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

(Skripsi)

Oleh

RIRIN DESTIANA NPM 2117011017



FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM UNIVERSITAS LAMPUNG BANDAR LAMPUNG 2025

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

Oleh

RIRIN DESTIANA

Skripsi

Sebagai Salah Satu Syarat untuk Mencapai Gelar SARJANA SAINS

Pada

Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengeatahuan Alam



FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM UNIVERSITAS LAMPUNG BANDAR LAMPUNG 2025

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 4000–500 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 (R²) 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 (R2) 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

Judul : DETEKSI KANDUNGAN IBUPROFEN DALAM

JAMU DENGAN METODE KEMOMETRIKA BERBASIS DATA SPEKTROFOTOMETRI FTIR

Nama : Ririn Destiana

NPM : 2117011017

Program Studi : Kimia

Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

MENYETUJUI

1. Komisi Pembimbing

Dr. Sonny Widiarto, S.Si., M.Sc. NIP. 197110301997031003 Dr. Sudibyo, S.T., M.Sc. NIP. 1982032720155021002

2. Ketua Jurusan Kimia FMIPA Universitas Lampung

Prof. Dr. Mita Rilyanti, S.Si., M.Si. NIP. 197205302000032001

MENGESAHKAN

1. Tim Penguji

Ketua : Dr. Sonny Widiarto, S.Si., M.Sc.

Sekretaris . Dr. Sudibyo, S.T., M.Sc.

Anggota: Dian Septiani Pratama, S.Si., M.Si.

2WZ-

Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

1971 July Weri Satria, M.Si. NIP 197110012005011002

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Ririn Destiana

NPM : 2117011017

Jurusan : Kimia

Falkultas : Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Perguruan Tinggi : Universitas Lampung

Dengan ini menyatakan dengan sebenar-benarnya bahwa skripsi saya yang berjudul "Deteksi Kandungan Ibuprofen Dalam Jamu Dengan Metode Kemometrika Berbasis Data Spektrofotometri FTIR" adalah benar karya saya sendiri dan saya tidak keberatan jika sebagian atau seluruh data dalam skripsi tersebut digunakan oleh dosen atau program studi untuk kepentingan publikasi sesuai dengan kesepakatan.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sadar dan sebenar-benarnya untuk digunakan sebagaimana mestinya.

Bandar Lampung 10 Agustus 2025 Yang Menyatakan,

Ririn Destiana WNNPM. 2117011017

RIWAYAT HIDUP



Penulis bernama lengkap **Ririn Destiana**, lahir di Panjang pada 20 januari 2003. Penulis merupakan anak keempat dari empat bersaudara, dari pasangan Bapak Muhroni dan Ibu Rusminem. Saat ini penulis bertempat tinggal di Talang Tengah, Rt/Rw 001/001, Kelurahan Talang

Beringin, Kecamatan Pulau Panggung, Kabupaten Tanggamus, Lampung.

Penulis memulai pendidikan formal di PAUD SPS Taman Ilmu pada tahun 2007 dan lulus pada tahun 2009. Selanjutnya, penulis melanjutkan pendidikan pendidikan di SDN 1 Talang Beringin yang diselesaikan pada tahun 2015. Pendidikan tingkat menengah pertama ditempuh di SMPN 1 Sumberejo dan lulus pada tahun 2018. Kemudian penulis melanjutkan pendidikan ke SMA Muhammadiyah Gisting yang telah diselesaikan pada tahun 2021. Penulis melanjutkan ke jenjang perguruan tinggi di mana telah diterima sebagai mahasiswa Program Studi Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam di Universitas Lampung melalui jalur Seleksi Nasional Masuk Perguruan Tinggi Negeri (SNMPTN).

Selama menjadi mahasiswa penulis penulis pernah mengikuti Karya Wisata Ilmiah yang diselenggarakan oleh BEM FMIPA Unila tahun 2021. Penulis juga aktif dalam organisasi mahasiswa (Ormawa) kampus yakni terdaftar sebagai Anggota Biro Penerbitan Himpunan Mahasiswa Kimia (HIMAKI) dan menjadi anggota Bidang Informasi dan Komunikasi Rohani Islam (ROIS) FMIPA Universitas Lampung pada periode 2022. Kemudian penulis diberi kesempatan untuk menjadi Sekretaris Komisi IV yakni Bidang Hubungan Luar dan Kemediaan pada periode 2023. Selain itu, pada tahun 2024 penulis juga diamanahkan sebagai Bendahara Badan Eksekutif Mahasiswa (BEM) FMIPA Universitas Lampung dan penulis juga mengikuti Program Merdeka Belajar Kampus Merdeka (MBKM) Kuliah

Kerja Nyata (KKN) yang telah terlaksana pada periode 1. Kemudian di tahun yang sama penulis juga telah melaksanakan Praktik Kerja Lapangan (PKL) di PT SUCOFINDO Cabang Bandar Lampung dengan judul "Evaluasi Mutu Minyak Crude Palm Oil (CPO) Berdasarkan Hubungan Antara Kadar Air dan Kotoran Terhadap Kadar Asam Lemak Bebas (Free Fatty Acid) di PT SUCOFINDO Bandar Lampung". Pada tahun 2025, penulis menyelesaikan penelitian di Laboratorium Badan Riset Inovasi Nasional (BRIN) Tanjung Bintang, Lampung Selatan dengan judul "Deteksi Kandungan Ibuprofen Dalam Jamu Dengan Metode Kemometrika Berbasis Data Spektrofotometri FTIR".

MOTTO

"Barangsiapa bertakwa kepada Allah, niscaya Dia akan menjadikan baginya jalan keluar, dan memberinya rezeki dari arah yang tiada disangka-sangkanya. Dan barangsiapa bertawakal kepada Allah, maka cukuplah Allah menjadi penolongnya"

(QS. At-Talaq: 2–3)

"Jangan hanya berusaha untuk sukses, tapi berusahalah untuk menjadi bernilai"

(Albert Einstein)

"Urip punika urup, nglantaraken pepadhang lan kebecikan" (Hidup adalah tentang menerangi dan menebar kebaikan kepada lingkungan sekitar)

"Sesungguhnya amal yang paling dicintai oleh Allah adalah yang paling terus menerus walaupun sedikit"

(HR. Bukhari Muslim)

"Setiap langkah perjuangan adalah goresan seni menuju keberhasilan, Dengan doa dan sabar, semua terjal berhasil kulewati"

PERSEMBAHAN



"Dengan menyebut nama Allah yang Maha Pengasih lagi Maha Penyayang"

Puji Syukur kehadirat Allah SWT atas limpahan karunia-Nya, sehingga terciptalah sebuah karya ini yang kupersembahkan sebagai wujud dan tanggung jawabku kepada:

Kedua orang tua tercinta, Bapak Muhroni dan Ibu Rusminem. Terima kasih atas cinta, doa, dukungan, dan pengorbanan tiada henti yang selalu menjadi sumber kekuatan dan motivasi saya dalam menyelesaikan studi ini.

Kakak-kakakku tersayang Lukman Haris, Gunawan, dan Wal'ardi Sulaiman.

Terima kasih telah menjadi penguat hati dalam suka dan duka dalam perjalananku.

Bapak Dr. Sonny Widiarto, S.Si., M.Sc., Bapak Dr. Sudibyo, S.T., M.Sc., dan Ibu Dian Septiani Pratama, S.Si., M.Si., serta seluruh Bapak dan Ibu Dosen Jurusan Kimia. Terima Kasih telah membimbing, menasehati serta memberikan ilmunya. Semoga Allah SWT membalas segala kebaikan yang telah diberikan.

Keluarga besar Besiswa Etos id, teman-teman seperjuangan, diriku sendiri, dan Almamater Tercinta Universitas Lampung.

SANWACANA

Alhamdulillahirabbil'alamin, puji syukur penulis sampaikan kepada Allah SWT, karena atas rahmat dan hidayah-Nya, penulis dapat menyelesaikan penelitian serta dapat menuliskannya dalam bentuk karya tulis ilmiah.

Skripsi ini disusun sebagai syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains di Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lampung. Dengan judul skripsi "**Deteksi Kandungan Ibuprofen Dalam Jamu Dengan Metode Kemometrika Berbasis Data Spektrofotometri FTIR**".

Penulis menyadari bahwa dalam proses pengerjaan dan penulisan skripsi ini tidak terlepas dari kesulitan dan rintangan yang penulis hadapi. Namun, itu semua bisa terlewati berkat rahmat dan ridho Allah SWT serta adanya bimbingan, dukungan, nasihat serta bantuan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis menyampaikan terima kasih kepada:

- Kedua orang tua penulis ayahandaku tercinta Bapak Muhroni dan Ibundaku tersayang Ibu Rusminem, yang selalu sabar memberikan kasih sayang, dukungan, motivasi, materi dan yang selalu mendoakan penulis. Gelar ini kupersembahkan untuk kedua orang tua penulis.
- Kakak-kakakku tersayang, Lukman Haris, Gunawan, dan Wal'ardi Sulaiman.
 Skripsi ini kusampaikan sebagai ungkapan terima kasih atas segala perhatian, nasihat, dan *support* yang tiada henti dari kakak.
- 3. Keluarga keduaku tersayang Bapak Sukarsono, Ibu Jumirah, Anggun Lestari, Angga Saputra, Kustriana, Risky Agustin, Noviyanti dan Rusdiyanti yang selalu memberikan dukungan, dan arahan serta doa kepada penulis.

- 4. Bapak Dr. Sonny Widiarto, S.Si., M.Sc. selaku dosen pembimbing satu yang senantiasa bersabar, rela meluangkan waktu, tenaga, dan pikiran dalam membimbing penulis.
- 5. Bapak Dr. Sudibyo, S.T., M.Sc. selaku dosen pembimbing dua yang telah membantu memberikan pemikiran, arahan, dan koreksi dalam penyusunan skripsi ini serta telah memberikan akses penuh untuk melakukan penelitian di Laboratorium BRIN Tanjung Bintang, Lampung Selatan.
- 6. Ibu Dian Septiani Pratama, S.Si., M.Si., selaku dosen penguji yang telah memberikan saran dan kritik membangun yang sangat berharga dalam penyempurnaan skripsi ini.
- 7. Prof. Rudy TM Situmeang, M.Sc. selaku dosen pembimbing akademik yang telah membimbing dan mendampingi penulis selama masa studi dengan penuh perhatian dan dukungan.
- 8. Ibu Dr. Dian Herasari, M.Si. selaku Wakil Ketua Jurusan Kimia FMIPA Universitas Lampung.
- 9. Bapak Dr. Eng. Heri Satria, M.Si. selaku Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Lampung.
- 10. Bapak dan Ibu dosen Jurusan Kimia FMIPA Universitas Lampung yang telah memberikan nasihat dan ilmu yang sangat bermanfaat selama masa studi.
- 11. Dompet Dhuafa, Great Edunesia, dan Etos ID, terima kasih karena telah memberikan kesempatan kepada penulis untuk mengasah potensi, memberikan ruang untuk bertumbuh, bukan hanya materi, tetapi juga membuka jalan, menguatkan langkah, dan mengingatkan bahwa setiap mimpi layak untuk diperjuangkan.
- 12. Untuk para fasilitator Etos ID Lampung yang sudah Kak Pujo Prasetio, Mba Endah, Kak Dani Windarto, Kak Amiza Rezika, Kak Eko Wiyanto, dan Mba Sri Rahayu, terima kasih telah menjadi tempat bertanya, sandaran semangat, dan cahaya di masa-masa sulit.
- 13. Kepada sahabat seperjuangan Etoser Lampung 2021. Anita Fitria, Erwin Kesuma, Intan Suly Ciwing, Ulfa Novitasari, dan Tiara Tabitha, terima kasih atas kenangan, tawa, serta pengingat bahwa mimpi akan bernilai besar jika dijalani bersama dan bermanfaat bagi sesama.

