

ABSTRAK

DETEKSI KANDUNGAN IBUPROFEN DALAM JAMU DENGAN METODE KEMOMETRIKA BERBASIS DATA SPEKTROFOTOMETRI FTIR

Oleh

RIRIN DESTIANA

Keberadaan bahan kimia obat (BKO) seperti ibuprofen dalam produk jamu menjadi isu penting karena dapat menimbulkan risiko kesehatan, terutama jika dikonsumsi tanpa pengawasan medis. Penelitian ini bertujuan untuk mendeteksi kandungan ibuprofen sebagai BKO dalam beberapa merek jamu yang beredar di pasaran Kota Bandar Lampung.

Metode yang digunakan adalah spektrofotometri *Fourier Transform Infrared* (FTIR) yang dikombinasikan dengan kemometrika, menggunakan pendekatan *Principal Component Analysis* (PCA) untuk analisis kualitatif dan *Partial Least Square* (PLS) untuk analisis kuantitatif. Sampel terdiri dari berbagai merek jamu yang diperoleh dari pasar di Kota Bandar Lampung, kemudian dianalisis menggunakan FTIR dalam rentang bilangan gelombang $4000\text{--}500\text{ cm}^{-1}$.

Hasil analisis FTIR menunjukkan bahwa mayoritas sampel jamu tidak memiliki kemiripan spektral dengan ibuprofen, dan lebih mendekati karakteristik jamu simulasi, yang mengindikasikan tidak adanya kandungan ibuprofen dalam sampel. Analisis PCA mendukung hasil tersebut dengan menunjukkan pola pengelompokan yang serupa. Sementara itu, model PLS menghasilkan nilai koefisien determinasi (R^2) sebesar 0,999853 untuk kalibrasi dan 0,999719 untuk validasi, dengan persentase kesalahan masing-masing sebesar 0,0001026% dan 0,0002531%. Nilai tersebut menunjukkan bahwa model yang dibangun memiliki performa prediksi yang sangat baik.

Kata Kunci: Ibuprofen, Jamu, FTIR, Kemometrika, PCA, PLS

ABSTRACT

IBUPROFEN DETECTION IN HERBAL MEDICINE USING CHEMOMETRICS METHOD BASED ON FTIR SPECTROPHOTOMETRY

By

RIRIN DESTIANA

The presence of pharmaceutical chemicals such as ibuprofen in herbal medicine products has become an important issue due to its potential health risks, particularly when consumed without medical supervision. This study aims to detect the presence of ibuprofen in various brands of herbal medicine available in the markets of Bandar Lampung. The method employed was Fourier Transform Infrared (FTIR) spectroscopy combined with chemometrics, using Principal Component Analysis (PCA) for qualitative analysis and Partial Least Square (PLS) for quantitative analysis. Samples consisted of various brands of herbal medicine collected from the market, which were analyzed using FTIR within the wavenumber range of 4000–500 cm^{-1} . The FTIR analysis results showed that all samples exhibited spectral profiles closer to the simulated herbal medicine standard, rather than ibuprofen, indicating the absence of ibuprofen in the tested samples. The PCA result supported these findings by demonstrating similar clustering patterns between commercial and simulated herbal medicine. Furthermore, the PLS model produced a coefficient of determination (R^2) was 0.999853 for calibration and 0.999719 for validation, with error percentages of 0.0001026% and 0.0002531%, respectively, confirming its excellent predictive performance.

Keywords: Ibuprofen, Herbal Medicine, FTIR, Chemometric PCA, PLS