

**PENCIRIAN PROFIL KIMIA KUMIS KUCING (*Orthosiphon aristatus*)
MENGUNAKAN DART-TOFMS DENGAN PENDEKATAN
KEMOMETRIK PCA DAN OPLS-DA**

MOHAMMAD FADHLURRAHMAN



**PROGRAM STUDI ANALISIS KIMIA
SEKOLAH VOKASI
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**

- 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 PROYEK TUGAS AKHIR DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa proyek tugas akhir dengan judul “Pencirian Profil Kimia Kumis Kucing (*Orthosiphon aristatus*) Menggunakan DART-TOFMS dengan Pendekatan Kemometrik PCA dan OPLS-DA” 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 proyek tugas akhir ini.

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

Bogor, Oktober 2025

Mohammad Fadhlurrahman
J0312211194

ABSTRAK

MOHAMMAD FADHLURRAHMAN. Pencirian Profil Kimia Kumis Kucing (*Orthosiphon aristatus*) Menggunakan DART-TOFMS dengan Pendekatan Kemometrik PCA dan OPLS-DA. Dibimbing oleh RUDI HERYANTO dan DEWI ANGGRAINI SEPTANINGSIH

Kumis kucing (*Orthosiphon aristatus*) banyak digunakan sebagai bahan baku obat tradisional dan pemanfaatannya dipengaruhi oleh variasi kandungan kimianya. Penelitian ini dilakukan untuk mengkarakterisasi profil kimia dan aktivitas antibakteri daun kumis kucing yang diperoleh dari dua lokasi (Bogor dan Sukabumi). Sampel dianalisis menggunakan DART-TOFMS, aktivitas antibakteri ekstrak terhadap *Staphylococcus aureus* dan *Escherichia coli*, dan analisis kemometrik (PCA dan OPLS-DA). Sebanyak 18 senyawa kimia terdeteksi, termasuk 2 senyawa unik yang hanya terdapat pada sampel Bogor dan 5 senyawa unik yang hanya terdapat pada sampel Sukabumi. Ekstrak dari Sukabumi menghasilkan zona hambat yang lebih besar dibandingkan dengan ekstrak dari Bogor. Analisis PCA dan OPLS-DA mengungkapkan pemisahan spektrum kimia yang jelas antara kedua lokasi. DART-TOFMS yang dikombinasikan dengan kemometrik terbukti efektif dan akurat untuk karakterisasi cepat sebagai pendukung pengendalian kualitas kumis kucing sebagai bahan baku obat herbal.

Kata kunci: DART-TOFMS, kemometrik, kumis kucing

ABSTRACT

MOHAMMAD FADHLURRAHMAN. Chemical Profile Characterization of Kumis Kucing (*Orthosiphon aristatus*) Using DART-TOFMS with a Chemometric PCA and OPLS-DA Approach. Supervised by RUDI HERYANTO and DEWI ANGGRAINI SEPTANINGSIH.

Kumis kucing (*Orthosiphon aristatus*) was widely used as a raw material for traditional medicine and its utilization was influenced by the variation in chemical constituents. This study was conducted to characterize the chemical profiles and antibacterial activities of kumis kucing leaves obtained from two locations (Bogor and Sukabumi). The samples were analyzed using DART-TOFMS, antibacterial activity of the extracts against *Staphylococcus aureus* and *Escherichia coli* was assessed, and chemometric analyses (PCA and OPLS-DA) were performed. A total of 18 compounds were detected, including 2 compounds unique to Bogor samples and 5 compounds unique to Sukabumi samples. Extracts from Sukabumi produced larger inhibition zones compared to those from Bogor. PCA and OPLS-DA analyses revealed a clear separation of chemical spectra between the two locations. It was demonstrated that DART-TOFMS combined with chemometrics was an effective and accurate approach for rapid characterization, supporting the quality control of kumis kucing as a raw material for herbal medicine.

Keywords: chemometrics, DART-TOFMS, *Orthosiphon aristatus*



@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 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.

