



PENGEMBANGAN METODE AUTENTIKASI *Sida rhombifolia* DAN *Strobilanthes crispus* MENGGUNAKAN KLT DAN KC-SM/SM DENGAN PENDEKATAN METABOLOMIK

USWATUN HASANAH



**PROGRAM STUDI DOKTOR ILMU KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**



@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.



PERNYATAAN MENGENAI DISERTASI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa disertasi dengan judul “Pengembangan Metode Autentikasi *Sida rhombifolia* dan *Strobilanthes crisper* Menggunakan KLT dan KC-SM/SM dengan Pendekatan Metabolomik” 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 disertasi ini.

Dengan ini saya melimpahkan hak cipta dari karya tulis saya kepada Institut Pertanian Bogor.

Bogor, Agustus 2025

Uswatun Hasanah
G4601211005

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.



RINGKASAN

USWATUN HASANAH. Pengembangan Metode Autentikasi *Sida rhombifolia* dan *Strobilanthes crispus* Menggunakan KLT dan KC-SM/SM dengan Pendekatan Metabolomik. Dibimbing oleh ETI ROHAETI, MOHAMAD RAFI, dan IRMANIDA BATUBARA.

Sidaguri (*Sida rhombifolia*) dan keji beling (*Strobilanthes crispus*) adalah tumbuhan yang banyak digunakan dalam pengobatan tradisional karena kandungan metabolit bioaktifnya. Sidaguri termasuk dalam famili Malvaceae yang memiliki aktivitas antibakteri, karena kandungan alkaloid dan flavonoid di dalamnya, sedangkan keji beling berasal dari famili Acanthaceae yang mengandung verbaskosida sebagai anti-inflamasi dan anti-kanker. Meski keduanya memiliki manfaat besar dalam pengobatan herbal, keberagaman dan kompleksitas kandungan kimianya mempersulit pengendalian mutu dan penjaminan keamanannya sebagai bahan baku obat. Hal ini menjadi tantangan besar karena produk herbal yang tidak terstandarisasi dapat mempengaruhi kualitas dan keamanan produk. Dalam konteks ini, penting pula untuk mengantisipasi adanya bahan pemalsu yang beredar di pasaran, seperti bunga duha (*Turnera subulata*) yang sering digunakan untuk menggantikan sidaguri dan sirih hutan (*Piper aduncum*) sebagai pengganti keji beling, mengingat kemiripan morfologi dan kandungan kimia yang dapat menurunkan mutu dan efektivitas produk herbal tersebut.

Pendekatan berbasis senyawa penanda farmakologis sering digunakan untuk mengevaluasi kualitas dan keaslian bahan baku herbal. Namun, kompleksitas komposisi kimia dan keterbatasan literatur tentang senyawa penanda membuat autentikasi sering kali tidak maksimal. Selain itu, pemalsuan bahan baku obat herbal yang beredar di pasaran dapat menurunkan kualitas dan keamanan produk. Oleh karena itu, upaya standardisasi bahan baku dan produk herbal sangat diperlukan untuk memastikan konsistensi khasiat dan keamanannya.

Untuk mendukung autentikasi sidaguri dan keji beling, diperlukan pengembangan metode analisis yang dapat mendeteksi ciri spesifik tumbuhan tersebut. Pendekatan metabolomik yang atraktif terhadap perbedaan metabolit, perlakuan biologis atau kondisi tertentu, menawarkan solusi yang dibutuhkan. Metode analisis sidik jari, seperti kromatografi lapis tipis (KLT) dan kromatografi cair-spektrofotometer massa/spektrofotometer massa (KC-SM/SM), memungkinkan deteksi senyawa-senyawa dalam tumbuhan obat, serta mendeteksi pemalsuan bahan baku.

