitar 40% tanin (A. N. Sari *et al.*, 2022). Flavonoid, salah satu jenis senyawa fenolik yang ditemukan dalam kayu secang, diketahui memiliki aktivitas antioksidan. Senyawa ini berperan dalam menangkal radikal bebas yang dapat menurunkan fungsi sistem imun dan memicu proses oksidasi pada protein maupun lipid, yang merupakan mekanisme utama dalam perkembangan penyakit degenerative (Pradana & Wulandari, 2019; Nomer *et al.*, 2019). Aktivitas antioksidan kayu secang dibuktikan oleh penelitian Mu'nisa *et al.* (2017) menunjukkan nilai IC_{50} sebesar 0,047 $\mu\text{g/ml}$ menggunakan metode DPPH. Nilai ini tergolong sangat kuat karena berada jauh di bawah ambang batas 50 $\mu\text{g/mL}$. Semakin rendah nilai IC_{50} , maka semakin tinggi kemampuan antioksidan dalam menangkap 50% radikal bebas. Kandungan antioksidan ini juga berperan dalam menjaga kadar nitrit oksida (NO) tetap optimal dalam tubuh, yang dapat membantu menurunkan tekanan darah dan menunjukkan efek antihipertensi (Sunusi & Santi, 2023).

2.3 Spektrofotometri *Fourier Transform Infrared* (FTIR)

Spektroskopi inframerah tergolong sebagai jenis spektroskopi vibrasional karena melibatkan analisis getaran molekul. Teknik ini sangat populer dan luas digunakan untuk menganalisis berbagai macam sampel, mulai dari produk farmasi, bahan pangan, cairan biologis, hingga sampel lingkungan. Metode ini sering disebut spektrofotometri karena memanfaatkan cahaya atau foton dalam pengukurannya. Instrumen yang digunakan untuk membaca spektra disebut spektrofotometer (Rohman, 2014).

Spektrum inframerah (IR) memiliki sejumlah karakteristik penting, yaitu: (1) bersifat spesifik terhadap molekul tertentu dapat memberikan informasi menyeluruh mengenai gugus fungsi yang terkandung, termasuk jenis dan interaksinya; (2) berperan sebagai spektrum sidik jari (fingerprint) yang khas; (3) dapat digunakan secara kuantitatif, karena intensitas puncaknya berkorelasi dengan konsentrasi; (4) tidak merusak sampel (non-destruktif), sehingga memungkinkan sampel terutama yang dianalisis dengan teknik attenuated total reflectance (ATR) dapat dianalisis kembali menggunakan metode lain; dan (5) bersifat universal dalam hal bentuk sampel, baik padat, cair, gas, maupun bentuk antara padat dan cair atau gas (Rohman, 2014).

Spektrofotometer *Fourier Transform Infrared* (FTIR) merupakan alat analisis kimia yang berfungsi untuk mengidentifikasi dan memprediksi keberadaan gugus fungsi dalam suatu sampel (Yasser & Badai, 2019). Spektrofotometer FTIR bekerja berdasarkan prinsip interferensi antara dua berkas cahaya, yang menghasilkan sinyal disebut interferogram. Interferogram ini merupakan hasil sinyal sebagai fungsi dari perubahan panjang lintasan optik antara kedua berkas tersebut. Dua domain yang digunakan, yakni domain jarak dan frekuensi, dapat saling dikonversi melalui suatu metode matematis yang dikenal sebagai transformasi Fourier (Rohman, 2014).