- 14. Tak lupa, apresiasi untuk Keluarga Besar Etos ID Nasional Arshaka Ghazi, dan seluruh kakak-adik Etoser Lampung yang telah menjadi sumber inspirasi dan penguat tekad untuk terus melangkah lebih jauh.
- 15. Untuk sahabat-sahabat terbaikku, Haya Ulfa Atiqah, S.Si., Nurmala Rohmah, S.Si., Vira Nurmalia, S.Si., Dinda Aprillia Defi, S.Si., Deviola Apriyanti Rajagukguk,dan Ribka Crisma Yohana Silalahi. Kalian bukan hanya teman, tapi sudah seperti rumah keduaku di tengah riuhnya dunia kampus. Bersama kalian, tawa menjadi obat, dan kebersamaan menjadi penawar resah. Terima kasih karena selalu hadir, menguatkan, dan merayakan setiap langkah, entah itu yang penuh cahaya atau yang dipenuhi badai. Semoga kebersamaan ini tetap terjaga, meski nanti kita akan berjalan ke arah yang berbeda.
- 16. Untuk sahabat seperjuangan di jamu *research* 21. Haya Ulfa Atiqah, S.Si., Nurmala Rohmah, S.Si., Rahmadina Pratiwi, S.Si., dan Pretty Marita, S.Si. Terima kasih sudah menjadi bagian dari perjalanan ini, bersama dalam suka dan duka, bertahan di tengah kesulitan, dan berbagi energi untuk mencapai harapan yang selalu kita dambakan. Hingga akhirnya kita bisa menorehkan gelar di belakang nama dengan senyum penuh syukur.
- 17. Sahabatku sejak PAUD, Rian Bayu Haqiqi, S.Si., yang selalu menjadi pendengar yang baik, memberikan dukungan, nasihat, dan tak lelah untuk mengajari kesulitan dalam penelitian. Terima kasih karena telah menjadi bagian perjalanan penulis hingga sampai di titik ini.
- 18. Untuk teman-teman Kelas A, terima kasih atas tawa, kebersamaan, dan kerja sama yang menghangatkan setiap langkah selama perkuliahan.
- Untuk seluruh keluarga besar Kimia Angkatan 2021, terima kasih atas perjuangan dan kisah yang kita bagi bersama di setiap semester yang kita lewati.
- 20. Untuk diriku sendiri yang sudah berani berdiri di tengah badai, menenun harihari penuh luka menjadi kekuatan, menjadikan sabar sebagai sahabat setia dan kesendirian menjadi ruang untuk tumbuh. Terima kasih telah percaya bahwa setiap luka akan sembuh, setiap air mata akan menguatkan, dan setiap perjalanan, betapapun beratnya akan selalu membawa arti. Terima kasih karena tetap memilih bangkit, meski dunia kadang terasa ingin meruntuhkan.

DAFTAR ISI

	Halaman
DA	FTAR GAMBARxvii
DA	FTAR TABELxviii
I.	PENDAHULUAN 1
	1.1. Latar Belakang
	1.2. Tujuan Penelitian
	1.3. Manfaat Penelitian
II.	TINJAUAN PUSTAKA
	2.1. Masalah Penyalahgunaan Obat Tradisional
	2.2. Jamu
	2.3. Bahan Kimia Obat (BKO)
	2.4. Ibuprofen
	2.5. Spektrofotometri Fourier Transfom Infrared FTIR
	2.5.1. Prinsip FTIR
	2.6. Metode Kemometrika
	2.6.1. Principal Component Analysis (PCA)17
	2.6.2. Partial Least Square (PLS)
Ш	. METODE PENELITIAN21
	3.1. Waktu dan Tempat
	3.2. Alat dan Bahan
	3.2.1. Alat
	3.2.2. Bahan
	3.3. Prosedur Penelitian
	3.3.1. Pemilihan Sampel
	3.3.2. Preparasi Sampel
	3.3.2.1. Preparasi Standar Ibuprofen

	3.3.2.2. Preparasi Jamu Herbal Simulasi	. 23
	3.3.3. Preparasi Jamu Kemasan	. 23
	3.3.4. Preparasi Kalibrasi dan Validasi	. 24
	3.3.4.1. Pembuatan Set Kalibrasi	. 24
	3.3.4.2. Pembuatan Set Validasi	. 25
	3.3.5. Pengukuran FTIR	. 25
	3.3.6. Analisis Data Kemometrika	. 26
	3.4. Skema Penelitian	. 27
IV.	HASIL DAN PEMBAHASAN	. 29
	4.1. Pengantar	. 29
	4.2. Lokasi Sampling	. 29
	4.3. Preparasi Standar Ibuprofen, Jamu Herbal Simulasi, dan Sampel	. 30
	4.4. Hasil Karakterisasi Fourier Transform Infrared (FTIR)	. 31
	4.4.1. Hasil Spektrum FTIR Standar Ibuprofen dan Jamu Simulasi	. 31
	4.4.2. Sampel Jamu	. 33
	4.5. Analisis Kemometrika Metode Principal Component Analysis (PCA).	. 35
	4.6 .Set Kalibrasi dan Set Validasi	. 44
	4.6.1. Hasil Karakterisasi FTIR dari Set Kalibrasi dan Set Validasi	. 44
	4.6.1.1. Spektrum Set Kalibrasi	. 44
	4.6.1.2. Spektrum Set Validasi	. 46
	4.6.2. Analisis Kemometrika Metode Partial Least Square (PLS)	. 47
	4.6.2.1. Hasil Model PLS dari Set Kalibrasi	. 47
	4.6.2.2. Hasil Model PLS dari Set Validasi	. 49
V.	KESIMPULAN DAN SARAN	. 51
	5.1. Kesimpulan	. 51
	5.2. Saran	. 51
DA	FTAR PUSTAKA	. 53
LA	MPIRAN	. 58

DAFTAR GAMBAR

Halar	man
Gambar 1. (A). Jamu, (B). Obat herbal terstandar, (Sidoretno dan Rz, 2018)	7
Gambar 2. Struktur Kimia Ibuprofen (Ningtyas dkk., 2015).	. 11
Gambar 3. Instrumen Spektrofotometer FTIR (Suseno dan Firdausi, 2008)	. 12
Gambar 4 Spektrum FTIR Ibuprofen (Theodore, M. (2022).	. 15
Gambar 5. Hasil Score Plot dari Metamizol (BM)) (Rahayu dkk., 2024)	. 18
Gambar 6 Regresi PLS dari campuran biner sampel jamu (Rahayu dkk., 2024)) 20
Gambar 7. Peta Lokasi Pengambilan Sampel	. 30
Gambar 8. Spektrum standar Ibuprofen dan Jamu Simulasi	. 31
Gambar 9. Spektrum Standar dan Sampel Jamu	. 34
Gambar 10. Score Plot Sampel Hasil Analisis PCA	. 39
Gambar 11. Score Plot Sampel Hasil Analisis PCA	. 41
Gambar 12. Plot 3D PCA Sampel dan Standar	. 43
Gambar 13. Spektrum Set Kalibrasi	. 45
Gambar 14. Spektrum Set Validasi	. 46
Gambar 15. Model PLS dari Set Kalibrasi	. 49
Gambar 16. Model PLS dari Set Validasi	. 49

DAFTAR TABEL

	Halaman
Tabel 1. Perbandingan Berat Set Kalibrasi	24
Tabel 2. Perbandingan Berat Set Validasi	25
Tabel 3. Nilai Eigen Korelasi dengan Matriks pada Standar dan S	ampel Jamu 37

I. PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Penggunaan bahan alami sebagai pengobatan tradisional telah diwariskan secara turun-temurun di Indonesia. Obat tradisional tersebut umumnya berasal dari ekstrak tumbuhan, hewan, mineral, atau campurannya yang dikenal sebagai sediaan galenik. Salah satu bentuk obat tradisional yang paling populer di Indonesia adalah jamu. Sejak dahulu, masyarakat Indonesia telah mempercayai manfaat jamu sebagai bagian dari budaya dan warisan leluhur, yang sejalan dengan prinsip "kembali ke alam" (*back to nature*). Masyarakat umumnya menganggap jamu sebagai produk alami yang aman dan bebas efek samping (Herdini dkk., 2021). Jamu merupakan obat tradisional yang berasal dari bahan alami yang sejak lama telah diwariskan oleh budaya Indonesia secara turuntemurun dari generasi ke generasi untuk kesehatan. Khasiat ampuh jamu sendiri telah terbukti oleh waktu, sejarah, dan zaman serta bukti empiris langsung pada manusia dalam ratusan tahun lamanya (Muliasari dkk., 2019).

Salah satu alasan mengapa jamu dipercaya sebagai salah satu obat berkhasiat bagi masyarakat Indonesia adalah karena jamu memiliki beberapa khasiat yang sangat bermanfaat untuk kesehatan tubuh, diantaranya yakni bersifat analgetik, antiinflamasi, imunostimulan, antidiabetes, dan antirematik (Rahayu dkk., 2023). Khasiat dari analgesik sendiri ialah sebagai kandungan obat yang mampu memberikan efek penenang atau penghilang rasa sakit tanpa menghilangkan kesadaran dari yang mengonsumsi (Dirgantara dkk., 2014). Lalu khasiat antiinflamasi biasanya dimaksudkan kepada kandungan obat yang memiliki beberapa kegunaan untuk meredakan peningkatan suhu tubuh, pembengkakan,

kemerahan, serta nyeri (Suryatinah dkk., 2020). Kemudian, untuk khasiat imunostimulan biasanya dimaksudkan kepada kandungan obat yang berguna untuk menjaga dan meningkatkan sistem kekebalan tubuh terhadap berbagai respon yang muncul dari infeksi atau serangan penyakit (Novianty dkk., 2023). Selain itu, untuk khasiat antidiabetes pada jamu biasanya dimaksudkan kepada kandungan obat yang memiliki beberapa kegunaan seperti membantu meningkatkan kandungan antioksidan dan enzim amilase dalam tubuh untuk memperlancar pengolahan glukosa dalam darah dan menjaga kesehatan pankreas (Wulandari, 2014). Selain itu, khasiat dari antirematik pada jamu biasanya dimaksudkan kepada kandungan obat yang mampu memberikan efek pemberi rasa reda pada nyeri atau rasa sakit yang berada pada area persendian tubuh (Hartutik dkk., 2021).

Produk jamu saat ini telah banyak beredar luas di pasaran dan dikonsumsi oleh berbagai kalangan, tidak terbatas pada lansia. Jamu sering digunakan untuk mengatasi nyeri otot, kelelahan setelah beraktivitas, serta untuk menjaga daya tahan tubuh dan melancarkan peredaran darah (Lathif, 2013). Popularitas jamu juga menimbulkan tantangan baru seiring dengan perkembangan zaman. Salah satu isu yang muncul adalah penambahan bahan kimia obat (BKO) secara ilegal ke dalam produk jamu, baik disengaja maupun tidak. Hal ini bertentangan dengan Peraturan Menteri Kesehatan No. 246/Menkes/Per/V/1990 BAB V Pasal 23, yang melarang penambahan BKO dalam obat tradisional (Fikayuniar dan Abriyani, 2020).