Penelitian ini bertujuan mengembangkan metode autentikasi berbasis metabolomik untuk sidaguri dan keji beling guna memastikan keaslian bahan baku. Kedua tumbuhan ini dipilih karena menjadi prioritas dalam program saintifikasi jamu dari Kementerian Kesehatan Republik Indonesia. Profil metabolit tumbuhan dapat dianalisis menggunakan pendekatan kualitatif (*untargeted*) dengan KLT dan KC-SM/SM. KLT efektif untuk evaluasi kualitas dan kendali mutu, sementara KC-SM/SM menawarkan identifikasi dengan sensitivitas tinggi dan mampu memisahkan masing-masing metabolitnya.

Sampel daun dari kedua tumbuhan dan spesies berkerabat dekat, seperti sirih hutan (*Piper aduncum*) dan bunga duha (*Turnera subulata*), diekstraksi untuk

memperoleh metabolit bioaktif. Analisis dilakukan melalui KLT untuk mendapatkan pola sidik jari kimia dan KC-SM/SM untuk identifikasi komposisi metabolit lebih mendalam. Selanjutnya, data yang diperoleh akan dianalisis menggunakan teknik kemometrik seperti *principal component analysis* (PCA) dan *orthogonal partial least squares discriminant analysis* (OPLS-DA) untuk mengelompokkan sampel berdasarkan profil metabolit dan mengidentifikasi metabolit yang berkontribusi pada perbedaan antar-spesies.

Hasil analisis sidaguri dan keji beling menggunakan KLT dan KC-SM/SM menunjukkan perbedaan signifikan dalam profil kimia keduanya. Analisis KLT pada sidaguri mengungkapkan dua belas pita kromatografi, sedangkan bunga duha hanya menghasilkan sebelas pita, mencerminkan variasi komposisi yang dipengaruhi oleh faktor lingkungan, dan pita penanda sidaguri dengan nilai R_f masing-masing 0.21 (pita 5), 0.41 (pita 8), dan 0.65 (pita 9) tidak terdeteksi pada bunga duha, menunjukkan karakteristik unik untuk autentikasi. Selain itu, analisis kemometrik menggunakan PCA berhasil memetakan 65% variabilitas data, sementara OPLS-DA menunjukkan nilai R^2X sebesar 0.861, memberikan model yang kuat untuk autentikasi dan pencegahan pemalsuan bahan baku herbal. Dalam KC-SM/SM, sidaguri menunjukkan kromatogram *base peak* dengan pengidentifikasian sebanyak 29 metabolit, termasuk flavonoid, asam lemak, dan ekdisteroid. Model PCA menjelaskan 50% dari variabilitas data, sedangkan OPLS-DA mencatat R^2Y yang hampir sempurna di angka 0.999 dan nilai Q^2 mencapai 0.788, dengan akurasi identifikasi dan prediksi masing-masing sebesar 94.48%.

Untuk keji beling, KLT menunjukkan sepuluh pita kromatografi, dengan R_f penanda sebesar 0.41 (pita 6), 0.63 (pita 8), dan 0.81 (pita 10) yang tidak ditemukan dalam sirih hutan, serta mampu memetakan 74% dari total variabilitas dalam dua komponen utama, sedangkan OPLS-DA mencapai nilai R^2X 0.999 yang menjelaskan hingga 99.9%, dan R^2Y 0.743, mencerminkan kemampuan model dalam menjelaskan 74.3% variabilitas dalam variabel target. Dalam analisis KC-SM/SM, kromatogram *base peak* menunjukkan 20 metabolit teridentifikasi, dengan analisis menyatakan perbedaan signifikan dalam intensitas puncak metabolit dalam rentang waktu retensi antara 1 hingga 15 menit dan 16 hingga 30 menit. Model PCA KC-SM/SM menunjukkan persentase varians yang dijelaskan sebesar 54%, dan OPLS-DA menunjukkan R^2X 0.696 dan R^2Y 0.999 dengan kemampuan pengenalan sebesar 98.75%. Dalam evaluasi model klasifikasi untuk keji beling, *support vector machine* (SVM) terbukti menjadi algoritma paling efektif dengan akurasi tertinggi mencapai 96.4% dan *area under the curve - receiver operating characteristic* (AUC-ROC) mendekati 1 (0.998). Keseluruhan hasil analisis mengindikasikan bahwa kombinasi KLT dan KC-SM/SM dengan pendekatan analisis kemometrik serta *machine learning* sangat efektif dalam identifikasi dan diskriminasi untuk sidaguri dan keji beling, memberikan dasar yang kuat untuk pengembangan teknik autentikasi yang merupakan bagian dari pengendalian kualitas bahan baku herbal, serta mendukung program standarisasi jamu oleh Kementerian Kesehatan Republik Indonesia.

