

IDENTIFIKASI SENYAWA ANTIOKSIDAN DAUN SAMBUNG NYAWA (*Gynura procumbens* [Lour]. Merr) MENGGUNAKAN PENDEKATAN METABOLOMIK BERBASIS LC-MS/MS

AURELIA CYNTHIA PUTRI



PROGRAM STUDI MAGISTER KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2024



PERNYATAAN MENGENAI TESIS DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa tesis dengan judul “Identifikasi Senyawa Antioksidan dari Daun Sambung Nyawa (*Gynura procumbens* [Lour]. Merr)” Menggunakan Pendekatan Metabolomik Berbasis LC-MS/MS” adalah karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apa pun 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, Januari 2024

Aurelia Cyntia Putri
G4501212042

RINGKASAN

AURELIA CYNTIA PUTRI. Identifikasi Senyawa Antioksidan dari Daun Sambung Nyawa (*Gynura procumbens* [Lour]. Merr) Menggunakan Pendekatan Metabolomik Berbasis LC-MS/MS. Dibimbing oleh AULIYA ILMIAWATI dan MOHAMAD RAFI

Sambung nyawa (*Gynura procumbens* [Lour]. Merr) merupakan tanaman obat yang telah digunakan dalam pengobatan tradisional karena memiliki beberapa aktivitas biologis, salah satunya sebagai antioksidan. Tanaman ini sudah banyak diteliti aktivitas biologisnya akan tetapi, belum ada penelitian yang melaporkan mengenai korelasi antara profil senyawa dengan aktivitas antioksidan pada daun *G. procumbens*. Sehingga, penelitian ini bertujuan untuk menentukan korelasi antara aktivitas antioksidan menggunakan pendekatan metabolomik yang dikombinasikan dengan kemometrik berbasis LC-MS/MS. Daun *G. procumbens* diekstraksi menggunakan metode maserasi dengan pelarut etanol p.a, etanol 70%, etanol 50%, etanol 30%, dan air. Aktivitas antioksidan ditentukan menggunakan metode 2,2-difenil-1-pikrilhidrazil (DPPH). Profil senyawa dalam ekstrak daun *G. procumbens* diidentifikasi menggunakan kromatografi cair spektrometri massa/spektrometri massa (LC-MS/MS). Setiap ekstrak dikelompokkan menggunakan analisis data multivariat *principal component analysis* (PCA) dan untuk menggambarkan adanya korelasi antara profil senyawa dengan aktivitas antioksidan dalam setiap ekstrak menggunakan *orthogonal partial least square-discriminant analysis* (OPLS-DA).

Penelitian ini berhasil mengkorelasikan antara aktivitas antioksidan dengan senyawa pada daun *G. procumbens* dengan menggunakan pendekatan metabolomik. Ekstrak daun *G. procumbens* memiliki rendemen ekstraksi yang berkisar antara 12,31 hingga 31,09 %, serta IC₅₀ yang berkisar antara 90,39 hingga 140,75 µg/mL. Identifikasi senyawa menggunakan LC-MS/MS berhasil mengidentifikasi sebanyak 54 senyawa. PCA berhasil mengelompokkan setiap ekstrak berdasarkan pelarut pengekstraksinya menggunakan data kromatogram, sementara OPLS-DA berhasil mengelompokkan setiap ekstrak menjadi 2 kelompok, yaitu kelompok antioksidan aktif dan tidak aktif. Selain itu, pada S-plot OPLS-DA berhasil memperoleh informasi mengenai senyawa yang diprediksi berpotensi sebagai antioksidan. Sebanyak 5 senyawa diprediksi berpotensi sebagai antioksidan. Dari 5 senyawa tersebut, 4 merupakan senyawa yang telah diketahui strukturnya yaitu kaempferol 3-O-rutinosida, 4-hidroksibenzaldehida, Asam- 4,5-dikafeoilkuinat, asam-3,4-dikafeoilkuinat, dan 1 senyawa yang belum diketahui strukturnya. Senyawa kaempferol-3-O-rutinosida merupakan senyawa yang teridentifikasi pada semua ekstrak daun *G. procumbens* di waktu retensi 8,64 menit.

Kata kunci: Antioksidan, metabolomik, sambung nyawa, UHPLC-Q-Orbitrap HRMS

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 mengumumkannya dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



SUMMARY

AURELIA CYNTIA PUTRI. Identification Of Antioxidant Compounds From “Sambung Nyawa” Leaves (*Gynura procumbens* [Lour.] Merr) Using LC-MS/MS Based Metabolomic Approach. Supervised by AULIYA ILMIAWATI and MOHAMAD RAFI.