BKO merupakan bahan kimia hasil isolasi atau sintetik yang dapat berkhasiat digunakan sebagai obat (Saputra, 2015). Motif penambahan BKO dalam jamu tidak lain adalah bertujuan untuk memberikan efek terapi yang lebih maksimal sehingga produk yang dipasarkan lebih banyak peminatnya. Berdasarkan data BPOM tahun 2015 terdapat 54 merek jamu yang mengandung BKO. Adapun beberapa jenis produk jamu yang biasanya ditambahkan BKO antara lain jamu pegal linu, sesak nafas, masuk angin, rematik dan suplemen kesehatan dan peningkat stamina. Jamu yang terindikasi mengandung BKO tersebut jika digunakan tanpa adanya dosis yang tepat serta penggunaanya yang tidak sesuai

dapat menimbulkan efek samping yaitu mual, diare, gangguan pada sistem pencernaan, terkadang pendaharan, sakit kepala, pusing vertigo, fotosensitifitas dan hematuria (Rasyida dan Kristiningrum, 2014). Hal ini dapat terjadi karena akibat interaksi antar komponen, interaksi antara zat-zat kimia dari BKO yang terkandung di dalam jamu dengan bahan-bahan obat tradisional yang telah dikonsumsi dalam waktu bersamaan(Djasfar dan Pradika, 2022).

Adapun beberapa BKO yang sering ditambahkan pada produk jamu adalah obatobatan yang termasuk ke dalam golongan NSAID (*Non Steroidal Anti Inflammatory Drugs*) diantaranya seperti ibuprofen, antalgin, deksametason, natrium diklofenak, fenil butazon, prednison, piroksikam, dan parasetamol. Ibuprofen memiliki sifat antipiretik yang dapat membantu pusat pengaturan panas di dalam tubuh sehingga dapat memberikan efek pengeluaran panas disertai dengan keluarnya banyak keringat. Selain itu ibuprofen juga memiliki indikasi sebagai analgetik dan anti-inflamasi. Penggunaan jangka panjangnya dapat menyebabkan kerusakan permukaan saluran gastrointestinal dan pendarahan (Kumalasari dkk., 2018). Ibuprofen sendiri termasuk ke dalam salah satu kelompok obat yang paling banyak diminati masyarakat yang memiliki khasiat sebagai pereda nyeri dan anti-inflamasi pada rematik. Namun demikian jika ibuprofen dikonsumsi secara berkelanjutan dan tanpa dosis yang tepat sesuai anjuran dokter akan menimbulkan efek samping yang berbahaya bagi yang mengkonsumsinya (Wattiheluw dkk., 2023).

Beberapa metode instrumental yang telah digunakan untuk mendeteksi keberadaan BKO dalam produk jamu antara lain adalah *High Performance Liquid Chromatography* (HPLC), *Spectrophotometry* UV-Vis, dan *Thin Layer Chromatography* (TLC). Namun, metode-metode tersebut memiliki beberapa keterbatasan, seperti waktu analisis yang relatif lama, biaya operasional yang tinggi, serta membutuhkan keahlian khusus dalam pengoperasiannya (Cendekiawan dkk., 2019). Sebagai alternatif yang lebih efisien, metode spektrofotometri FTIR (*Fourier-Transform Infrared Spectroscopy*) telah banyak digunakan karena bersifat non-destruktif, tidak memerlukan preparasi sampel yang kompleks (Pratiwi et al., 2021). Selain itu metode ini memiliki sensitivitas

tinggi terhadap senyawa kimia yang dianalisis (Andayani dkk., 2023). Meskipun demikian, pola spektrum yang kompleks dari hasil analisis FTIR dapat menyulitkan interpretasi secara langsung, terutama pada sampel yang mengandung banyak komponen. Oleh karena itu, pendekatan kemometrika diperlukan untuk membantu interpretasi data spektra secara kuantitatif. Kemometrika merupakan bidang ilmu yang mengintegrasikan metode statistik dan matematika untuk mengolah serta menganalisis data kimia secara efektif (Rohman, 2014). Keunggulan utama dari metode ini adalah kemampuannya dalam mendeteksi dan mengkuantifikasi senyawa dalam konsentrasi sangat rendah, bahkan yang berada di bawah batas deteksi metode analisis konvensional (Cendekiawan dkk., 2019).

Dalam penerapannya, dua teknik kemometrika yang umum digunakan adalah *Principal Component Analysis* (PCA) dan *Partial Least Square* (PLS). PCA merupakan metode eksploratori yang bertujuan untuk mereduksi dimensi data multivariat yang kompleks menjadi sejumlah komponen utama (principal components) yang saling bebas (tidak berkorelasi). Melalui metode ini, pola hubungan antar sampel dapat diidentifikasi, termasuk pengelompokan (clustering) sampel yang memiliki karakteristik spektral serupa. PCA juga sangat bermanfaat untuk memvisualisasikan hubungan antar sampel dalam bentuk score plot dua atau tiga dimensi, sehingga memudahkan interpretasi kemiripan maupun perbedaan spektral di antara sampel yang dianalisis. (Rohman, 2019).

Kombinasi antara metode spektrofotometri FTIR dengan kemometrika, khususnya menggunakan teknik PCA dan PLS, menawarkan solusi analisis yang akurat, cepat, murah, serta ramah lingkungan. Berdasarkan pertimbangan tersebut, penelitian ini dilakukan dengan tujuan mendeteksi kandungan ibuprofen sebagai BKO dalam berbagai merek jamu kemasan yang beredar di pasaran, menggunakan metode spektrofotometri FTIR yang dikombinasikan dengan pendekatan kemometrika. Pendekatan ini diharapkan mampu memberikan metode alternatif yang lebih praktis dan efektif dibandingkan metode konvensional yang memerlukan waktu lebih lama, biaya yang lebih besar, dan prosedur yang lebih kompleks.

1.2. Tujuan Penelitian

Berdasarkan latar belakang yang telah diuraikan di atas, maka tujuan dari penelitian ini adalah sebagai berikut :

- Mendeteksi keberadaan ibuprofen sebagai BKO dalam beberapa merek jamu yang beredar di Kota Bandar Lampung menggunakan metode spektrofotometri FTIR yang dikombinasikan dengan kemometrika.
- 2. Menilai efektivitas metode spektrofotometri FTIR berbasis kemometrika, khususnya teknik PCA dan PLS dalam analisis kandungan ibuprofen.
- Menganalisis kemampuan PCA dalam mengelompokkan sampel jamu berdasarkan kemiripan spektrum terhadap standar ibuprofen dan jamu simulasi.
- 4. Menyusun model kalibrasi dan validasi menggunakan metode PLS untuk memprediksi kadar ibuprofen dalam sampel jamu secara kuantitatif.

1.3. Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan dapat memberikan informasi ilmiah kepada masyarakat, akademisi, dan pihak pengawas obat dan makanan mengenai ada atau tidaknya kandungan ibuprofen sebagai BKO dalam produk jamu yang beredar di pasaran. Selain itu, hasil penelitian ini juga dapat menjadi dasar pertimbangan dalam pengawasan dan edukasi mengenai potensi risiko konsumsi jamu yang mengandung BKO tanpa pengawasan medis, serta mendukung penggunaan metode spektrofotometri FTIR yang dikombinasikan dengan kemometrika sebagai alternatif analisis yang efektif, akurat, dan efisien.

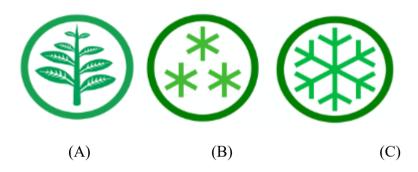
II. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Masalah Penyalahgunaan Obat Tradisional

Indonesia merupakan negara yang kaya akan keanekaragaman hayati, tercatat memiliki sekitar 30.000 spesies tumbuhan, di mana sekitar 7.000 spesies di antaranya diketahui memiliki potensi sebagai bahan obat herbal (Fauziah, 2021). Pemanfaatan tanaman obat ini telah lama digunakan dalam praktik pengobatan tradisional dan terus berkembang seiring meningkatnya kebutuhan masyarakat terhadap layanan kesehatan yang lebih terjangkau. Di tengah melonjaknya biaya pengobatan modern, obat tradisional sering dijadikan sebagai alternatif karena dianggap lebih murah, mudah diakses, dan berasal dari bahan alami yang diyakini aman digunakan. Hal ini dikarenakan obat tradisional merupakan suatu ramuan atau campuran bahan-bahan yang dapat berasal dari tumbuhan, hewan, mineral, sediaan sarian (galenik) yang telah digunakan sebagai bahan pengobatan secara turun temurun dan dapat diterapkan sesuai dengan tradisi yang berlaku di masyarakat (Vera dan Yanti, 2020).

Badan Pengawas Obat dan Makanan (BPOM) telah mengklasifikasikan obat tradisional ke dalam tiga kelompok, yaitu jamu, obat herbal terstandar (OHT), dan fitofarmaka. Klasifikasi ini dilakukan untuk membedakan tingkat pembuktian ilmiah dan standarisasi yang diterapkan pada masing-masing jenis. Berdasarkan Peraturan Menteri Kesehatan Republik Indonesia No. 003/Menkes/Per/I/2010, jamu merupakan obat tradisional khas Indonesia yang dibuat dari bahan alami dan digunakan secara empiris oleh masyarakat. Sementara itu, menurut Keputusan Kepala BPOM No. HK.00.05.4.2411 Tahun 2004, jamu wajib memenuhi persyaratan keamanan dan mutu berdasarkan data empiris yang dapat

dipertanggungjawabkan. OHT adalah obat tradisional yang telah melalui uji praklinik dan memiliki bahan baku yang distandarisasi, sehingga keamanannya terbukti secara ilmiah. Sedangkan fitofarmaka adalah bentuk obat tradisional dengan tingkat pembuktian ilmiah tertinggi karena telah melalui uji praklinik dan uji klinik pada manusia, serta bahan baku dan produk jadinya telah memenuhi standar mutu yang ketat (Sidoretno dan Rz, 2018). Adapun penandaan terkait jenis obat tersebut dapat dilihat pada Gambar 1.



Gambar 1. (A). Jamu, (B). Obat herbal terstandar, (C). Fitofarmaka (Sidoretno dan Rz, 2018)

Meskipun regulasi terhadap obat tradisional sudah cukup jelas, masalah penyalahgunaan masih terus terjadi, khususnya dalam bentuk penambahan ke dalam produk jamu. BPOM secara rutin memberikan peringatan dan pengawasan terhadap peredaran produk jamu yang dicurigai mengandung BKO. Pada tahun 2013, BPOM menemukan sedikitnya 49 merek obat tradisional yang beredar di Indonesia terindikasi mengandung BKO (Cendikiawan dkk., 2019). Ibuprofen dinilai tidak boleh dicampurkan ke dalam jamu tradisional karena dapat menimbulkan efek samping yang merugikan bagi yang mengkonsumsinya. Penambahan ibuprofen ke dalam jamu dinilai berpotensi menimbulkan efek samping yang merugikan bagi konsumen, terutama jika dikonsumsi secara terusmenerus tanpa dosis dan aturan pakai yang tepat. Penggunaan ibuprofen dalam jangka panjang dapat menyebabkan berbagai komplikasi kesehatan, seperti gangguan pada saluran pencernaan (misalnya tukak lambung dan perdarahan gastrointestinal), kerusakan hati, serta penurunan fungsi ginjal yang dapat berujung pada gagal ginja(Wattiheluw dan Firdaus, 2023).

2.2 Jamu

Jamu adalah minuman sehat racikan asli Indonesia yang menjadi warisan budaya dan masih menjadi pilihan masyarakat tradisional walaupun produk obat-obatan sudah muncul di pasaran. Jamu merupakan ramuan yang muncul sebagai akibat adanya masalah yang dihadapi masyarakat pada jaman dulu, yaitu bagaimana merawat tubuh dan mengobati berbagai macam penyakit (Wulandari, 2014). Istilah "jamu" berasal dari kata "djampi" yang diartikan sebagai penyembuhan atau untuk kesegaran tubuh. Jamu dikenal memiliki beragam manfaat, tidak hanya sebagai pereda gejala penyakit, tetapi juga untuk meningkatkan stamina, memperbaiki nafsu makan, dan menjaga kebugaran tubuh. Dalam praktiknya, bahan baku jamu berasal dari berbagai tanaman obat yang mudah dijumpai di lingkungan sekitar. Beberapa tanaman yang umum digunakan antara lain temulawak (*Curcuma xanthorrhiza*), kencur (*Kaempferia galanga*), jahe (*Zingiber officinale*), meniran (*Phyllanthus niruri*), dan mengkudu (*Morinda citrifolia*).