Kata kunci: Autentikasi, Identifikasi, Sidaguri, Keji beling, Pengembangan Metode, Metabolomik.



SUMMARY

USWATUN HASANAH. Development of Authentication Methods for *Sida rhombifolia* and *Strobilanthes crispus* using TLC and LC-MS/MS with Metabolomics Approach. Supervised by ETI ROHAETI, MOHAMAD RAFI, dan IRMANIDA BATUBARA.

Sida rhombifolia (commonly known as *sidaguri*) and *Strobilanthes crispus* (*keji beling*) are medicinal plants widely utilized in traditional medicine due to their rich content of bioactive metabolites. *Sida rhombifolia*, belonging to the Malvaceae family, exhibits antibacterial activity attributed to its alkaloid and flavonoid constituents, while *Strobilanthes crispus*, a member of the Acanthaceae family, contains verbascoside known for its anti-inflammatory and anticancer properties. Despite their therapeutic potential, the diversity and complexity of their chemical constituents pose significant challenges in quality control and safety assurance when used as raw materials for herbal medicine. This issue becomes more critical in the context of unstandardized herbal products, which may compromise both quality and safety. Furthermore, it is important to anticipate the presence of adulterants in the herbal raw material supply chain, such as *Turnera subulata* (*bunga duha*), which is often used as a substitute for *S. rhombifolia*, and *Piper aduncum* (*sirih hutan*) as a replacement for *S. crispus*, due to their morphological similarities and overlapping chemical profiles that may potentially reduce the quality and therapeutic efficacy of herbal preparations.

A pharmacological marker compound-based approach is often employed to assess the quality and authenticity of herbal raw materials. However, the chemical complexity and limited availability of marker compound references frequently hinder optimal authentication. In addition, the circulation of adulterated herbal raw materials further threatens product quality and consumer safety. Therefore, the standardization of raw materials and herbal products is urgently needed to ensure consistent efficacy and safety.

To support the authentication of *S. rhombifolia* and *S. crispus*, it is essential to develop analytical methods capable of detecting species-specific chemical features. A metabolomics-based approach, which captures the variation in metabolite composition due to biological or environmental factors, offers a promising solution. Fingerprinting techniques such as thin-layer chromatography (TLC) and liquid chromatography–mass spectrometry/mass spectrometry (LC-MS/MS) enable the detection of characteristic compounds and facilitate the identification of adulterants.

This study aims to develop a metabolomics-based authentication method for *S. rhombifolia* and *S. crispus* to ensure the authenticity of herbal raw materials. These species were selected as priorities in the Indonesian Ministry of Health's *jamu* (traditional herbal medicine) standardization program. Metabolite profiling was performed using untargeted approaches with TLC and LC-MS/MS. TLC was utilized for quality evaluation and routine control, while LC-MS/MS provided highly sensitive identification and resolution of individual metabolites.

Leaf samples of the target species and their respective adulterants—*Piper aduncum* and *Turnera subulata*—were extracted to obtain bioactive metabolites.

TLC was employed to generate chemical fingerprints, while LC-MS/MS enabled more comprehensive metabolite identification. The resulting data were subjected to chemometric analyses, including principal component analysis (PCA) and orthogonal partial least squares discriminant analysis (OPLS-DA), to classify samples based on metabolite profiles and identify discriminatory metabolites between species.