Gambar 2. Skema alat spektrofotometer (Rohman, 2014)

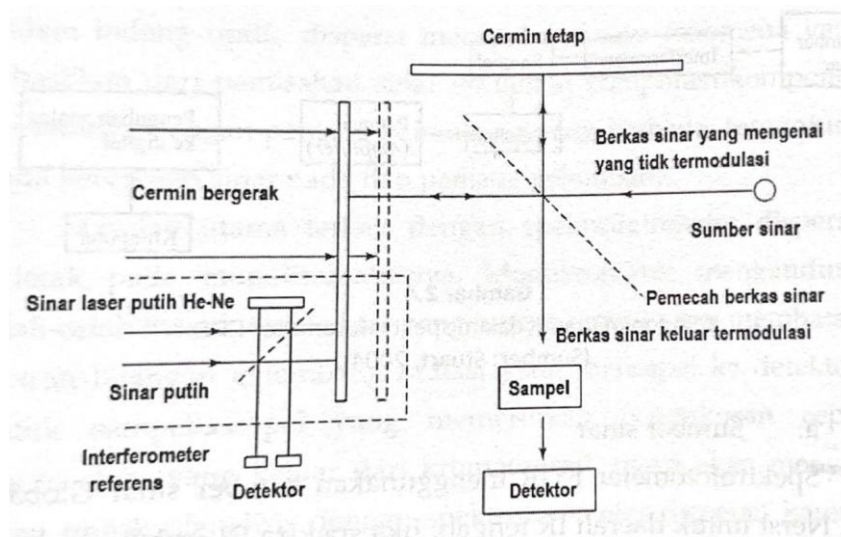
Gambar 2 menunjukkan susunan dasar spektrofotometer FTIR dalam bentuk skematik. Sumber radiasi mengirimkan sinar yang terlebih dahulu melewati interferometer, kemudian menuju sampel, dan akhirnya diterima oleh detektor. Dalam proses penguatan sinyal, frekuensi tinggi yang tidak diperlukan disaring menggunakan filter. Sinyal analog yang diperoleh selanjutnya dikonversi menjadi data digital melalui *analog-to-digital converter*, dan data digital ini dikirim ke komputer untuk diproses lebih lanjut melalui transformasi Fourier (Rohman, 2014).

1. Sumber Sinar

Pada spektrofotometer FTIR, sumber radiasi yang umum digunakan untuk wilayah inframerah tengah adalah sinar dari Globar atau Nernst. Apabila pengukuran juga mencakup daerah inframerah jauh, maka dapat digunakan lampu merkuri bertekanan tinggi sebagai sumbernya. Sementara itu, untuk daerah inframerah dekat, sinar dari lampu tungsten-hidrogen sering digunakan sebagai alternatif sumber cahaya (Rohman, 2014).

2. Interferometer Michelson

Interferometer Michelson, yang pertama kali dikembangkan oleh Albert Abraham Michelson pada tahun 1891, berfungsi untuk membagi satu berkas cahaya menjadi dua berkas terpisah. Salah satu dari kedua berkas tersebut diarahkan untuk menempuh lintasan optik yang berbeda dibandingkan berkas lainnya. Selisih jarak lintasan ini dikenal sebagai perbedaan lintasan optik (*optical path difference*), yang dilambangkan dengan huruf Yunani delta kecil (δ). Interferometer Michelson merupakan jenis pertama yang digunakan secara luas dalam perangkat FTIR komersial (Rohman, 2014). Skema dari sistem interferometer Michelson dapat dilihat pada Gambar 3.



Gambar 3. Interferometer Michelson (Rohman, 2014)

Interferometer Michelson terdiri atas dua cermin: satu cermin tetap (stasioner) dan satu cermin yang bergerak secara periodik. Di antara keduanya, terdapat sebuah pemecah berkas cahaya (beam splitter) yang berfungsi membagi sinar yang masuk menjadi dua bagian. Beam splitter dirancang agar setengah dari radiasi yang mengenainya diteruskan (ditransmisikan), dan setengah lainnya dipantulkan. Sinar yang diteruskan diarahkan menuju cermin tetap, sementara sinar yang dipantulkan dikirim ke cermin bergerak. Kedua berkas ini kemudian dipantulkan kembali ke arah beam splitter, tempat keduanya bergabung dan mengalami interferensi. Sebagian dari berkas pantulan dari cermin tetap akan diteruskan oleh beam splitter menuju detektor, sementara sebagian lainnya dipantulkan kembali ke arah sumber. Berkas yang terbentuk pada sudut 90° terhadap arah masuknya sinar dikenal sebagai berkas tertransmisi, dan inilah yang dideteksi oleh sistem FTIR (Rohman, 2014).