Dalam Keputusan Kepala Badan Pengawas Obat dan Makanan Nomor: Hk.00.05.4.2411 pada tahun 2004 tentang Ketentuan Pokok Pengelompokan dan Penandaan Obat Bahan Alam Indonesia antara lain disebutkan obat tradisional berdasarkan tingkat pembuktian khasiatnya dapat dikelompokkan menjadi jamu, obat herbal terstandar, dan fitofarmaka. Dimana di dalamnya menyebutkan "Jamu harus memenuhi kriteria aman sesuai dengan persyaratan yang ditetapkan, klaim khasiat dibuktikan berdasarkan data empiris dan memenuhi persyaratan mutu yang berlaku" (pasal 2) (Supardi dkk., 2011). Pada akhir tahun 2010 dimana 46 produk jamu ditarik dari peredaran oleh Badan POM justru merupakan jamu-jamu yang laris di pasaran karena efeknya yang cepat dalam mengobati berbagai penyakit seperti pegal linu, rematik, sesak napas, masuk angin dan suplemen kesehatan (Tahir dkk., 2018). Kasus tersebut menjadi bukti bahwa pengawasan terhadap produk jamu perlu terus ditingkatkan guna melindungi konsumen dari risiko penggunaan produk yang tidak memenuhi standar keamanan. Upaya ini dilakukan meliputi pengujian kandungan bahan aktif, verifikasi komposisi sesuai label, serta penindakan terhadap produsen yang terbukti menambahkan BKO secara ilegal.

2.3 Bahan Kimia Obat (BKO)

BKO merupakan campuran zat kimia yang biasanya ditambahkan ke dalam obat tradisional dengan tujuan memperkuat indikasi kegunaan atau manfaat dari obat tradisional tersebut serta memberikan efek kerja yang kuat dan cepat dalam menyembuhkan penyakit (BPOM, 2013). Penambahan ini dilakukan dengan tujuan memberikan khasiat yang lebih cepat dirasakan oleh konsumen, sehingga produk jamu terlihat lebih ampuh dan menarik secara komersial.

Meskipun BKO memiliki fungsi farmakologis yang sah ketika digunakan secara tepat dalam formulasi obat kimia, kehadirannya dalam sediaan tradisional seperti jamu menjadi berbahaya apabila tidak disertai pengawasan dosis dan aturan pakai. Produk jamu yang tercemar BKO, terutama bila dikonsumsi secara berkepanjangan atau bersamaan dengan bahan alami lain dalam jamu, dapat menimbulkan efek samping yang serius. Reaksi yang merugikan tersebut umumnya muncul akibat interaksi antar senyawa aktif, baik antar sesama BKO maupun antara BKO dan komponen jamu, terlebih jika penggunaannya tidak berdasarkan resep atau anjuran medis (Pradika, 2022).

Peningkatan kebutuhan konsumen terhadap produk jamu yang menawarkan khasiat cepat, serta persaingan industri jamu di pasar bebas, menjadi salah satu alasan utama penggunaan BKO dalam produk tradisional. Produsen jamu yang ingin meningkatkan daya saing produk sering kali tergoda untuk menambahkan BKO agar efek pengobatan dapat dirasakan dalam waktu singkat. Sayangnya, praktik ini justru mengaburkan makna sejati dari jamu sebagai pengobatan alami yang aman dan digunakan secara bertahap.

Berdasarkan pemeriksaan hasil yang dilakukan oleh BPOM menyatakan bahwa pada beberapa produk jamu sering ditambahkan dengan BKO yang dilakukan dengan sengaja. Sehingga dapat disimpulkan bahwa penggunaan obat-obatan golongan NSAID (Non-streoid Anti Inflamatory Drugs) ini cukup berperan dalam penambahan BKO dalam sediaan obat tradisional termasuk pada beberapa jenis jamu (Krishindardi dkk., 2023).

2.4 Ibuprofen

Ibuprofen adalah obat dalam golongan obat *antiinflamasi nonsteroid* (NSAID) yang digunakan untuk mengobati nyeri, demam, dan peradangan (Sunitha et al., 2022). Ibuprofen termasuk salah BKO yang sering ditemukan sebagai campuran tambahan dalam obat tradisional seperti jamu. Obat ini memiliki efek analgetik, antipiretik, dan antiinflamasi, sehingga sering digunakan untuk meredakan nyeri, demam, maupun peradangan, terutama pada kasus rematik dan nyeri otot. Karena efektivitasnya dalam mengurangi gejala secara cepat, ibuprofen menjadi salah satu BKO yang paling sering ditemukan dalam kasus penyalahgunaan pada produk jamu. Efek samping penggunaan ibuprofen dalam jangka panjang, khususnya jika dikonsumsi tanpa kontrol dosis, dapat mencakup gangguan saluran cerna seperti iritasi lambung, pendarahan gastrointestinal, bahkan kerusakan hati dan ginjal. Beberapa kasus yang jarang terjadi, namun serius, meliputi ulkus lambung, pankreatitis, dan perdarahan tersembunyi dalam saluran cerna (Wattiheluw dan Firdaus. 2023).

Dari sudut pandang biofarmasetika, ibuprofen termasuk dalam kelas II menurut *Biopharmaceutics Classification System* (BCS), yaitu golongan obat yang memiliki kelarutan rendah namun permeabilitas tinggi (Ferdiansyah dkk., 2018). Kelarutan rendahnya menyebabkan keterlambatan dalam proses absorpsi karena molekul obat harus dalam bentuk terlarut agar dapat melewati membran saluran cerna. Maka dari itu, molekul obat harus dalam keadaan terlarut agar dapat ditransfer melewati membrane saluran sel cerna, sehingga ketersediaan obat secara oral sangat bergantung pada kelarutan dan permeabilitasnya (Darusman dkk., 2021).

Secara fisik, ibuprofen berbentuk serbuk kristal putih dengan kelarutan dalam air sangat rendah (<1 mg/mL). Namun, ibuprofen mudah larut dalam pelarut organik seperti etanol, metanol, aseton, dan kloroform. Senyawa ini memiliki rumus molekul C₁₅H₁₈O₂ dengan titik leleh sekitar 75°C (Ningtyas dkk., 2015).

Ibuprofen dikategorikan sebagai molekul yang dominan non-polar. Hal ini ditunjukkan oleh nilai log P sebesar 3,75, sebagaimana diukur menggunakan pendekatan *Lipinski's Rule of Five* (Bachtiar dkk., 2021). Nilai log P yang tinggi menunjukkan bahwa senyawa tersebut bersifat lipofilik, lebih larut dalam lemak atau pelarut non-polar, dan cenderung tidak larut dalam air. Struktur kimia ibuprofen yang terdiri dari rantai alkil dan cincin aromatik memperkuat sifat hidrofobiknya, meskipun masih terdapat gugus karboksilat yang sedikit polar. Karakteristik ini memengaruhi distribusi ibuprofen di dalam tubuh, di mana senyawa ini lebih mudah terserap oleh jaringan tubuh yang bersifat non-polar seperti membran sel (Micell, 2010).

Karakteristik fisikokimia ibuprofen tersebut turut mendukung keberhasilannya dalam proses deteksi berbasis spektrum inframerah. Salah satu metode yang relevan dan efektif untuk mendeteksi keberadaan ibuprofen dalam sediaan jamu adalah spektrofotometri FTIR yang dikombinasikan dengan analisis kemometrika (Fahelelbom et al., 2023). Berikut ini merupakan struktur kimia ibuprofen disajikan pada Gambar 2.

Gambar 2. Struktur Kimia Ibuprofen (Ningtyas dkk., 2015).

2.5 Spektrofotometri Fourier Transfom Infrared FTIR

Spektrofotometri *Fourier Transfom Infrared* (FTIR) merupakan salah satu metode spektroskopi yang digunakan untuk mengidentifikasi gugus fungsi senyawa, baik dalam bentuk gas, cair, maupun padat, berdasarkan serapan terhadap radiasi inframerah (Shafirany dkk., 2018). Teknik ini menjadi metode standar dalam analisis struktur molekul, khususnya senyawa organik, karena mampu

memberikan informasi mendetail mengenai karakteristik vibrasi atom-atom dalam molekul. Prinsip kerja FTIR didasarkan pada interaksi antara gelombang elektromagnetik di daerah inframerah dengan momen dipol listrik dalam molekul. Ketika suatu senyawa dikenai radiasi inframerah, hanya ikatan-ikatan yang mengalami perubahan momen dipol yang akan menyerap energi tersebut. Proses penyerapan energi ini menyebabkan transisi molekul dari tingkat energi vibrasi dasar menuju tingkat energi vibrasi tereksitasi. Getaran tersebut bisa berupa vibrasi tarikan (*stretching*) maupun tekukan (*bending*), termasuk tekukan di luar bidang (*twisting* dan *wagging*) maupun di dalam bidang (*rocking*). Setiap gugus fungsi dalam suatu molekul memiliki frekuensi getaran khas yang menghasilkan spektrum serapan inframerah yang unik. Spektrum tersebut ditampilkan dalam bentuk grafik absorbansi terhadap bilangan gelombang (cm⁻¹), di mana setiap puncak menyatakan mode vibrasi spesifik dari suatu ikatan kimia. Oleh karena itu, spektrum FTIR dapat digunakan sebagai "sidik jari" molekul yang memungkinkan identifikasi komponen penyusun suatu sampel.

Secara analogi, vibrasi dalam molekul dapat dibandingkan dengan dua bola yang dihubungkan oleh pegas. Ketika energi inframerah diserap, bola-bola tersebut (dalam hal ini atom-atom) akan berosilasi lebih kuat. Setelah energi diserap, molekul berada dalam keadaan tereksitasi dan kemudian kembali ke keadaan dasar dengan melepaskan energi dalam bentuk panas (Raturandang dkk., 2022). Berikut gambaran dari instrumen spektrofotometer FTIR yang disajikan pada Gambar 3.

Gambar 3. Instrumen Spektrofotometer FTIR (Suseno dan Firdausi, 2008)

Dalam spektrofotometri FTIR, radiasi inframerah dilewatkan melalui sampel untuk mengamati interaksi antara cahaya dan molekul. Sebagian energi radiasi diserap oleh gugus fungsi dalam molekul, sedangkan sisanya diteruskan atau ditransmisikan. Hasil dari proses ini berupa spektrum inframerah, yang menampilkan pola serapan dan transmisi spesifik dari molekul dalam sampel. Setiap senyawa kimia memiliki spektrum khas yang unik, mirip dengan sidik jari, sehingga tidak ada dua senyawa berbeda yang menghasilkan spektrum inframerah yang benar-benar identik. Karakteristik ini menjadikan spektrofotometri FTIR sangat berguna dalam proses identifikasi dan autentikasi bahan kimia (Hulungo dkk., 2022).

Adapun keuntungan teknik Spektrofotometri FTIR ialah berpotensi sebagai metode analisis yang cepat karena dapat dilakukan secara langsung pada sampel tanpa adanya tahapan pemisahan terlebih dahulu. Kekurangan yang dapat ditimbulkan ialah dalam hal interpretasi secara visual menjadi sulit akibat adanya tumpang tindih spektrum serapan dari molekul-molekul dalam sampel, sehingga untuk memudahkannya diperlukan bantuan teknik kemometrika (Rafi dkk., 2016). Oleh karena itu pada penelitian ini digunakan analisis dengan spektrofotometri FTIR menggunakan metode yang dikombinasikan dengan kemometrika.