The analysis of *S. rhombifolia* and *S. crispa* using TLC and LC-MS/MS revealed substantial differences in their chemical profiles. TLC analysis of *S. rhombifolia* showed twelve chromatographic bands, while *T. subulata* yielded only eleven, reflecting compositional variations likely influenced by environmental factors. Notably, marker bands with R_f values of 0.21 (band 5), 0.41 (band 8), and 0.65 (band 9) were absent in *T. subulata*, indicating species-specific features for authentication. PCA successfully captured 65% of the data variability, and OPLS-DA yielded an R^2X value of 0.861, suggesting a robust model for authentication and adulteration detection. In LC-MS/MS, *S. rhombifolia* exhibited a base peak chromatogram comprising 29 identified metabolites, including flavonoids, fatty acids, and ecdysteroids. The PCA model explained 50% of data variance, while OPLS-DA demonstrated near-perfect classification with $R^2Y = 0.999$ and $Q^2 = 0.788$, achieving 94.48% accuracy in both identification and prediction.

For *S. crispa*, TLC revealed ten chromatographic bands, with marker R_f values at 0.41 (band 6), 0.63 (band 8), and 0.81 (band 10), which were not detected in *P. aduncum*. PCA mapped 74% of the total variability in two principal components, and OPLS-DA explained 99.9% of X variability ($R^2X = 0.999$) and 74.3% of Y variability ($R^2Y = 0.743$). In LC-MS/MS analysis, the base peak chromatogram indicated the presence of 20 identified metabolites. Significant differences were observed in peak intensity across retention times of 1–15 and 16–30 minutes. The LC-MS/MS PCA model explained 54% of the variance, while OPLS-DA achieved $R^2X = 0.696$ and $R^2Y = 0.999$ with a recognition rate of 98.75%. Among classification algorithms tested for *S. crispa*, support vector machine (SVM) proved to be the most effective, with the highest accuracy of 96.4% and an area under the curve–receiver operating characteristic (AUC-ROC) approaching 1 (0.998). Overall, the results indicate that combining TLC and LC-MS/MS with chemometric and machine learning approaches offers a powerful and reliable strategy for the authentication and discrimination of *S. rhombifolia* and *S. crispa*, thereby providing a solid foundation for quality control measures and supporting the herbal standardization efforts of the Indonesian Ministry of Health.

Keywords: Authentication, Identification, *Sida rhombifolia*, *Strobilanthes crispa*, Method Development, Metabolomics.



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 2025
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.



**PENGEMBANGAN METODE AUTENTIKASI *Sida rhombifolia* DAN
Strobilanthes crispus MENGGUNAKAN KLT DAN KC-SM/SM
DENGAN PENDEKATAN METABOLOMIK**

USWATUN HASANAH

Disertasi
sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Doktor pada
Program Studi Doktor Ilmu Kimia

**PROGRAM STUDI DOKTOR ILMU KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**



@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 Tertutup Disertasi:

1. Dr. Rudi Heryanto, S.Si., M.Si.
2. Prof. Dr. Anna Permanasari, M.Si.

Promotor Luar Komisi Pembimbing pada Sidang Promosi Terbuka Disertasi:

1. Dr. Rudi Heryanto, S.Si., M.Si.
2. Prof. Dr. Anna Permanasari, M.Si.



Judul Disertasi: Pengembangan Metode Autentikasi *Sida rhombifolia* dan *Strobilanthes crisper* L. Menggunakan KLT dan KC-SM/SM dengan Pendekatan Metabolomik.

Nama : Uswatun Hasanah
NIM : G4601211005

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Prof. Dr. Dra. Eti Rohaeti, M.S.

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

Pembimbing 3:
Prof. Dr. Irmanida Batubara, S.Si., M.Si.

Diketahui oleh

Ketua Program Studi:
Prof. Dr. Irmanida Batubara, S.Si., M.Si.
NIP 19750807 200501 2 001

Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam:
Dr. Berry Juliandi, M.Si.
NIP 19780723 200701 1 001



Tanggal Ujian: 17 Juni 2025

Tanggal Lulus:



@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.