Sambung nyawa (*Gynura procumbens* [Lour]. Merr) is a medicinal plant that has been used in traditional medicine because it has several biological activities, one of which is as an antioxidant. This plant has been widely studied for its biological activity. However, no research has yet reported the correlation between metabolites profiles and antioxidant activity in *G. procumbens* leaves. This study aims to determine the correlation between antioxidant activity using a metabolomics approach combined with LC-MS/MS-based chemometrics. *G. procumbens* leaves was extracted using the maceration method with ethanol p.a., 70% ethanol, 50% ethanol, 30% ethanol, and water. Antioxidant activity was determined using the 2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl (DPPH) method. The metabolites profile in *G. procumbens* leaves extract was identified using liquid chromatography mass spectrometry (LC-MS/MS). Each extract was grouped using multivariate principal component analysis (PCA) data analysis and to describe the correlation between profiles metabolite and antioxidant activity in each extract using orthogonal partial least squares-discriminant analysis (OPLS-DA).

Using a metabolomics approach, this research successfully correlated antioxidant activity with metabolites in *G. procumbens* leaves. The extraction yield of *G. procumbens* leaf extract ranges from 12.31% to 31.09%, with an IC₅₀ ranging from 90.39 to 140.75 µg/mL. LC-MS/MS successfully identified 54 metabolites for compound identification. Using chromatogram data, PCA grouped each extract based on the extraction solvent, while OPLS-DA grouped each extract into two groups: active and inactive antioxidant groups. Additionally, the OPLS-DA S-plot provided information about compounds predicted to have potential as antioxidants, with a total of 5 compounds identified as having such potential. Out of the five compounds, four have known structures, namely kaempferol 3-O-rutinoside, 4-hydroxybenzaldehyde, 4,5-dicaffeoylquinic acid, and 3,4-dicaffeoylquinic acid. The structure of one compound remains unknown. Kaempferol 3-O-rutinoside was identified in all *G. procumbens* leaf extracts at a retention time of 8.64 minutes.

Keywords: Antioxidant, LC/MS-MS, metabolomic, sambung nyawa, UHPLC-Q-Orbitrap HRMS



@Hak cipta milik IPB University

IPB University



IPB University
— Bogor Indonesia —

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 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.

© Hak Cipta milik IPB, tahun 2024
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 apa pun tanpa izin IPB

IDENTIFIKASI SENYAWA ANTIOKSIDAN DAUN SAMBUNG NYAWA (*Gynura procumbens* [Lour]. Merr) MENGGUNAKAN PENDEKATAN METABOLOMIK BERBASIS LC-MS/MS

AURELIA CYNTHIA PUTRI

Tesis
sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Magister pada
Program Studi Magister Kimia

**PROGRAM STUDI MAGISTER KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2024**



@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.

Penguji Luar Komisi Pembimbing pada Ujian Tesis:

1. Novriyandi Hanif, S. Si., M. Sc., D. Sc
2. Prof. Dr. Irmanida Batubara, M. Si



Judul Tesis : Identifikasi senyawa antioksidan daun sambung nyawa (*Gynura procumbens* [Lour]. (Merr) berbasis LC-MS/MS
Nama : Aurelia Cyntia Putri
NIM : G4501212042

@Hak cipta milik IPB University

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Dr. Auliya Ilmiawati, M. Si.

Pembimbing 2:
Prof. Dr. Mohamad Rafi, M. Si.

Diketahui oleh

Ketua Program Studi:
Prof. Dr. Irmanida Batubara, M. Si
197508072005012001

Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu
Pengetahuan Alam
Dr. Berry Juliandi, M. Si
19780723200701 1 001



Tanggal Ujian: 25 Januari 2024

Tanggal Lulus:



Judul Tesis : Identifikasi senyawa antioksidan daun sambung nyawa (*Gynura procumbens* [Lour]. (Merr) berbasis LC-MS/MS

Nama : Aurelia Cyntia Putri

NIM : G4501212042

Disetujui oleh

Pembimbing 1:

Dr. Auliya Ilmiawati, M. Si.

Pembimbing 2:

Prof. Dr. Mohamad Rafi, M. Si.