2.5.1 Prinsip FTIR

Prinsip dasar dari spektrofotometri FTIR adalah mengidentifikasi gugus fungsi dalam suatu senyawa berdasarkan penyerapan radiasi inframerah oleh molekul. Teknik ini mengukur panjang gelombang dan intensitas serapan cahaya inframerah yang terjadi ketika gelombang tersebut mengenai sampel. Setiap senyawa memiliki pola absorbansi khas yang berbeda, tergantung pada jenis ikatan dan struktur molekulnya, sehingga dapat dibedakan dan bahkan dikuantifikasikan berdasarkan spektrumnya (Sjahfirdi dkk., 2015). Adapun cara kerja FTIR pada proses analisis, sinar inframerah dari sumber cahaya dibagi menjadi dua jalur, masing-masing dialirkan ke sampel dan referensi. Ketika sinar melalui sampel, sejumlah energi diserap oleh ikatan kimia dalam molekul, sesuai

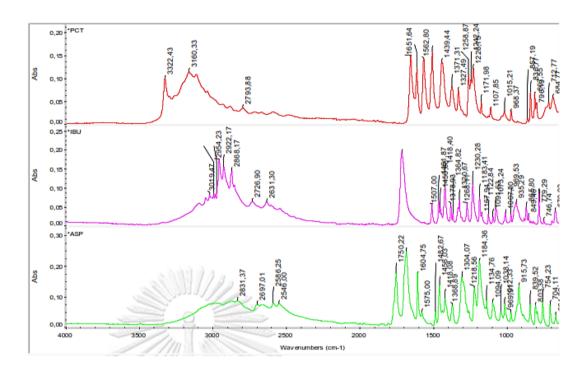
karakteristik vibrasinya. Berkas yang telah melewati sampel kemudian diarahkan ke detektor untuk diubah menjadi sinyal listrik, dan diolah menjadi spektrum oleh sistem komputer. Dengan demikian, setiap puncak dalam spektrum menunjukkan adanya gugus fungsi tertentu, yang dapat digunakan untuk mengidentifikasi senyawa secara akurat. Puncak-puncak yang muncul dalam spektrum FTIR menunjukkan serapan energi oleh ikatan kimia tertentu dalam molekul (Pradana dkk., 2017).

Dalam penerapannya, metode FTIR dapat digunakan dengan teknik *Attenuated Total Reflectance* (ATR) untuk mempermudah proses analisis, terutama pada sampel padat atau cair. Teknik ATR memungkinkan radiasi inframerah menembus lapisan tipis permukaan sampel dan menghasilkan spektrum yang representatif dengan waktu analisis yang singkat. Penelitian sebelumnya yang dilakukan oleh Theodore (2022) membuktikan efektivitas penggunaan FTIR-ATR dalam mendeteksi kandungan senyawa aktif seperti ibuprofen, aspirin, dan parasetamol pada produk jamu.

Senyawa ibuprofen diketahui memiliki ciri khas spektrum serapan yang muncul pada bilangan gelombang tertentu, yang berkaitan dengan keberadaan gugus karboksilat dan struktur aromatik dalam molekulnya. Profil spektrum tersebut dapat dikenali dengan jelas dan digunakan sebagai dasar identifikasi keberadaan ibuprofen dalam campuran kompleks. Spektrum ini menghasilkan pola serapan inframerah yang spesifik pada bilangan gelombang tertentu, sehingga dapat dikenali dengan mudah melalui spektrum FTIR. Adapun hasil spektrum dari ibuprofen sebagaimana dapat di lihat pada Gambar 4.

Berdasarkan spektrum yang didapatkan, telah ditunjukkan adanya daerah-daerah khas dari ibuprofen yang memang diharapkan muncul sesuai dengan karakteristik gugus fungsional penyusunnya. Daerah khas tersebut diantaranya yakni terdapat pada gugus karboksil yang diprediksi menunjukkan pita serapan utama sekitar 1730–1700 cm⁻¹, yang berkaitan dengan vibrasi stretching C=O dari gugus karbonil. Selain itu, pada gugus C-O dari asam karboksilat yang diindikasikan muncul sebagai pita di kisaran bilangan gelombang antara 1320–1210 cm⁻¹.

Cincin aromatik akan menunjukkan pita vibrasi di sekitar 1600–1475 cm⁻¹, yang berkaitan dengan vibrasi cincin aromatik C=C, dan pita sekitar 900–690 cm⁻¹ yang menunjukkan vibrasi C-H aromatik di cincin aromatik. Pita yang besar dan tajam di sekitar 3400–2400 cm⁻¹ juga dapat muncul karena vibrasi O-H dari gugus hidroksil yang berkaitan dengan asam karboksilat, meskipun sering terhalang oleh vibrasi air dan kelembapan



Gambar 4. Spektrum FTIR Parasetamol (PCT), Ibuprofen (IBU), dan Aspirin (ASP) dalam bentuk absorbansi (Theodore, 2022).

2.6 Metode Kemometrika

Istilah kemometrika pertama kali dikenalkan pada tahun 1971 oleh dua ilmuwan, yaitu Swante Wold dari Swedia dan Bruce R. Kowalski dari Amerika Serikat. Dalam bahasa Swedia, istilah ini dikenal dengan sebutan "kemometri", yang dalam bahasa Inggris disebut "*chemometrics*". Secara umum, kemometrika didefinisikan sebagai cabang ilmu pengetahuan yang mengaplikasikan teori matematika dan statistika untuk mengolah data kimia. Menurut definisi dari *International Chemometrics Society* (ISC), kemometrika adalah cabang ilmu yang

menghubungkan pengukuran yang dilakukan dalam proses atau sistem kimia dengan menggunakan prinsip-prinsip matematika dan statistika (Rohman, 2014). Perkembangan metode kemometrika menjadi semakin pesat sejak abad ke-20, seiring meningkatnya kompleksitas data yang dihasilkan oleh perangkat analitik modern yang bersifat multielemen dan multikomponen. Kemajuan teknologi komputer turut mempercepat adopsi metode ini, menjadikannya sebagai salah satu alat penting dalam analisis kimia yang memungkinkan proses pengolahan data dilakukan secara efisien dan akurat (Sendra *et al.*, 2012).

Kemometrika dapat digunakan untuk merancang atau memiliih prosedur pengujian yang optimal serta untuk memperoleh informasi dari data kimia sebanyak-sebanyaknya. Kemometrika berkaitan dengan pengukuran data multivariat, dimana data multivariat sendiri adalah data yang dihasilkan dari pengukuran banyak variabel pada satu sampel yang sama. Salah satu contoh penggunaan data multivariat dalam analisis misalnya penggunaan spektrofotometri FTIR adalah untuk melakukan analisis campuran obat dalam sampel dengan menggunakan kisarann frekuensi yang lebar (misal pada frekuensi $4000 - 400 \text{ cm}^{-1}$), sehingga jumlah variabel yang dihasilkan di sini sangat banyak (Rohman, 2014).

Adapun keunggulan dari metode ini, antara lain terletak pada efisiensi biaya, kemudahan operasional, serta kemampuannya menghasilkan informasi kuantitatif dari data kompleks. Pendekatan ini juga bersifat non-destruktif, sehingga cocok digunakan untuk berbagai sampel, termasuk dalam bidang pangan, farmasi, maupun bahan alami (Cendekiawan dkk., 2019). Kemometrika mengintegrasikan matematika, statistik, dan logika formal yang dapat menawarkan teori dan metode untuk pengukuran kimia, memberikan pendekatan baru untuk analisis berbagai jenis data pengukuran spektrofotometri FTIR atau pengukuran lain dalam kimia. (Mulyani dkk., 2021).

Dalam implementasinya, kemometrika digunakan untuk menyederhanakan struktur data yang memiliki korelasi antar variabel, sehingga informasi penting dapat diekstraksi secara lebih efisien. Salah satu teknik yang umum digunakan

adalah *Principal Component Analysis* (PCA), yaitu metode reduksi dimensi yang bertujuan mengubah sekumpulan variabel yang saling berkorelasi menjadi sejumlah kecil komponen utama yang tidak berkorelasi satu sama lain. Teknik ini memudahkan visualisasi pola, pengelompokan, serta klasifikasi sampel dalam ruang multivariat sehingga hubungan antar data dapat dipahami dengan lebih jelas.. Selain itu, metode *Partial Least Square* (PLS) digunakan dalam konteks prediksi, yaitu untuk membangun model regresi multivariat antara sekumpulan variabel bebas dan satu atau lebih variabel respon (Miller *and* Miller, 2010).

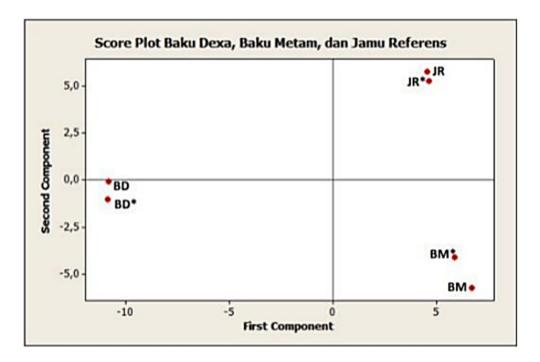
2.6.1 Principal Component Analysis (PCA)

Principal Component Analysis (PCA) termasuk sebagai metode yang paling sering digunakan untuk mengolah data multivariat atau suatu metode analisis perubah ganda yang bertujuan menyederhanakan perubah yang diamati dengan cara menyusutkan (mereduksi) dimensinya (Shafirany dkk., 2019). Metode ini bekerja dengan mentransformasikan variabel asli yang saling berkorelasi menjadi sejumlah kecil komponen utama yang tidak berkorelasi satu sama lain. PCA dapat digunakan untuk mengelompokkan objek dengan komponen utama yang memiliki sifat fisika atau kimia yang sama (A'layuda, 2019).

PCA bekerja dengan menerapkan transformasi ortogonal terhadap data asli sehingga menghasilkan sumbu koordinat baru yang mewakili arah variasi terbesar dalam data. Komponen utama pertama (PC1) menyimpan proporsi variasi terbesar, diikuti oleh komponen utama kedua (PC2) yang menyimpan variasi terbesar berikutnya dengan syarat tidak berkorelasi dengan PC1. Proses ini berlanjut pada komponen-komponen berikutnya hingga seluruh dimensi data terekspresikan secara efisien (*Principal Components* atau PC). Metode ini sangat bermanfaat dalam mengidentifikasi pola tersembunyi, klastering antar sampel, serta klasifikasi berdasarkan kesamaan karakteristik fisika atau kimia. PCA juga memungkinkan visualisasi data dalam ruang berdimensi dua atau tiga, sehingga dapat mempermudah pemetaan distribusi dan keterkaitan antar objek dalam kumpulan data.

Salah satu keunggulan dari PCA adalah kemampuannya mengurangi pengaruh *noise* atau kesalahan pengukuran dengan mempertahankan komponen-komponen yang menyimpan informasi dominan, sekaligus mengabaikan komponen yang mengandung variasi tidak signifikan. Dengan demikian, metode ini mendukung proses analisis yang lebih stabil dan efisien dalam pengolahan data kompleks seperti spektrum inframerah. Penerapan PCA dalam analisis kimia, termasuk dalam spektroskopi FTIR, telah terbukti efektif (Miller dan Miller, 2010).

Penelitian oleh Rahayu dkk. (2024) menunjukkan bahwa PCA yang dikombinasikan dengan FTIR dapat digunakan sebagai metode skrining yang cepat, non-destruktif, dan hemat biaya untuk mendeteksi keberadaan senyawa ilegal seperti metamizole dan deksametason dalam produk jamu. Dalam penelitian tersebut, PCA digunakan untuk mengeksplorasi hubungan antar sampel berdasarkan pola spektrum yang dihasilkan, yang kemudian divisualisasikan melalui *score* plot sebagai bentuk representasi distribusi data multivariat. Hasil *score* plo tersebut dapat dilihat padat Gambar 5.