Sinyal awal yang dihasilkan disebut interferogram, yaitu grafik intensitas terhadap waktu (domain waktu), yang kurang efektif untuk interpretasi spektral. Oleh karena itu, grafik ini dikonversi menjadi plot intensitas terhadap frekuensi atau bilangan gelombang (domain frekuensi). Proses konversi ini dilakukan dengan metode matematika yang disebut transformasi Fourier, yang memungkinkan pemisahan masing-masing frekuensi serapan dari interferogram menjadi pita-pita spektrum, serupa dengan hasil pada spektrofotometer IR tipe dispersif (Rohman, 2014).

3. Detektor

Dalam sistem FTIR, terdapat dua jenis detektor yang umum digunakan. Untuk aplikasi rutin, detektor piroelektrik yang mengandung deuterium triglisin sulfat (DTGS) sering digunakan. Detektor ini dilengkapi dengan jendela dari alkali halida yang memiliki ketahanan terhadap suhu tinggi. Apabila diperlukan sensitivitas yang lebih tinggi, detektor berbasis merkuri kadmium tellurida (MCT) dapat digunakan, meskipun perangkat ini memerlukan pendinginan dengan nitrogen cair agar dapat beroperasi secara optimal. Untuk pengukuran spektrum inframerah di daerah inframerah dekat (NIR), jenis detektor yang digunakan umumnya adalah fotokonduktor berbahan dasar timbal sulfida (Rohman, 2014).

4. Komputer

Komputer memiliki peran penting dalam sistem FTIR modern. Perangkat ini mengontrol berbagai aspek pengoperasian instrumen, seperti pengaturan kecepatan pemindaian, titik awal dan akhir, serta batas pemindaian. Setelah spektrum berhasil dipindai, komputer akan membaca dan mengubah data analog menjadi data digital (digitalisasikan). Selain itu, komputer juga digunakan untuk manipulasi spektrum, termasuk proses derivatisasi, pengurangan atau penambahan spektrum, serta melakukan *overlay* antar spektra untuk tujuan perbandingan (Rohman, 2014).

Spektroskopi inframerah memiliki fungsi menunjukkan intensitas penyerapan terhadap jumlah gelombang yang dinyatakan dalam satuan cm^{-1} , sekaligus memberikan informasi tentang panjang gelombang dan energi yang diserap oleh suatu material.

Spektrum inframerah mencakup panjang gelombang antara 0,8 hingga 1000 mikron. Untuk kepraktisan dalam analisis, wilayah spektrum ini dibagi menjadi tiga kisaran utama, sebagaimana ditampilkan pada Tabel 1.

Tabel 1. Pembagian daerah spektra inframerah (Rohman, 2014)

Daerah	Panjang Gelombang (μm)	Bilangan Gelombang (cm^{-1})
IR dekat	0,8 – 2,5	12.500 – 4.000
IR tengah	2,5 – 25	4.000 – 400
IR jauh	25 – 1000	400 – 10

Dalam spektroskopi FTIR, hasil spektrum inframerah secara umum dibagi 2 wilayah utama. Pertama, wilayah fungsional dengan rentang frekuensi sekitar $4000\text{--}1500\text{ cm}^{-1}$ (N. Othman, 2023), ciri khas menunjukkan pita serapan tajam dan jelas yang menunjukkan keberadaan gugus fungsi seperti O - H, N - H, C - H (stretching), $\text{C}\equiv\text{C}$ dan $\text{C}\equiv\text{N}$ (triple bond), serta $\text{C}=\text{O}$, $\text{C}=\text{C}$ (double bond), pita-pita ini dapat secara langsung digunakan untuk mengidentifikasi gugus fungsi spesifik dalam molekul (Usha Shukla, 2025). Kedua, wilayah sidik jari dengan rentang frekuensi sekitar $1500\text{--}600\text{ cm}^{-1}$, menampilkan pola pita yang sangat kompleks dan unik untuk tiap senyawa (mirip sidik jari manusia), banyaknya paduan vibrasi memerlukan analisis komparatif dengan spektrum standar, digunakan untuk memastikan identitas senyawa dengan membandingkan pola sidik jari dengan perpustakaan spektrum, sangat berguna untuk membedakan isomer atau senyawa serupa yang gugus fungsinya identik (N. Othman, 2023).