PRAKATA

Puji syukur penulis panjatkan ke hadirat Allah Subhanahu wa Ta'ala atas limpahan rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan karya ilmiah ini. Penelitian ini, yang berlangsung sejak Agustus 2021 hingga September 2024, dengan judul: "*Pengembangan Metode Autentikasi Sida rhombifolia dan Strobilanthes crista Menggunakan KLT dan KC-SM/SM dengan Pendekatan Metabolomik*". Penulis ingin menyampaikan rasa terima kasih kepada para pembimbing yang telah berperan besar dalam kelancaran penelitian ini: Prof. Dr. Dra. Eti Rohaeti, M.S., Prof. Dr. Mohamad Rafi, S.Si., M.Si., dan Prof. Dr. Irmanida Batubara, S.Si., M.Si., atas segala dukungan, arahan, serta masukan yang diberikan. Ucapan terima kasih juga penulis sampaikan kepada moderator seminar, serta penguji luar komisi (Dr. Rudi Heryanto, S.Si., M.Si. dan Prof. Dr. Anna Permanasari, M.Si.), atas kritik dan saran yang membangun. Tidak lupa, apresiasi juga diberikan kepada Ketua dan Sekretaris Program Studi Pascasarjana Ilmu Kimia IPB serta dosen-dosen dan staf Program Studi Doktor Ilmu Kimia IPB yang telah membimbing penulis selama masa studi.

Terima kasih sebesar-besarnya disampaikan kepada Prof. Dr. Mohamad Rafi, S.Si., M.Si. selaku Kepala Tropical Biopharmaca Research Center IPB University (TropBRC), yang telah memberikan beasiswa *research assistance* dan izin penelitian di laboratorium riset unggulan IPB University. Ucapan terima kasih juga untuk Kementerian Pendidikan, Riset, dan Teknologi atas pendanaan penelitian melalui Skema Penelitian Fundamental 2023 (18799/IT3.D10/PT.01.02/M/T/2023), dan tahun pendanaan 2024 (22032/IT3.D10/PT.01.03/P/B/2024). Penulis juga berterima kasih kepada rekan-rekan seangkatan studi program Doktor Ilmu Kimia IPB 2021 (Dr. Nurlela, M.Si., Dr. Badrunanto M.Si., Dr. Isalmi Aziz MT., Dr. Nurdiani M.Si., Wina Yulianti M.Si., dan almarhum Eka Prihatinningtyas MT). Terima kasih juga kepada Rektor Universitas Pakuan (Prof. Dr. Ir.H. Didik Notosudjono.,M.Sc.), Dekan FMIPA UNPAK (Asep Denih, S.Kom., M.Sc., Ph.D), Kaprodi Kimia, FMIPA, UNPAK (Dr. Ade Heri Mulyati, M.Si.), para dosen dan staf FMIPA UNPAK. Penulis tidak lupa mengucapkan terima kasih kepada keluarga tercinta: Suami (Redi Aditama, M.Si.) anak-anak (Soraya Arsyila Aditama dan Ghazi Abdullah Aditama), almarhum papah (Abdul Quddoos), Bapak (H. Heri Setiawan), mamah (H. Euis Solihat), adik (Dewi Sri Rejeki, S.Kom.), yang senantiasa memberikan doa, cinta, dan dukungan selama masa studi.

Penulis menyadari bahwa disertasi ini masih banyak kekurangan yang harus disempurnakan. Semoga karya ilmiah ini bermanfaat bagi pihak yang membutuhkan dan bagi kemajuan ilmu pengetahuan.

Bogor, Agustus 2025

Uswatun Hasanah



@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.