Gambar 5. Hasil *Score* Plot dari Metamizol (BM), Dexametason (BD) dan Sampel Jamu Rederen (JR) (Rahayu dkk., 2024)

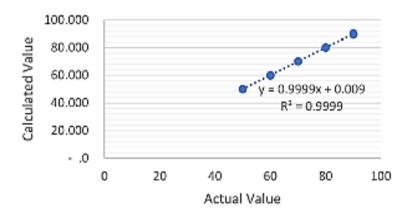
Hasil analisi PCA *score* plot pada bilangan gelombang 4000-500 cm menunjukkan terdapat 3 kelompok yaitu dexametason, metamizol dan sampel jamu referen. Terpisahnya titik-titik tersebut memberikan penjelasan bahwa adanya perbedaan sifat fisik maupun sifat kimianya antar kelompok dari dexametason, metamizol dan sampel jamu referen (Rahayu dkk., 2024).

2.6.2. Partial Least Square (PLS)

Partial Least Square (PLS) merupakan salah satu metode regresi multivariat yang digunakan untuk memodelkan hubungan antara sejumlah besar variabel prediktor (independen) dan satu atau lebih variabel respon (dependen). Teknik ini bekerja dengan mengubah variabel asal menjadi kombinasi linier yang dikenal sebagai latent variables atau faktor laten. PLS sangat bermanfaat ketika data memiliki kolinearitas tinggi, banyak variabel bebas, serta ketika pola hubungan dalam data bersifat sistematis dan linier (Miller dan Miller, 2010).

PLS dikembangkan untuk mengatasi keterbatasan regresi linier klasik yang tidak mampu menangani data dengan korelasi antar variabel yang tinggi. Dalam metode ini, variabel prediktor yang paling berkontribusi terhadap respon diberi bobot lebih tinggi, sehingga informasi paling relevan akan lebih ditekankan dalam model. Setiap komponen PLS dihitung dengan memaksimalkan kovarians antara fungsi linier dari variabel prediktor (X) dan variabel respon (Y), sehingga model yang dihasilkan mampu menggambarkan keterkaitan antar variabel secara optimal (Rohman., 2019). Metode ini menghubungkan dua matriks data, yaitu data spektrum hasil pengukuran dan nilai referensi, melalui pendekatan algoritma peringkat minimum (minimum rank approximation). Teknik ini memungkinkan pemodelan hubungan linier yang kuat meskipun terdapat banyak variabel yang saling berkorelasi (Singh et al., 2013). PLS juga dikenal sebagai metode kalibrasi multivariat yang efektif dalam analisis kuantitatif berbasis spektroskopi, termasuk FTIR. Keunggulan metode ini terletak pada kemampuannya dalam menangani sejumlah besar data input tanpa perlu reduksi awal, serta kemampuannya menghasilkan prediksi yang akurat dengan tingkat presisi yang tinggi.

Penelitian oleh Rahayu dkk. (2024), telah dilakukan analisis kandungan metamizole dan deksametason dalam jamu pegal linu dilakukan dengan menggabungkan teknik spektroskopi FTIR dan kemometrika, di mana metode PLS digunakan untuk menganalisis lima seri konsentrasi deksametason dalam campuran dengan jamu referensi. Hasil model regresi yang diperoleh divisualisasikan dalam bentuk kurva kalibrasi seperti yang ditampilkan pada Gambar 6.



Gambar 6 Regresi PLS dari campuran biner sampel jamu referen dan deksametason (Rahayu dkk., 2024).

Hasil kalibrasi pada campuran sampel jamu referensi dan deksametason menunjukkan nilai RMSEC sebesar 0,325 dan koefisien determinasi (R²) sebesar 0,999. Nilai RMSEC (*Root Mean Square Error of Calibration*) merupakan ukuran tingkat kesalahan atau deviasi antara hasil prediksi model dengan nilai aktual pada data kalibrasi. Semakin kecil nilai RMSEC, maka semakin kecil kesalahan prediksi, dan dalam hal ini, nilai 0,325 menunjukkan bahwa model kalibrasi memiliki akurasi yang baik (Rohman, 2014).

Sementara itu, nilai R² sebesar 0,999 mengindikasikan bahwa model kalibrasi yang dibangun memiliki hubungan yang sangat kuat antara nilai prediksi dengan nilai aktual yang diperoleh dari instrumen FTIR. Semakin mendekati angka 1, maka semakin tinggi tingkat kecocokan model terhadap data. Oleh karena itu, nilai R² mencerminkan kemampuan model dalam memprediksi kadar deksametason dalam campuran jamu secara sangat akurat (Shafirany dkk., 2019).

III METODE PENELITIAN

3.1. Waktu dan Tempat

Penelitian dilaksanakan pada bulan Agustus 2024 hingga Desember 2024 yang berlokasi di Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN) Tanjung Bintang, Lampung Selatan.

3.2 Alat dan Bahan

3.2.1 Alat

Alat-alat yang digunakan pada penelitian ini adalah satu unit alat Spektrofotometer FTIR-ATR INVENIO R yang dilengkapi Software Horizon MB, neraca analitik, mortar, alu, kertas perkamen, plastik klip, spatula, gunting, tisu, *cooper*, perangkat lunak Software Minitab 21, dan vial 5 mL.

3.2.2 Bahan

Bahan-bahan yang digunakan pada penelitian ini adalah etanol 96%. Standar bahan baku obat ibuprofen (BPFI) yang diperoleh dari PPPOMN. 10 merek yang berbeda sampel obat tradisional (jamu kemasan) yang diperoleh dari pasar di Kota Bandar Lampung. Jamu simulasi dibuat dengan bahan diantaranya jahe (*Zingiber officinale*), kunyit (*Curcuma longa*), temulawak (*Curcuma xanthorrhiza*), serai (*Cymbopogon citratus*), dan kencur (*Kaempferia galanga*).

3.3 Prosedur Penelitian

3.3.1 Pemilihan Sampel

Proses pemilihan sampel, dapat disebut juga sebagai proses sampling sampel, dimana proses ini merupakan salah satu tahapan proses penelitian. Pada proses pemilihan sampel ini sendiri, memiliki banyak metode yang dapat digunakan oleh para peneliti. Namun, pada penelitian kali ini metode pemilihan sampelnya dilakukan secara acak. Tujuan dari pelaksanaan tahapan pengambilan sampel ini adalah untuk mengurangi penyimpangan persepsi (bias) dan juga memastikan bahwa sampel yang dipilih dapat dianggap sudah mewakili populasi dengan baik. Sehingga, pada hasil penelitian nanti nya dapat diterapkan secara lebih umum terhadap jumlah sampel yang lebih banyak atau terhadap populasi dengan tingkat akurasi sesuai dengan yang sudah diharapkan dan direncanakan oleh seorang peneliti (Asrulla dkk., 2023).

Pada penelitian ini dipilih sejumlah 10 merek sampel jamu kemasan yang berbeda dengan berbagai jenis jamu diantaranya yaitu jamu yang dapat berkhasiat untuk pegal linu, jamu rematik, jamu kuat, stamina, diet, bersalin dan lain-lain. Adapun keterangan daftar merek/jenis jamu dapat dilihat pada lampiran 4. Pemilihan jamu dilakukan dengan melihat khasiat yang tertera pada kemasannya dan difokuskan pada beberapa jamu dengan harga yang murah, dengan anggapan merupakan jamu yang banyak dibeli oleh masyarakat karena harganya terjangkau.

3.3.2 Preparasi Sampel

3.3.2.1 Preparasi Standar Ibuprofen

Standar BKO berupa ibuprofen yang digunakan dalam penelitian ini diperoleh dari Pusat Pengembangan Pengujian Obat dan Makanan Nasional (PPPOMN), yang berada di bawah naungan Badan Pengawas Obat dan Makanan Republik Indonesia (BPOM). PPPOMN merupakan lembaga resmi yang berwenang

menyediakan bahan referensi standar untuk keperluan analisis mutu dan keamanan obat, makanan, serta produk kesehatan lainnya (BPOM, 2021). Ibuprofen standar yang diperoleh memiliki sertifikat analisis dan tingkat kemurnian yang tinggi. Adapun untuk penyiapan Standar BKO Ibuprofen ditimbang sebanyak 0,015 mg menggunakan neraca analitik kemudian dianalisis menggunakan instrumen FTIR.

3.3.2.2 Preparasi Jamu Herbal Simulasi

Pembuatan jamu herbal (jamu simulasi) dilakukan dengan mencuci bersih seluruh bahan herbal yang terdiri atas 75 g jahe, 75 g kunyit, 50 g temulawak, 2 batang serai, dan 50 g kencur. Pencucian dilakukan di bawah air yang mengalir dengan tujuan untuk menghilangkan sisa kotoran dan mengurangi resiko kontaminasi dari bakteri. Setelah bersih, semua bahan dikeringkan dengan cara dijemur diatas terik matahari hingga kering. Selanjutnya bahan – bahan tersebut dihaluskan menggunakan blender hingga diperoleh serbuk halus (Yuliana *et al.*, 2023). Kemudian serbuk yang dihasilkan diuji menggunakan spektrofotometer FTIR lalu dilanjutkan dengan analisis menggunakan minitab dan diperoleh hasil sebagai data kualitatif PCA. Adapun gambar pembuatan jamu simulasi dapat dilihat di lampiran 1.

3.3.3 Preparasi Jamu Kemasan

Preparasi sampel jamu dalam penelitian ini dilakukan dengan masing-masing sepuluh merk sampel jamu dimasukkan ke dalam mortar, kemudian ditumbuk secara perlahan menggunakan mortar hingga diperoleh bentuk serbuk yang halus dan homogen. Setelah proses penumbukan selesai, serbuk jamu dari masing-masing sampel dibungkus dengan menggunakan kertas perkamen bersih guna menjaga kebersihan serta mencegah kontaminasi silang antar sampel. Selanjutnya, sampel yang telah dibungkus tersebut dimasukkan ke dalam plastik klip berlabel

dan disegel dengan rapi untuk menjaga stabilitas dan integritas bahan sebelum dilakukan proses analisis lebih lanjut menggunakan metode spektrofotometri FTIR.

3.3.4 Preparasi Kalibrasi dan Validasi

Pembuatan set kalibrasi dan set validasi dilakukan dengan cara mencampurkan standar Ibuprofen dengan jamu herbal simulasi dalam proporsi tertentu. Masingmasing disiapkan sebanyak 0,045 mg. Setelah itu, seluruh sampel dibagi menjadi dua kelompok utama yaitu penyiapan set kalibrasi dan set validasi.

3.3.4.1 Pembuatan Set Kalibrasi

Set kalibrasi merupakan kumpulan sampel dengan komposisi yang sudah diketahui sebelumnya dan berfungsi sebagai dasar dalam pembentukan model klasifikasi menggunakan pendekatan kemometrikaa (Berrueta *et al.*, 2007). Sampel-sampel dalam set kalibrasi ini dibuat dengan variasi konsentrasi yang berkisar dari 0% hingga 100%. Semua campuran tersebut kemudian dianalisis menggunakan instrumen spektrofotometer FTIR. Informasi mengenai perbandingan berat antara Ibuprofen dan campuran jamu herbal simulasi dalam setiap sampel dapat ditemukan pada Tabel 1.