FTIR secara umum memiliki dua teknik utama, yaitu metode transmisi (menggunakan pelat KBr) dan metode refleksi yang lebih dikenal dengan istilah Attenuated Total Reflection (ATR).

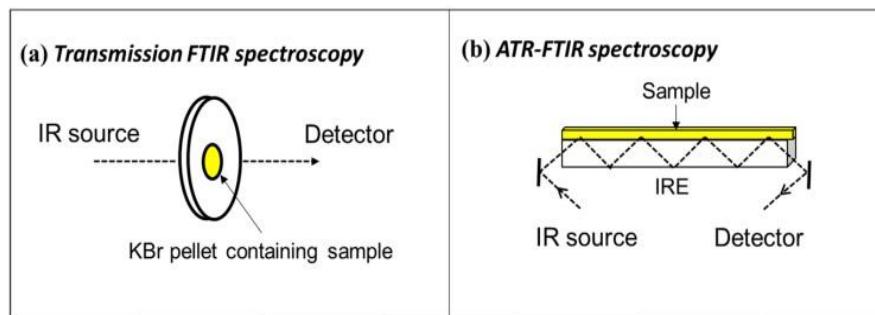
1. Metode Transmisi

Metode ini merupakan salah satu teknik dasar dalam analisis FTIR yang tergolong cepat, efisien, dan relatif ekonomis. Prinsip kerjanya melibatkan penggunaan pelat KBr yang dibuat dari campuran serbuk KBr dan sampel, kemudian dipres hingga membentuk pelet tipis dan transparan (Chen *et al.*, 2015). Teknik ini digunakan untuk mengamati penyerapan radiasi inframerah oleh volume sampel secara keseluruhan. Jenis sampel yang dapat dianalisis meliputi bentuk padat, cair, maupun gas. Namun, metode ini kurang cocok untuk material yang sangat kuat menyerap radiasi inframerah (Sulistyani & Huda, 2018).

2. Metode Attenuated Total Reflection (ATR)

ATR merupakan teknik FTIR yang lebih kompleks dibandingkan metode transmisi. Berbeda dengan metode KBr yang memerlukan pelet, teknik ini memungkinkan analisis langsung pada permukaan sampel tanpa perlu membuatnya menjadi film tipis. Prinsip kerjanya melibatkan pemantulan internal radiasi inframerah di dalam sebuah prisma tipis berindeks bias tinggi, yang kemudian bersentuhan langsung

dengan permukaan sampel. Radiasi dipantulkan dari sisi dalam prisma pada sudut tertentu (θ) yang melebihi sudut kritis, sehingga sinar akan mengalami total refleksi dan keluar melalui sisi prisma lainnya. Kelebihan ATR antara lain proses preparasi sampel yang sederhana, cakupan spektrum yang lebih luas, serta tidak memerlukan perhatian khusus terhadap ukuran partikel ataupun penggunaan pelat KBr (Sulistiyani & Huda, 2018).



Gambar 4. Skema sederhana metode FTIR (a) Metode Transmisi (b) Metode ATR (Chen *et al.*, 2015)