PENCIRIAN PROFIL KIMIA DAUN KUMIS KUCING (*Orthosiphon aristatus*) MENGGUNAKAN DART-TOFMS DENGAN PENDEKATAN KEMOMETRIK PCA DAN OPLS-DA

MOHAMMAD FADHLURRAHMAN

Laporan Proyek Tugas Akhir
sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana Terapan pada
Program Studi Analisis Kimia

**PROGRAM STUDI ANALISIS KIMIA
SEKOLAH VOKASI
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.

Judul Tugas : Pencirian Profil Kimia Daun Kumis Kucing (*Orthosiphon aristatus*) Menggunakan DART-TOFMS dengan Pendekatan Kemometrik PCA dan OPLS-DA
Akhir
Nama : Mohammad Fadhlurrahman
NIM : J0312211194

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Dr. Rudi Heryanto, S.Si., M.Si.

Pembimbing 2:
Dr. Dewi Anggraini Septaningsih, S.Si., M.Si

Diketahui oleh

Ketua Program Studi :
Dr. Farida Laila, S. Si., M. Si.
NIP. 197611032014092002

Dekan Sekolah Vokasi:
Dr. Ir. Aceng Hidayat, M. T.
NIP. 199607171992031003



Tanggal Ujian: 19 September 2025

Tanggal Lulus:

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

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 Maret 2025 sampai bulan Juli 2025 ini ialah pengendalian mutu bahan baku obat tradisional, dengan judul “Pencirian Profil Kimia Daun Kumis Kucing (*Orthosiphon aristatus*) Menggunakan DART-TOFMS dengan Pendekatan Kemometrik PCA dan OPLS-DA”

Terima kasih penulis ucapkan kepada para pembimbing, Dr. Rudi Heryanto, S. Si., M. Si dan Dr. Dewi Anggraini Septaningsih, S. Si., M. Si telah membimbing dan banyak memberi saran. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada pembimbing pembimbing akademik ibu Ima Kusumanti, S. Pi., M. Sc dan dosen penguji ibu Dr. Novia Amalia Sholeha, S. Si. Di samping itu, penghargaan penulis sampaikan kepada Dr. Mohammad Khotib, S.Si, M.Si beserta staf Laboratorium Metabolomik Alfi Hudatul Karomah, S,Si., M.Si., Rahmat Sidiq Suryakusuma, dan pihak-pihak terlibat yang telah membantu selama pengumpulan data. Ungkapan terima kasih juga disampaikan kepada bapak Asep Herman, ibu Titi Rohaeti, Mohammad Aldi Prambudiansyah, Mohammad Bilal Nurraziz, dan Mohammad Rifqi Athallah yang telah memberikan dukungan, doa, dan kasih sayangnya dalam memberikan dukungan kepada penulis.

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

Bogor, Oktober 2025

Mohammad Fadhlurrahman

DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR RUMUS	xi
DAFTAR REAKSI	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xi
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	2
1.4 Manfaat	2
1.5 Ruang Lingkup	3
1.6 Hipotesis	3
II TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Potensi dan Komposisi Kimia Daun Kumis Kucing	4
2.2 Kendali Mutu Kumis Kucing	5
2.3 DART-TOFMS dan Kemometrik	6
2.4 Aktivitas Antibakteri Ekstrak Daun kumis kucing	10
III METODE	12
3.1 Waktu dan Tempat	12
3.2 Alat dan Bahan	12
3.3 Prosedur Kerja	12
3.4 Analisis Data	18
IV HASIL DAN PEMBAHASAN	19
4.1 Spektrum Massa dan Profil Kimia Berdasarkan Analisis DART-TOFMS	19
4.2 Karakteristik Aktivitas Antibakteri serta Korelasinya dengan Profil Kimia Kumis Kucing	22
4.3 Evaluasi Kemometrik dan Korelasi Hasil Profil Kimia Kumis Kucing	26
V SIMPULAN DAN SARAN	31
5.1 Simpulan	31
5.2 Saran	31
DAFTAR PUSTAKA	32
LAMPIRAN	43
RIWAYAT HIDUP	57