DAFTAR ISI

RINGKASAN	ii
SUMMARY	iv
PRAKATA	x
DAFTAR ISI	xii
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR GAMBAR	xiii
DAFTAR LAMPIRAN	xiv
PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	3
1.4 Manfaat	3
1.5 Kebaruan (<i>novelty</i>)	3
1.6 Sistematika Disertasi	4
II METODE AUTENTIKASI SIDAGURI (<i>Sida rhombifolia</i>) MENGUNAKAN KLT DAN KC-SM/SM YANG DIKOMBINASIKAN DENGAN ANALISIS KEMOMETRIK	6
2.1 Pendahuluan	6
2.2 Metode	8
2.3 Hasil dan Pembahasan	12
2.4 Simpulan	26
III KLT DAN KC-SM/SM BERBASIS METABOLOMIK UNTUK AUTENTIKASI KEJI BELING (<i>Strobilanthes crispus</i>) DARI SIRIH HUTAN (<i>Piper aduncum</i>)	27
3.1 Pendahuluan	27
3.2 Metode	29
3.3 Hasil dan Pembahasan	31
3.4 Simpulan	48
IV PEMBAHASAN UMUM	49
V SIMPULAN DAN PERSPEKTIF MASA DEPAN	51
5.1 Simpulan	51
5.2 Perspektif Masa Depan	51
DAFTAR PUSTAKA	52
LAMPIRAN	59
RIWAYAT HIDUP	76

DAFTAR TABEL

1	Pita yang diamati pada sidaguri dan bunga duha dari berbagai asal daerah.	15
2	Metabolit yang teridentifikasi pada sidaguri.	18
3	Metabolit yang teridentifikasi pada bunga duha.	19
4	Komponen utama PC1 dan PC2, bersama dengan jumlah dari dua komponen pertama dan lima komponen utama pertama, dihitung untuk semua model PCA.	22
5	Metrik kinerja untuk model statistik yang dikembangkan.	24
6	Pita yang diamati pada keji beling dan sirih hutan di tiga daerah berbeda.	34
7	Metabolit yang teridentifikasi pada keji beling.	37
8	Metabolit yang teridentifikasi pada sirih hutan.	38
9	Komponen utama PC1 dan PC2, bersama dengan jumlah dari dua komponen pertama dan lima komponen utama pertama, dihitung untuk semua model PCA.	40
10	Metrik kinerja untuk model statistik yang dikembangkan	43
11	Evaluasi kinerja model klasifikasi SVM.	46

DAFTAR GAMBAR

1	<i>Workflow</i> analisis data KC-SM/SM	11
2	Sidik jari KLT sidaguri dari berbagai asal daerah (a) Jawa Barat, (b) Jawa Tengah, (c) Jawa Timur dan bunga duha dari berbagai asal daerah (d) Jawa Barat, (e) Jawa Tengah, (f) Jawa Timur pada UV 366 nm.	13
3	Densitogram sidaguri dari berbagai asal daerah (a) Jawa Barat, (b) Jawa Tengah, (c) Jawa Timur dan bunga duha dari berbagai asal daerah (d) Jawa Barat, (e) Jawa Tengah, (f) Jawa Timur.	14
4	Kromatogram <i>base peak</i> sidaguri dari berbagai asal: (a) Jawa Barat, (b) Jawa Tengah, (c) Jawa Timur dan bunga duha dari berbagai asal: (d) Jawa Barat, (e) Jawa Tengah, (f) Jawa Timur.	16
5	Perbandingan jumlah senyawa teridentifikasi pada ekstrak sidaguri dan bunga duha.	20
6	Plot skor PCA dari sidaguri murni (hijau), bunga duha murni (biru tua), 5% bunga duha dalam sidaguri (kuning), 25% bunga duha dalam sidaguri (merah), dan 50% bunga duha dalam sidaguri (biru muda) menggunakan area pita KLT.	21
7	Plot skor PCA dari sidaguri murni (hijau), bunga duha murni (biru tua), 5% bunga duha dalam sidaguri (kuning), 25% bunga duha dalam sidaguri (merah), dan 50% bunga duha dalam sidaguri (biru muda) menggunakan intensitas kromatogram KC-SM/SM.	22
8	Plot skor OPLS-DA dari sidaguri murni (hijau), bunga duha murni (biru tua), 5% bunga duha dalam sidaguri (kuning), 25% bunga duha dalam sidaguri (merah), dan 50% bunga duha dalam sidaguri (biru muda) menggunakan area pita KLT.	23
9	Plot skor OPLS-DA dari sidaguri murni (hijau), bunga duha murni (biru tua), 5% bunga duha dalam sidaguri (kuning), 25% bunga duha dalam sidaguri (merah), dan 50% bunga duha dalam sidaguri (biru muda) menggunakan intensitas kromatogram KC-SM/SM.	25