Tabel 1. Perbandingan Berat Set Kalibrasi

No	Ibuprofen	Standar Jamu	Konsentrasi	Kategori
1	0 mg	15 mg	0%	Murni
2	3 mg	12 mg	20%	Campuran
3	6 mg	9 mg	40%	Campuran
4	9 mg	6 mg	60%	Campuran
5	12 mg	3 mg	80%	Campuran
6	15 mg	0 mg	100%	Murni

3.3.4.2 Pembuatan Set Validasi

Set validasi terdiri atas campuran sampel-sampel yang komposisinya telah diketahui sebelumnya, namun penggunaannya ditujukan untuk mengevaluasi keandalan atau reliabilitas model klasifikasi yang telah ditentukan berdasarkan set validasi (Berrueta *et al.*, 2007). Campuran yang digunakan dalam set validasi mencakup kombinasi antara bahan baku standar Ibuprofen dengan jamu herbal simulasi. Masing-masing sampel dengan variasi konsentrasi mulai dari 0% hingga 100%. Semua campuran tersebut kemudian dianalisis menggunakan instrumen spektrofotometer FTIR untuk memperoleh spektrum yang merepresentasikan komposisinya. Informasi mengenai perbandingan berat antara Ibuprofen dengan jamu herbal simulasi dalam setiap sampel dapat dilihat pada Tabel 2.

Tabel 2. Perbandingan Berat Set Validasi

No	Ibuprofen	Standar Jamu	Konsentrasi	Kategori
1	0 mg	15 mg	0%	Murni
2	1,5 mg	13,5 mg	10%	Campuran
3	4,5 mg	10,5 mg	30%	Campuran
4	7,5 mg	7,5 mg	50%	Campuran
5	10,5 mg	4,5 mg	70%	Campuran
6	13,5 mg	1,5 mg	90%	Campuran
7	15 mg	0 mg	100%	Murni

3.3.5 Pengukuran FTIR

Penggunaan Spektrofotometri FTIR terlebih dahulu dipastikan alat dalam kondisi siap digunakan dengan menyalakan perangkat FTIR dan komputer yang terhubung. Sebelum melakukan pengukuran, lakukan pembersihan kristal ATR menggunakan tisu dan pelarut etanol, kemudian lakukan *background scan* tanpa sampel untuk menghilangkan gangguan dari lingkungan. Selanjutnya, sampel set kalibrasi dan sampel set validasi, serta 10 sampel jamu merek berbeda yang telah

disiapkan siapkan masing masing diletakkan serbuk pada kristal ATR dan tekan dengan *clamp* agar menempel sempurna. Setelah sampel siap, jalankan pengukuran dengan menekan tombol *Scan* pada perangkat lunak dan tunggu hingga spektrum muncul di layar. Setelah pengukuran selesai, bersihkan kembali kristal ATR dengan pelarut etanol agar tidak terjadi kontaminasi pada pengukuran berikutnya. Semua spektra direkam pada 4000 sampai 400 cm⁻¹. Terakhir, simpan spektrum yang diperoleh dalam format yang diinginkan.

3.3.6 Analisis Data Kemometrika

Adapun cara penggunaan metode PCA menggunakan *software* Minitab 19, dilakukan dengan cara sebagai berikut:

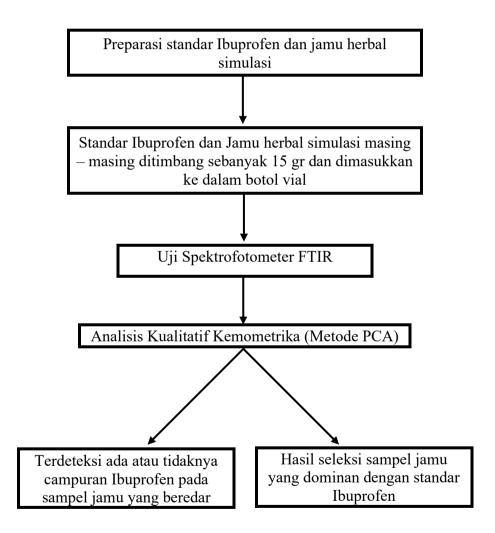
- a. Buka Minitab 19, kemudian masukkan data ke dalam worksheet.
- b. Pilih menu Stat → Multivariate → Principal Components.
- c. Masukkan variabel-variabel yang akan dianalisis ke dalam kotak "Variables".
- d. Klik tombol Graph untuk memilih tampilan grafik yang diinginkan.
- e. Klik OK untuk memulai analisis dan menampilkan hasil score plot.
- f. Untuk menambahkan label pada tiap titik di score plot:
 - Klik kanan pada grafik.
 - Pilih Add → Data Labels.
 - Centang opsi Use labels from column.
- g. Klik OK, maka grafik PCA dengan label akan muncul (Rohman dkk., 2021).

Analisis menggunakan metode PLS menggunakan *software* Minitab 19 dengan cara sebagai berikut:

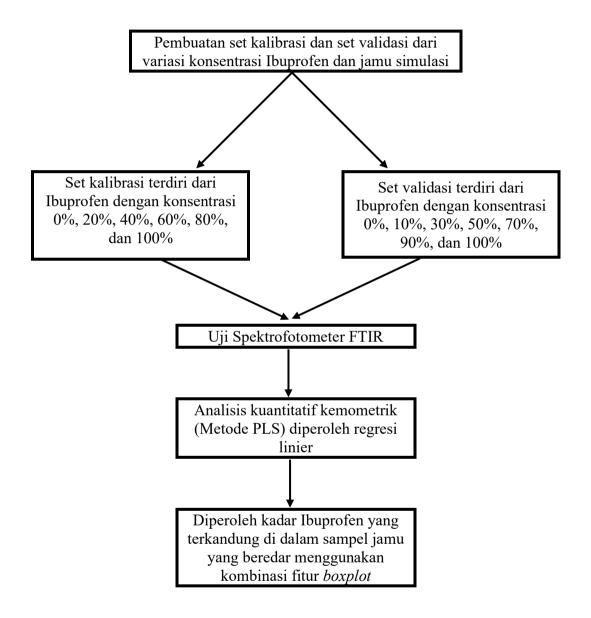
- a. Buka software Minitab 19.
- b. Masukkan data ke dalam worksheet.
- c. Pilih menu Stat \rightarrow Regression \rightarrow Partial Least Squares.
- d. Masukkan variabel X (prediktor) dan Y (respon).

- e. Untuk melakukan validasi Leave-One-Out, klik tombol Options:
- f. Pilih Leave-One-Out pada bagian validation.
- g. Klik OK.
- h. Klik OK kembali untuk menjalankan analisis.
- i. Output hasil PLS akan ditampilkan, baik dalam bentuk nilai statistik maupun grafik (Rohman dkk., 2021).

3.4 Skema Penelitian:



Adapun tahap analisis kuantitatif adalah sebagai berikut :



V.KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Dari hasil penelitian yang diperoleh, didapatkan beberapa kesimpulan sebagai berikut:

- Hasil analisis kualitatif dengan PCA menunjukkan bahwa ibuprofen tidak terdeteksi dalam berbagai merk sampel jamu yang beredar di Kota Bandar Lampung.
- 2. Berdasarkan hasil dari penelitian ini bahwa Metode spektrofotometri FTIR yang dikombinasikan dengan kemometrika terbukti efektif, akurat, efisien, dan ramah lingkungan dalam mendeteksi BKO seperti ibuprofen.
- 3. Berdasarkan hasil analisis nilai kumulatif varians sebesar 92,4% menunjukkan bahwa dua komponen utama (PC1 dan PC2) sudah cukup untuk menjelaskan variasi data.antar sampel dan standar.
- 4. Model PLS menunjukkan akurasi tinggi dengan nilai R² sebesar 0,999853 (kalibrasi) dan 0,999719 (validasi).
- 5. Tingkat kesalahan yang diperoleh sangat rendah yakni masing-masing untuk set kalibrasi dan validasi sebesar 0,0001026% dan 0,0002531% yang menegaskan keandalan model untuk analisis kuantitatif.

5.2 Saran

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, diperlukan analisis tambahan sebagai penunjang data untuk melihat hasil uji yang lebih baik dan disarankan untuk menggunaan perangkat lunak statistik lainnya seperti The Unscrambler,

SIMCA, atau MATLAB agar hasil analisis kemometrika dapat dibandingkan dan dievaluasi lebih lanjut. Selain itu, perlu dilakukan pengujian terhadap lebih banyak sampel dari berbagai wilayah dan diperlukan model analisis lain untuk membandingkan agar data yang diperoleh menjadi lebih kuat dan dapat diterapkan secara lebih luas.

DAFTAR PUSTAKA

- Andayani, R., Kesumaningrum, D., Nisa, D., Husni, E., Suryati., Sofyan., dan Dachriyanus. 2023. Analisis Rendang Daging Sapi Dan Daging Babi Hutan Menggunakan Metode Spektroskopi FTIR Kombinasi Kemometrik Untuk Autentikasi Halal. *Jurnal Sains Farmasi & Klinis*. 10(1): 78.
- Asrulla., Risnita., Jailani, S. M., and Jeka, F. 2023. Populasi Dan Sampling (Kuantitatif), Serta Pemilihan Informan Kunci (Kualitatif) Dalam Pendekatan Praktis. *Jurnal Pendidikan Tambusai*. 7(3): 26320–32.
- Bachtiar., Roesman, K., Susanti, S., dan Mardianingrum, R. 2021. Uji Aktivitas Antiinflamasi Senyawa dalam Minyak Atsiri Rimpang Bangle (Zingiber Purpureum Roxb) Secara In Silico. *Journal of Pharmacopolium*. 4(1): 36–43.
- Berrueta., Luis, A., Rosa, M., Alonso-Salces., dan Héberger, K. 2007. Supervised Pattern Recognition in Food Analysis. *Journal of Chromatography A*. 1(2): 196–214.
- Bosque, S, Cuadros-Rodríguez, J. M., Ruiz-Samblás, L., and dela, M. A. P. 2012. Combining Chromatography and Chemometrics for the Characterization and Authentication of Fats and Oils from Triacylglycerol Compositional Data—A Review. *Journal of Analytical Chemistry*. 724: 1–11.
- Cendekiawan, K. A., Winarso, S., dan Marchianti, A. C. N. 2019. Surveilans Penyalahgunaan Bahan Kimia Sintetis Deksametason Pada Jamu Pegal Linu Menggunakan Metode Near Infra Red Dan Kemometrik. *Multidisciplinary Journal*. 2(1): 30.
- Darsyah, M.Y. 2014. Penggunaan Stem and Leaf Dan Boxplot Untuk Analisis Data. *Jurnal Pendidikan Matematika*. 1(1): 55–67.
- Darusman, F. 2021. Pengaruh Pembentukan Kompleks Inklusi Ibuprofen-B-Siklodekstrin Dengan Metode Kopresipitasi Terhadap Kelarutan Dan Laju Disolusi. *Jurnal Ilmiah Farmasi Farmasyifa*. 4(2): 12–21.
- Delİce, A. 2001. The Sampling Issues in Quantitative Research. *Educational Sciences: Theory & Practices* 10(4): 2001–19.