Spektroskopi inframerah memiliki sejumlah kelebihan, di antaranya adalah prosedur yang sederhana, mudah diterapkan, serta membutuhkan biaya yang relatif rendah (Umar *et al.*, 2016). Salah satu kelebihan utama spektroskopi inframerah dibandingkan teknik spektroskopi lainnya adalah kemampuannya menghasilkan spektrum sidik jari yang khas. Tidak ada dua senyawa atau sampel berbeda yang memiliki spektrum IR identik. Perbedaan antar senyawa dapat dikenali melalui jumlah puncak, intensitas serapan, maupun bilangan gelombang spesifik pada setiap puncaknya. Oleh karena itu, spektrum IR umumnya dimanfaatkan untuk identifikasi maupun konfirmasi struktur kimia suatu senyawa berdasarkan gugus fungsionalnya (Rohman, 2014). Namun, interpretasi spektrum FTIR secara visual dapat menjadi sulit dan kurang akurat. Untuk mengatasi hal ini, pendekatan kemometrik dapat digunakan guna membantu analisis dan penyederhanaan interpretasi data spektral (Rafi *et al.*, 2016).

2.4 Analisis Sidik Jari dan Kemometrik

Analisis sidik jari merupakan metode berbasis pola yang dapat digunakan untuk mengenali seluruh senyawa yang terdeteksi dalam suatu tumbuhan (Ma *et al.*, 2011 dalam Sudrajat *et al.*, 2020). Pendekatan ini memungkinkan evaluasi

kualitas tanaman melalui informasi menyeluruh mengenai kandungan kimia yang dimilikinya. Selain itu, fingerprinting juga berguna dalam pemantauan profil kimiawi lengkap dari tanaman (Zeng *et al.*, 2008 dalam Sudrajat *et al.*, 2020). Identifikasi komponen kimia perlu dilakukan karena komposisi senyawa dalam tanaman obat sangat dipengaruhi oleh asal tanaman, metode pengeringan, serta faktor lainnya (Hayati *et al.*, 2016 dalam Rachmawati *et al.*, 2023). Namun, interpretasi langsung dan visual terhadap pola spektrum IR yang kompleks sering kali sulit dilakukan. Oleh karena itu, untuk mempermudah proses tersebut, dibutuhkan bantuan teknik kemometrik seperti analisis multivariat (Gad *et al.*, 2013), yang dapat menyederhanakan dan mengelompokkan data secara statistik.

Kemometrik merupakan cabang ilmu yang menggabungkan teori serta metode dari matematika, statistik, dan logika formal dengan tujuan mendukung pengukuran dalam bidang kimia. Pendekatan ini menawarkan cara baru untuk menganalisis berbagai data dari pengukuran spektroskopi maupun kimia, serta mengoptimalkan prosedur eksperimen guna mendapatkan informasi kimia yang relevan dan maksimal (Shafirany *et al.*, 2019). Analisis terhadap campuran senyawa dengan profil spektra yang saling tumpang tindih dapat dilakukan secara efektif menggunakan metode kemometrik (Lorenza *et al.*, 2021).

Penggunaan kombinasi FTIR dan kemometrik telah diaplikasikan secara luas di berbagai bidang seperti makanan, minuman, dan farmasi. Beragam metode analisis kemometrik yang digunakan mencakup *Principal Component Analysis* (PCA), *Hierarchical Cluster Analysis* (HCA), *Canonical Variate Analysis* (CVA), *Discriminant Analysis* (DA), *Soft Independent Modelling by Class Analogy* (SIMCA), *Artificial Neural Network* (ANN), serta *Partial Least Squares Regression* (PLSR) (Christou *et al.*, 2018). Melalui pendekatan ini, karakteristik dan klasifikasi bahan dapat dipahami secara lebih mendalam. Berbagai penelitian juga telah mengintegrasikan analisis sidik jari berbasis spektrum FTIR dengan teknik kemometrik untuk membantu proses identifikasi, penentuan keaslian, dan pembedaan antara tanaman yang memiliki kedekatan kekerabatan (Purwakusumah *et al.*, 2014).

