



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

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 mengulik kepentingan yang wajar IPB University.  
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



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



## 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

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 mengulik kepentingan yang wajar IPB University.  
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



## 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 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 mengurangi 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

- 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 mengulik kepentingan yang wajar IPB University.  
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

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



## ©Hak cipta milik IPB University

## IPB University

Tim Pengajar pada Ujian Proyek tugas akhir:

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 mengulik 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  
Nama : Mohammad Fadhlurrahman  
NIM : J0312211194

Disetujui oleh

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

Rud  
\_\_\_\_\_  
S. m.

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

Diketahui oleh

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

A circular blue ink stamp is positioned in the upper left corner. The text "INSTITUTO TECNICO AGROPECUARIO BOGOTÉN" is arranged in a circle around a central emblem. The emblem features a stylized plant with three leaves and a central flower, set against a background of horizontal lines. A large, handwritten mark resembling a 'C' is written across the stamp.

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

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 mengulik 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 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 TABEL	x
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR RUMUS	xi
DAFTAR REAKSI	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xi
<b>I PENDAHULUAN</b>	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
<b>II TINJAUAN PUSTAKA</b>	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
<b>III METODE</b>	12
3.1 Waktu dan Tempat	12
3.2 Alat dan Bahan	12
3.3 Prosedur Kerja	12
3.4 Analisis Data	18
<b>IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	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
<b>V SIMPULAN DAN SARAN</b>	31
5.1 Simpulan	31
5.2 Saran	31
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	32
<b>LAMPIRAN</b>	43
<b>RIWAYAT HIDUP</b>	57

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 mengulik kepentingan yang wajar IPB University.  
 2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



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
3. 3	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 Dummy 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 heatmap	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 R2X, R2Y, dan Q2 OPLS-DA (B) Nilai VIP scores OPLS-DA	29



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 RUMUS

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

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 mengulik kepentingan yang wajar IPB University.