

**THE EXPLORATION OF THE POTENCY OF FTIR
SPECTROSCOPY AND CHEMOMETRICS
FOR EXTRACT BIOACTIVITY PREDICTION AND
RAPID ANALYSIS OF BIOACTIVE CONTENT OF
MEDICINAL PLANTS**

**Darusman, LK^{1/3}, B. Susetyo², KA Notodiputro², AA Mattjik²,
R. Heryanto^{1,3} Erfiani² & Jajang⁴**

¹ **Departemen Kimia FMIPA IPB; Ji Pajajvan Bogor 16151; Telp/Fax 0251-381949**

² **Departemen Statistika FMIPA IPB; Kampus IPB Darmaga Bogor**

³ **Pusat Studi Biofarmaka - LPPM IPB; Kampus IPB Taman Kencana A Taman Kencana No 3;
Telp 0251-373561 Fax 0251-347525 Bogor 16151**

⁴ **Jurusan Matematika FMIPA Universitas Soedirman, Purwokerto**

Abstract

An infrared spectra is a characteristic representation for a chemistry system. There are many researches have been conducted for the interpretation supported by chemometric method which aimed for metabolite fingerprinting. Nowadays, the application of IR spectroscopy and chemometric for quantitative analysis of mixture system is revealed to be increasing because of ease of use, speed, reftabftty, s<rnmpJe size, and catitrafon *stability*. The paper is about **the use of** FTIR spectroscopy technique and chemometric for bidding a model of bioactrvrty prediction of jatibelanda extract (extract inhibition to the lipase enzyme activity) and generating calibration model tor determination gingero! in powder and ginger extract Both of them were made by three steps, i.e. the data reduction for reducing the complexity of data structure of infrared spectra, the build of' cafibrabofi model, and the model validation. The data reduction technique consisted of principal component analysis (PCA) dan fragmented regression. The generating calibration model and validation method used artificial neural network (ANN) dan Bayes approach. The ANN bioactvity model can make wefi-mannered of grouping of inhibition characteristic of jatibelanda extract and the calibration model of gingeroi by the Bayes approach resulted high precise prediction.

Abstrak

Spektra inframerah merupakan representasi khas sistem kimia yang diuji. Interpretasinya dengan bantuan metode kemometrik untuk tujuan metabolite fingerprinting dalam suatu sistem kimia telah banyak dilakukan. Fungsi lain dari kombinasi spektroskopi inframerah dan kemometrik untuk penentuan kuantitatif suatu komponen kimia di dalam sistem campuran mulai banyak mendapat perhatian karena preparasi sampelnya mudah, cepat dan tingkat keterulangannya yang baik. Makalah ini mengetengahkan penggunaan teknik spektroskopi FTIR dan kemometrik untuk membentuk model penduga bioaktivitas berbagai ekstrak jatibelanda (inhibisi ekstrak terhadap aktivitas enzim lipase) dan model kalibrasi penentuan gingerol dari serbuk dan ekstrak jahe. Baik model penduga bioaktivitas maupun model kalibrasi dibentuk melalui tiga tahap proses yaitu reduksi data untuk mengurangi kompleksitas struktur data spectra inframerah, pembentukan model, dan validasi model. Teknik reduksi data yang digunakan terdiri dari analisis komponen utama (Principal component analysis, PCA) dan regresi terpenggal, sedangkan untuk metoda pembentuk dan validasi model digunakan metode sistem jaringan syaraf tiruan (Artificial Neural Network, ANN) dan pendekatan bayes. Model ANN penduga bioaktivitas dapat mengelompokkan sifat inhibisi ekstrak jatibelanda dengan baik dan model kalibrasi gingerol dengan pendekatan Bayes menghasilkan ketepatan pendugaan relatif tinggi.