2.4.1 Preprocessing Kemometrik

Sebelum analisis dilakukan, data mentah perlu diproses terlebih dahulu melalui serangkaian langkah yang disebut preprocessing data, yang bertujuan untuk mempersiapkan data agar siap diterapkan lebih lanjut. Mencakup berbagai langkah untuk menyiapkan data sebelum digunakan dalam analisis lebih lanjut, seperti analisis multivariat atau metode klasifikasi. Tujuan utamanya adalah meningkatkan kualitas data sehingga hasil analisis lebih akurat dan dapat diandalkan. Langkah-langkah dalam preprocessing termasuk (Otto, 2016):

1. Transformasi Data: Mengubah bentuk data untuk meningkatkan interpretabilitas atau untuk memenuhi asumsi analisis tertentu (misalnya, transformasi logaritmik atau standar).
2. Deteksi dan Penanganan Outlier: Mengidentifikasi data yang tidak konsisten atau menyimpang dari pola umum.
3. Penghilangan Noise: Membersihkan data dari gangguan yang dapat menurunkan kualitas analisis.
4. Normalisasi: Menyamakan skala variabel untuk memastikan semua data memiliki kontribusi yang seimbang dalam analisis.

Dalam kemometrik, preprocessing menjadi langkah yang krusial untuk mempersiapkan data dari sumber seperti spektroskopi, kromatografi, atau alat analitik lainnya,

2.4.2 Validasi Kemometrik

Validasi kemometrik adalah proses evaluasi yang dilakukan untuk memastikan bahwa data yang dihasilkan dari instrumen FTIR (*Fourier Transform Infrared*) telah memenuhi kualitas yang memadai untuk dianalisis lebih lanjut menggunakan metode kemometrik seperti PCA (*Principal Component Analysis*). Validasi ini mencakup pemeriksaan akurasi, presisi, linieritas, sensitivitas, dan reproduktibilitas data spektral.

Validasi ini dilakukan sebelum tahapan PCA untuk:

1. Mengurangi Noise dan Variasi Non-Spesifik. Validasi membantu memastikan bahwa data spektral bebas dari gangguan (noise) atau variabilitas yang tidak relevan sehingga analisis PCA dapat memberikan hasil yang representative

(Bro, R., & Smilde, 2014).

2. Memastikan Kualitas Data. Data spektral yang tervalidasi memungkinkan PCA bekerja optimal dalam mengidentifikasi pola atau hubungan antara variabel, tanpa bias dari kesalahan pengukuran atau variasi instrumental (Wold *et al.*, 1987).
3. Mematuhi Standar Analisis. Validasi memastikan bahwa metode analisis memenuhi standar ilmiah atau regulasi, seperti pedoman ICH Q2 (R1) untuk validasi metode analisis (International Council for Harmonisation, 2005).
4. Meningkatkan Kepercayaan Hasil. Data yang tervalidasi memberikan keyakinan bahwa hasil PCA akan valid, reliabel, dan dapat diinterpretasikan dengan akurat (Otto, 2016).

2.5 Analisis *Principal Component Analysis* (PCA)

Seiring berkembangnya teknologi komputer, metode kemometrik semakin banyak dimanfaatkan oleh para ilmuwan sebagai alat utama untuk menghasilkan analisis yang lebih cepat dan memperpendek waktu pengembangan produk. Salah satu metode yang sering digunakan adalah *Principal Component Analysis* (PCA), yang dirancang untuk mengolah data multivariat dari sampel dengan informasi yang tidak diketahui. Metode ini memungkinkan pengenalan pola, seperti pengelompokkan kayu secang berdasarkan asal daerahnya (Rachmawati *et al.*, 2023).

PCA (*Principal Component Analysis*) adalah metode analisis data yang digunakan untuk mereduksi dimensi data. Teknik ini mengurangi jumlah variabel dalam sebuah matriks, tetapi tetap mempertahankan informasi utama dari data tersebut. Variabel baru yang dihasilkan, berupa komponen utama atau skor, memungkinkan pengurangan pengaruh noise serta eksplorasi perbedaan kecil pada spektrum IR (Che *et al.*, 2011).

Metode PCA melibatkan penyelesaian persamaan eigen sebagai inti perhitungannya. Secara umum, algoritma PCA dijelaskan oleh Johnson, 2007 melalui langkah-langkah berikut.