DAFTAR TABEL

2. 1	Kandungan senyawa kimia ekstrak kumis kucing (Azizan <i>et al.</i> 2017)	4
2. 2	Tabulasi kondisi sampel dan pengukuran dengan DART-TOFMS	8
2. 3	Tabulasi kondisi dan hasil penelitian aktivitas antibakteri ekstrak kumis kucing	11
3. 1	Identitas Sampel	14
3. 2	Kondisi pengukuran alat DART-TOFMS	15
4. 1	Pencirian profil kimia pada daun kumis kucing yang berasal dari Bogor dan Sukabumi	20

DAFTAR GAMBAR

2. 1	Skema demonstrasi DART (JEOL 2006)	6
2. 2	Skema alat DART-TOFMS (JEOL 2006)	7
2. 3	(A) Plot PCA dari spektrum MS sampel <i>Angelica gigas</i> dan <i>Angelica sinensis</i> (B) Plot OPLS-DA dari spektrum MS sampel <i>Angelica gigas</i> dan <i>Angelica sinensis</i> (Kim <i>et al.</i> 2015)	9
3. 1	Bagan alir penelitian	12
3. 2	(A) Penentuan pohon yang akan disampling (B) penentuan titik yang akan di sampling dari pohon sampling	13
3. 3	Sebaran jenis tanah di lokasi sampling	13
3. 4	(A) Visualisasi <i>Dummy</i> PCA dan (B) OPLS-DA Daun Kumis Kucing	17
4. 1	Lokasi dan kondisi geografis sampling daun kumis kucing	19
4. 2	Perbandingan spektrum sampel (A) SB03034a dan (B) SS04018a	21
4. 3	(A) antibakteri ekstrak konsentrasi 250 mg/L terhadap <i>S. aureus</i> (SS SA dan SB SA 250) (B) antibakteri ekstrak konsentrasi 250 mg/L terhadap <i>E. coli</i> (SS EC dan SB EC 250) (C) antibakteri ekstrak konsentrasi 500 mg/L terhadap <i>S. aureus</i> (SS SA dan SB SA 500) (D) antibakteri ekstrak konsentrasi 500 mg/L terhadap <i>E. coli</i> (SS EC dan SB EC 500)	24
4. 4	Antibakteri ekstrak Bogor dan Sukabumi pada konsentrasi 250 mg/L dan 500 mg/L terhadap (A) <i>S. aureus</i> dan (B) <i>E. coli</i>	25
4. 5	Hasil analisis <i>heatmap</i>	26
4. 6	Plot PCA daun kumis kucing yang berasal dari Bogor dan Sukabumi	27
4. 7	Plot OPLS-DA daun kumis kucing yang berasal dari Bogor dan Sukabumi	28
4. 8	(A) Nilai R ² X, R ² Y, dan Q ² OPLS-DA (B) Nilai VIP scores OPLS-DA	29

DAFTAR RUMUS

1	Energi kinetik percepatan ion	7
2	Waktu terbang ion	8
3	Kadar air daun segar (%)	14
4	Kadar air simplisia (%)	14
5	Perolehan kembali (%)	15

DAFTAR REAKSI

1	Reaksi penangkapan elektron (Penning Ionization) (JEOL 2006)	7
2	Reaksi transfer proton melalui molekul air (JEOL 2006)	7
3	Reaksi aduksi ion (JEOL 2006)	7

DAFTAR LAMPIRAN

1	Hasil dan perhitungan kadar air daun kumis kucing segar	45
2	Tabulasi kadar air daun kumis kucing segar hasil penelitian sebelumnya	50
3	Hasil penentuan kadar air simplisia daun kumis kucing	51
4	Hasil ekstraksi daun kumis kucing	52
5	Tabulasi hasil ekstraksi penelitian sebelumnya	53
6	Hasil dan perhitungan aktivitas antibakteri ekstrak daun kumis kucing	54