- Fauziah, M. L., dan Herdiana. 2021. Gambaran Penggunaan Obat Tradisional Pada Masyarakat Desa Pulo Secara Swamedikasi. *Jurnal Sains Dan Kesehatan Darussalam*.1(1): 37–50.
- Dirgantara, V. s., Zulfikar., dan Andarini, N. 2014. Identifikasi Kualitatif Bahan Analgesik Pada Jamu Menggunakan Prototype Tes Strip (Qualitative Identification of Analgesic Compounds in Herbal Medicine With Prototype Test Strip). *Berkala Sainstek*. 2(1): 42–48.
- Djasfar, S. P., dan Pradika, Y. 2022. Analisis Bahan Kimia Obat Dalam Jamu Tradisional Pegal Linu Kemasan Yang Beredar Di Marketplace. *Jurnal Medical Laboratory*. 1(2):18-26.
- Vera, Y., dan Yanti, S. 2020. Penyuluhan Pemanfaatan Tanaman Obat Dan Obat Tradisional Indonesia Untuk Pencegahan Dan Penanggulangan Penyakit Hipertensi Di Desa Salam Bue. *Jurnal Education and Development*. 8(1): 11–14.
- Sidoretno, W. M., dan Oktaviani, R. I. 2018. Edukasi Bahaya Bahan Kimia Obat Yang Terdapat Didalam Obat Tradisional. *Jurnal Pengabdian Masyarakat Multidisiplin*. 23(4): 1–16.
- Ferdiansyah, R., Yola, D. S., Hamdani, S., dan Julianto, A. 2018. Peningkatan Kelarutan Dan Disolusi Ibuprofen Melalui Pembentukan Mikropartikel Metode Emulsification-Ionic-Gelation Menggunakan Polivinil Alkohol (PVA) Sebagai Polimer Tripolifosfat (TPP) Sebagai Agen Crosslink. *Indonesian Journal of Pharmaceutical Science and Technology*. 4(3): 118.
- Fikayuniar, Lia., dan Abriyani, E. 2020. Daerah Karawang Barat Qualitative Analysis of the Content of Prednisone Chemicals in Rheumatism Herb and Aching Pains Herbs. *Pharma Xplore*. 5(2): 68–75.
- Hartutik, S., dan Gati.N. W 2021. Pengaruh Kompres Kayu Manis (Cinnamomun Burman) Terhadap Nyeri Arthritis Gout Pada Lansia. *Jurnal Ilmu Keperawatan Komunitas*. 4(2): 40–51.
- Herdini, S. L. N., dan Hadi, V. 2021. Analisis Teofilin dalam Jamu Sesak Napas Sediaan Serbuk yang Beredar di Kota Bekasi Secara KLTP, Spektrofotometri UV/VIS dan FTIR. *Teknosains : Jurnal Sains, Teknologi dan Informatika*. 8(2): 100–108.
- Hulungo, C., Wenas, D., dan Rondonuwu, A. 2022. Identifikasi Komposisi Mineral Batuan Teralterasi Menggunakan Spektroskopi SEM-EDX Dan FTIR Pada Daerah Manifestasi Panas Bumi Di Desa Mototompiaan Kecamatan Modayg Kabupaten Bolaang Mongondow Timur. *Jurnal FisTa: Fisika dan Terapannya.* 3(1): 8–12.
- Krishindardi, A. Y., Utami, M. R., dan Gatera, V. A. 2023. Identifikasi Bahan Kimia Obat Fenilbutazon Pada Jamu Pegal Linu Yang Beredar Di Kabupaten

- Karawang. Jurnal Bidang Ilmu Kesehatan. 13(3): 257-64.
- Kumalasari, E., Linda, F. W., dan Riza, A. 2018. Analisis Kualitatif Kandungan Ibuprofen Dalam Jamu Pegal Linu Yang Beredar Di Pasar Baru Permai Banjarmasin. *Jurnal Pharmascience*. 5(01): 32–38.
- Lathif, A. 2023. Analisis Bahan Kimia Obat Dalam Jamu Pegal Linu yang Dijual di Surakarta Menggunakan Metode Spektrofotometri UV. Skripsi.
- A'layuda, R. 2019. Validasi Metode Analisis Kandungan Fenilbutason Dalam Produk Jamu Pegal Linu Dengan Metode Ftir Dikombinasikan Dengan Kemometrika. F Skripsi.
- Micell, J. 2010. Validasi Metode Penetapan Kadar Campuran Parasetamol Dan Ibuprofen Dengan Perbandingan 7:4 Menggunakanmetode Kromatografi Cair Kinerja Tinggi Fase Terbalik. Skripsi
- Miller, J., and Miller, J. C. 2010. *Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry*. Pearson Education Limited. England.
- Muliasari, H., Ananto, A. D., dan Andayani, Y. 2019. Inovasi Dan Peningkatan Mutu Produk Jamu Pada Perajin Jamu Gendong Di Kota Mataram. *Prosiding Pepadu*. 1: 72–77.
- Mulyani, S., Meilina, H., dan Munawar, E. 2021. Fourier Transform Infrared Spectroscopy Dan Chemometrics: Analisis Boraks Pada Bakso. *Jurnal Inovasi Ramah Lingkungan (JIRL)*. 2(2): 11–16.
- Ningtyas, Karisma., dan Piluharto, B. 2015. Identifikasi Ibuprofen, Ketoprofen Dan Diklofenak Menggunakan Test Strip Berbasis Reagen Spesifik Yang Diimobilisasi Pada Membran Nata De Coco. *Jurnal Ilmu Dasar*. 16(2): 49–54.
- Novianty, R., Jasril, S. D., dan Muhdarina. 2023. Penyuluhan Pemanfaatan Daun Sambiloto (Andrographis Paniculata) Sebagai Imunostimulan Di Puskesmas Simpang Tiga Pekanbaru. *Jurnal Pengabdian Masyarakat Nusantara*. 4(1): 1608–12.
- Pradana, M. A., Ardhyananta, H., dan Farid, M. 2017. Pemisahan Selulosa Dari Lignin Serat Tandan Kosong Kelapa Sawit Dengan Proses Alkalisasi Untuk Penguat Bahan Komposit Penyerap Suara. *Jurnal Teknik ITS*. 6(2): 413–16.
- Pratiwi, R., Dipadharma, R., Prayugo, I. J., and Layandro, O. 2021. Recent Analytical Method for Detection of Chemical Adulterants in Herbal Medicine. Molecules. 26. 6606.
- Rafi, M., Anggundari, W. C., dan Irawadi, T. T. 2016. Potensi Spektroskopi FT-IR-ATR Dan Kemometrik Untuk Membedakan Rambut Babi, Kambing, Dan Sapi. *Indo. J. Chem. Sci.* 5(3): 229–34.

- Rahayu, W. S., Buono, E. C., & Raharjo, A. S. 2024. Analisis Cepat Kandungan Metamizole dan Deksametason pada Jamu Pegal Linu dengan Metode FTIR Kombinasi dengan Kemometrik. *Pharmacy: Jurnal Farmasi Indonesia* (*Pharmaceutical Journal of Indonesia. 20*(2), 178-182.
- Rasyida, K., Kuswandi, B., dan Kristiningrum, N. 2014. Deteksi Kemurnian Air Zamzam Menggunakan Metode Spektrofotometri Fourier Transform Infrared (FTIR) Dan Kemometrik. *e-Jurnal Pustaka Kesehatan*. 2(2): 320–26.
- Raturandang, R., Wenas, D. R., Mongan, S., dan Bujung, C. 2022. Analisis Spektroskopi Ftir Untuk Karakterisasi Kimia Fisik Fluida Mata Air Panas Di Kawasan Wisata Hutan Pinus Tomohon Sulawesi Utara. *Jurnal FisTa*: *Fisika dan Terapannya*. 3(1): 28–33.
- Rohman, A., Irnawati., dan Risnawanto, F, D, O. 2021. *Kemometrika. Gadjah Mada University Press.* Yogyakarta.
- Rohman, A. 2019. Statistika dan Kemometrika Dasar dalam Ilmu Farmasi. *Pustaka Pelajar*. Bogor.
- Saputra, S. A. 2015. Chemical Identification Herbal Medicine Packaging And. *Jurnal Wiyata*. 2(2): 188–92.
- Shafirany, M. Z., Susilawati, Y., dan Musfiroh, I. 2019. Aplikasi Kemometrik Dalam Penentuan Mutu Tumbuhan Obat. *Pharmauho: Jurnal Farmasi, Sains, dan Kesehatan.* 4(2): 6–14.
- Siddiqui, Z., Khan, M. I., Badrudden., Akhtar, J., dan Ahmed, M. 2023. In Vitro Antioxidant Activity, Pharmacognostical Evaluation, HPTLC and FTIR Fingerprinting of Phyllanthus Acidus L. Stem Bark Extract for Better Application in Phytotherapy. *Biomedical and Pharmacology Journal*. 16(3): 1381–93.
- Singh, S. S., Jha, S. S., Chaudary, A., Yadava, R. D. S., dan Rai, S. B. 2010. Quality Control of Herbal Medicines by Using Spectroscopic Techniques and Multivariate Statistical Analysis. *Pharmaceutical Biology*. 48(2): 134–41.
- Sjahfirdi, L., Aldi, N., Maheshwari, H., dan Astuti, P. 2015. Aplikasi Fourier Transform Infrared (FTIR) dan Pengamatan Pembengkakan Genital Pada Spesies Primata, Lutung Jawa (Trachypithecus Auratus) untuk Mendeteksi Masa Subur. *Jurnal Kedokteran Hewan Indonesian Journal of Veterinary Sciences*. 9(2).
- Sudibyo, S., Herman, M. J., dan Yuniar, Y. 2011. Penggunaan Jamu Buatan Sendiri Di Indonesia (Analisis Data Riset Kesehatan Dasar Tahun 2010). *Buletin Penelitian Sistem Kesehatan*. 14(4): 375–81.
- Sunitha, N., Paul, P., Monika, A., D, Sravya., P, Sagar., V, Jaswanth., Y, Lalitha., and S, Manohar. 2022. Method development and validation of ibuprofen

- obtained from the extraction of bougainvillea campanulata flowers by UV spectrophotometry, FTIR and TLC method. *International Journal of Pharmaceutical Chemistry and Analysis*. 9(2):93-98.
- Suryatinah, Y., Mery, B. S., Wijaya, N. R., dan Tjandrarini, D. H. 2020. Eksplorasi Dan Inventarisasi Tumbuhan Obat Lokal Berpotensi Sebagai Antiinflamasi Di Tiga Suku Dayak, Kalimantan Selatan. *Buletin Plasma Nutfah*. 26(1): 63.
- Susanty, S., dan Bachmid, F. 2016. Perbandingan Metode Ekstraksi Maserasi Dan Refluks Terhadap Kadar Fenolik Dari Ekstrak Tongkol Jagung (Zea Mays L.). *Jurnal Konversi*. 5(2): 87.
- Suseno, J. E., dan Firdausi, K.S. 2008. Rancang Bangun Spektroskopi FTIR Untuk Penentuan Kualitas Susu Sapi. *jurnal Berkala Fisika*. 11(1): 23–28.
- Tahir., Masdiana, M., dan Wahdania, A. 2018. Analisis Bahan Kimia Obat Natrium Diklofenak Pada Sediaan Jamu Pegal Linu Yang Beredar Di Makassar. *Window of Health: Jurnal Kesehatan* 1(4): 311–17.
- Theodore, Mario. 2022. Chula Digital Collections Chemometric Attenuated Total Reflectance Fourier Transform Infrared Spectroscopy Method for Routine Screening of Paracetamol, Ibuprofen, and Aspirin Adulteration in Herbal Medicines Fourier Transform Infrared Spectroscopy Method. *Chulalongkorn University Theses and Dissertations (Chula ETD)*. Thailand.
- Wattiheluw, M. H., dan Firdaus, A. N. 2023. Analisis Kualitatif Bahan Kimia Obat Ibuprofen Pada Jamu Pegal Linu Yang Dijual Di Pasar Besar Kota Malang Dengan Metode Kromatografi Lapis Tipis. *Nutriture Journal*. 3(2): 168–74.
- Wulandari, R. 2014. Etnobotani Jamu Gendong Berdasarkan Persepsi Produsen Jamu Gendong Di Desa Karangrejo, Kecamatan Kromengan, Kabupaten Malang. *Jurnal Biotropika*. 2(4): 198–202.
- Yudoyono, B. 2017. Spektrometri. Simetri. Palembang.
- Yuliana, M., Kartika, C., dan Arisandi, D. 2023. Pelatihan Pembuatan Jamu Herbal pada Komunitas Ibu PKH di Desa Sungai Pinang. *Jurnal Pengabdian Masyarakat Bangsa*. 1(7): 1044-1055.