Diketahui oleh

Ketua Program Studi:

Prof. Dr. Irmanida Batubara, M. Si

197508072005012001

Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu

Pengetahuan Alam

Dr. Berry Juliandi, M. Si

19780723200701 1 001

Tanggal Ujian: 25 Januari 2024

Tanggal Lulus:



PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Allah subhanaahu wa ta'ala atas segala karunia-Nya sehingga karya ilmiah ini berhasil diselesaikan. Tema yang dipilih dalam penelitian yang dilaksanakan sejak bulan November 2022 sampai bulan Mei 2023 ini ialah Metabolomik dan Kemometrik, dengan judul “Identifikasi Senyawa Antioksidan dari Daun Sambung Nyawa (*Gynura procumbens* [Lour]. Merr) Menggunakan Pendekatan Metabolomik Berbasis LC-MS/MS”.

Penulis mengucapkan terima kasih kepada para pembimbing, Dr. Auliya Hmiawati, M.Si dan Prof. Dr. Mohamad Rafi, M.Si yang telah membimbing dan banyak memberi saran. Ucapan terima kasih kepada Kementerian Pendidikan, Kebudayaan, Riset, dan Teknologi (Kemendikbudristek) yang telah membiayai penelitian ini melalui Hibah Penelitian Tesis Magister (PTM) tahun 2023. Disamping itu, penulis ucapkan terima kasih kepada Dr. Dewi Anggraini Septaningsih, M.Si dan Alfi Hudatul Karomah, M.Si. selaku staf Unit Laboratorium Riset Unggulan, Nunung Nuryanti selaku staf Laboratorium Kimia Analitik FMIPA IPB, Kurniawanti, M.Si selaku staf Laboratorium Kimia Organik FMIPA IPB, Taofik Ridwan, SP, M.Si., serta Ninik Lestari Ningsih, SE selaku staf Pusat Studi Biofarmaka Tropika LPPM IPB yang telah membantu selama pengumpulan data. Ungkapan terima kasih juga disampaikan kepada ayah (Jumadi), mama (Nurul Hidayati), serta seluruh keluarga yang telah memberikan dukungan, doa, dan kasih sayangnya kepada penulis selama menjalani pendidikan S-2 di Program Magister Kimia di Departemen Kimia, FMIPA IPB.

Semoga karya ilmiah ini bermanfaat bagi pihak yang membutuhkan dan bagi kemajuan ilmu pengetahuan.

Bogor, Januari 2024

Aurelia Cyntia Putri

DAFTAR ISI

DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xi
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan Penelitian	2
1.4 Manfaat Penelitian	2
II METODE	3
2.1 Waktu dan Tempat Penelitian	3
2.2 Alat dan Bahan	3
2.3 Prosedur Penelitian	3
III HASIL DAN PEMBAHASAN	5
3.1 Rendemen dan Aktivitas Antioksidan	5
3.2 Profil Metabolit ekstrak daun <i>G. procumbens</i>	6
3.3 Diskriminasi ekstrak daun <i>G. procumbens</i> dengan PCA	7
3.4 Prediksi Senyawa Antioksidan Menggunakan OPLS-DA	8
IV SIMPULAN DAN SARAN	14
4.1 Simpulan	14
4.2 Saran	14
DAFTAR PUSTAKA	15
LAMPIRAN	18



DAFTAR GAMBAR

1 Rendemen ekstrak daun <i>G. procumbens</i>	5
2 Aktivitas antioksidan ekstrak daun <i>G. procumbens</i>	6
3 Kromatogram ekstrak daun <i>G. procumbens</i>	7
4 <i>Score plot</i> (a), Dendogram (b) pada ekstrak <i>G. procumbens</i>	8
5 (a) <i>Score plot</i> OPLS-DA, (b) S-plot	9
6 Struktur senyawa aktif antioksidan	10
7 Spektrum kampferol-3- <i>O</i> -rutinosida	10
8 Fragmentasi senyawa kaempferol-3- <i>O</i> -rutinosida	11
9 Spektrum Asam 4,5-dikafeoilkuinat	12
10 Spektrum Asam 3,4-dikafeoilkuinat	12
11 Spektrum 4-Hidroksibenzaldehida	13
12 Spektrum LC-MS/MS senyawa <i>unknown</i>	13

DAFTAR LAMPIRAN

1 Diagram alir penelitian	19
2 Surat identifikasi spesies	20
3 Identifikasi senyawa pada ekstrak daun <i>G. procumbens</i>	21