10	Workflow klasifikasi dengan Orange Data Mining	31
11	Sidik jari KLT keji beling dari berbagai asal daerah: (a) Jawa Barat, (b) Jawa Tengah, (c) Jawa Timur dan sirih hutan dari berbagai asal: (d) Jawa Barat, (e) Jawa Tengah, (f) Jawa Timur pada UV 366 nm.	32
12	Densitogram keji beling dari berbagai asal daerah: (a) Jawa Barat, (b) Jawa Tengah, (c) Jawa Timur dan sirih hutan dari berbagai asal: (d) Jawa Barat, (e) Jawa Tengah, (f) Jawa Timur.	33
13	Kromatogram <i>base peak</i> keji beling dari berbagai asal daerah: (a) Jawa Barat, (b) Jawa Tengah, (c) Jawa Timur dan sirih hutan (d) Jawa Barat, (e) Jawa Tengah, (f) Jawa Timur.	35
14	Perbandingan jumlah senyawa teridentifikasi pada ekstrak keji beling dan sirih hutan.	39
15	Plot skor PCA dari keji beling murni (hijau), sirih hutan murni (biru tua), 5% keji beling dalam sirih hutan (kuning), 25% keji beling dalam sirih hutan (merah), dan 50% keji beling dalam sirih hutan (biru muda) menggunakan area pita KLT.	40
16	Plot skor PCA dari keji beling murni (hijau), sirih hutan murni (biru tua), 5% keji beling dalam sirih hutan (kuning), 25% keji beling dalam sirih hutan (merah), dan 50% keji beling dalam sirih hutan (biru muda) menggunakan intensitas kromatogram KC-SM/SM.	41
17	Plot skor OPLS-DA dari keji beling murni (hijau), sirih hutan murni (biru tua), 5% keji beling dalam sirih hutan (kuning), 25% keji beling dalam sirih hutan (merah), dan 50% keji beling dalam sirih hutan (biru muda) menggunakan area pita KLT.	42
18	Plot skor OPLS-DA dari keji beling murni (hijau), sirih hutan murni (biru tua), 5% keji beling dalam sirih hutan (kuning), 25% keji beling dalam sirih hutan (merah), dan 50% keji beling dalam sirih hutan (biru muda) menggunakan intensitas kromatogram KC-SM/SM.	44
19	Analisis <i>confusion matrix</i> dari model klasifikasi menggunakan KLT dan KC-SM/SM (0: keji beling; 5: 5% pemalsuan; 25: 25% pemalsuan; 50: 50% pemalsuan; dan 100: sirih hutan).	46
20	Diagram alir penelitian autentikasi hingga rencana penerapan dalam industri.	50

DAFTAR LAMPIRAN

1	Determinasi tumbuhan.	60
2	Kode dan formula pencampuran sampel uji autentikasi sidaguri dan keji beling.	61
3	Kromatogram KC-SM/SM dari ekstrak etanol daun sidaguri.	64
4	Kromatogram KC-SM/SM dari ekstrak etanol daun keji beling.	65
5	Sidik jari KLT autentikasi sidaguri (variasi 5%, 25%, dan 50%) sebelum (sinar UV 254 nm, UV 366 nm, dan sinar tampak) dan sesudah derivatisasi (UV 366 nm dan sinar tampak).	66



- 6 Sidik jari KLT autentikasi skeji beling (variasi 5%, 25%, dan 50%) sebelum (sinar UV 254 nm, UV 366 nm, dan sinar tampak) dan sesudah derivatisasi (UV 366 nm dan sinar tampak).

71

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.