1. Matriks kovarian dihitung menggunakan rumus berikut:

$$Cov(xy) = \frac{\sum xy}{n} - (x)(y) \quad (1)$$

2. Nilai eigen ditentukan dengan menyelesaikan persamaan karakteristik berikut:

$$(A - \lambda I) = 0 \quad (2)$$

Dimana A adalah matriks data, λ menyatakan nilai eigen, dan I adalah matriks identitas.

3. Vektor eigen diperoleh dengan menyelesaikan sistem persamaan:

$$[A - \lambda I] [X] = 0 \quad (3)$$

4. Tentukan Komponen utama (PC) ditentukan dengan cara mengalikan data variabel asli dengan matriks vektor eigen yang telah diperoleh.

Besarnya proporsi varians yang dijelaskan oleh setiap komponen utama ke-i ditentukan oleh kontribusi relatifnya. Proporsi ini dapat dihitung berdasarkan nilai eigen yang dimiliki oleh masing-masing PC melalui persamaan yang telah ditetapkan (Johnson, 2007):

$$\text{Proporsi PC ke-}i = \frac{\lambda_i}{\sum_{j=1}^p \lambda_j} \times 100\% \quad (4)$$

Terdapat dua pendekatan umum yang dapat digunakan untuk menentukan jumlah komponen utama (PC) yang akan dipertimbangkan dalam analisis lanjutan. Pendekatan pertama adalah dengan mengevaluasi total proporsi varians yang dijelaskan, di mana nilai kumulatif yang idealnya melebihi 70%. Pendekatan kedua melibatkan analisis score plot, yaitu dengan mengamati titik siku atau perubahan tajam dalam grafik (Johnson, 2007).

Interpretasi PCA dilakukan melalui analisis *loading*. *Loading* mengacu pada korelasi antara variabel asli dan variabel baru yang dihasilkan. *Loading* ini menunjukkan sejauh mana variabel asli memengaruhi pembentukan variabel baru. Semakin besar nilai *loading*, semakin signifikan pengaruh variabel asli terhadap variabel baru. Perhitungan nilai *loading* dapat dilakukan menggunakan persamaan berikut (Sharma., 1996):

$$l_{ij} = \frac{w_{ij}}{s_j} \sqrt{\lambda_i} \quad (5)$$

Dalam konteks PCA, l_{ij} menggambarkan nilai *loading* dari variabel ke-j pada komponen utama ke-i. Adapun w_{ij} merepresentasikan bobot variabel ke-j terhadap komponen utama ke-i. Nilai eigen dari komponen utama ke-i dinyatakan

sebagai λ_i , sedangkan s_j menunjukkan standar deviasi dari variabel ke- j .

Analisis PCA dilakukan melalui kurva *score plot* yang membagi sampel yang diuji ke dalam empat kuadran. Metode PCA bekerja dengan mengelompokkan sampel berdasarkan tingkat kemiripan dan memisahkan sampel berdasarkan komponen terbesar yang dimilikinya. Melalui pendekatan ini, sampel yang berbeda dapat diidentifikasi berdasarkan persamaan maupun perbedaan di antaranya, sehingga variabel-variabel penting yang berhubungan dapat terungkap (Munawar & Hasanuddin., 2020). Intensitas serapan yang dianalisis melalui perangkat lunak akan menghasilkan *score plot* yang bervariasi. Dalam aturan *score plot*, semakin dekat titik sampel di dalam grafik, semakin besar kemiripan di antara sampel tersebut, yang menunjukkan mereka berasal dari kelompok yang sama (Zilhadia *et al.*, 2018). Selain itu, PCA dapat ditentukan menggunakan *eigen value*; *eigen value* yang lebih besar dari 1 dianggap memenuhi kriteria analisis (Rafi *et al.*, 2021 dalam Rachmawati *et al.*, 2023). *Eigen value* merupakan sekumpulan nilai skalar yang berasosiasi dengan sistem persamaan linear yang dikenal sebagai nilai karakteristik (Chriselda *et al.*, 2019). Selain itu, *eigen value* mewakili jumlah varians dalam setiap komponen.