

**IDENTIFIKASI KANDUNGAN METAMIZOL PADA JAMU PEGAL
LINU MENGGUNAKAN METODE SPEKTROFOTOMETRI FOURIER
TRANSFORM INFRARED (FTIR) DAN KEMOMETRIKA**

(Skripsi)

Oleh

**Rahmadina Pratiwi
NPM 2117011088**



**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS LAMPUNG
BANDAR LAMPUNG
2025**

**IDENTIFIKASI KANDUNGAN METAMIZOL PADA JAMU PEGAL
LINU MENGGUNAKAN METODE SPEKTROFOTOMETRI FOURIER
TRANSFORM INFRARED (FTIR) DAN KEMOMETRIKA**

Oleh

Rahmadina Pratiwi

Skripsi

**Sebagai Salah Satu Syarat Untuk Mencapai Gelar
SARJANA SAINS**

Pada

**Jurusan Kimia
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Lampung**



**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS LAMPUNG
BANDAR LAMPUNG
2025**

ABSTRAK

IDENTIFIKASI KANDUNGAN METAMIZOL PADA JAMU PEGAL LINU MENGGUNAKAN METODE SPEKTROFOTOMETRI FOURIER TRANSFORM INFRARED (FTIR) DAN KEMOMETRIKA

Oleh

Rahmadina Pratiwi

Penggunaan jamu pegal linu secara luas di Indonesia menimbulkan kekhawatiran terhadap penambahan bahan kimia obat (BKO) seperti metamizol yang dapat membahayakan kesehatan. Metamizol merupakan senyawa analgesik dan antipiretik yang efektif, namun memiliki potensi efek samping serius jika digunakan tanpa pengawasan.

Penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi kandungan metamizol dalam sampel jamu pegal linu yang beredar di Kota Bandar Lampung dengan menggunakan metode *Fourier Transform Infrared* (FTIR) dan analisis kemometrika. Sebanyak sembilan sampel jamu diperoleh dari toko jamu dan pasar tradisional, serta dibuat jamu referensi dari bahan herbal seperti kunyit, jahe, dan temulawak. Pengukuran spektrum FTIR dilakukan pada rentang bilangan gelombang $4000\text{--}650\text{ cm}^{-1}$, kemudian dianalisis secara kualitatif menggunakan *Principal Component Analysis* (PCA) dan secara kuantitatif menggunakan *Partial Least Square* (PLS).

Hasil PCA menunjukkan bahwa sebagian besar sampel memiliki pola spektrum yang serupa dengan jamu referensi, kecuali satu sampel yaitu JH 4 yang menunjukkan kemiripan dengan spektrum metamizol. Model PLS yang dibangun dari set kalibrasi menunjukkan nilai koefisien determinasi (R^2) sebesar 0,999797 dan nilai RMSEC sebesar 1,42%, sedangkan pada set validasi diperoleh R^2 sebesar 0,99986 dan RMSEP sebesar 0,0672%, yang menunjukkan tingkat akurasi prediksi yang tinggi. Penelitian ini membuktikan bahwa kombinasi metode FTIR dan kemometrika efektif untuk mendeteksi keberadaan dan kadar metamizol secara cepat, akurat, dan ramah lingkungan.

Kata Kunci: Metamizol, jamu pegal linu, FTIR, kemometrika, PCA, PLS

ABSTRACT

IDENTIFICATION OF METAMIZOLE CONTENT IN JAMU PEGAL LINU USING FOURIER TRANSFORM INFRARED (FTIR) SPECTROPHOTOMETRY AND CHEMOMETRICS

By

Rahmadina Pratiwi

The widespread use of jamu pegal linu (herbal medicine for muscle aches) in Indonesia has raised concerns over the addition of pharmaceutical chemicals (BKO) such as metamizole, which can pose health risks. Metamizole is an effective analgesic and antipyretic compound but carries the potential for serious side effects when used without supervision. This study aims to identify the presence of metamizole in jamu pegal linu samples available in Bandar Lampung using Fourier Transform Infrared (FTIR) spectrophotometry combined with chemometric analysis. Nine samples were obtained from herbal stores and traditional markets, and reference jamu was prepared using herbal ingredients such as turmeric, ginger, and temulawak. FTIR spectral measurements were conducted in the range of 4000–650 cm^{-1} , then analyzed qualitatively using Principal Component Analysis (PCA) and quantitatively using Partial Least Squares (PLS). PCA results showed that most samples had spectral patterns similar to the reference jamu, except for one sample, JH 4, which closely resembled the metamizole spectrum. The PLS model built from the calibration set yielded a coefficient of determination (R^2) of 0.999797 and an RMSEC of 1.42%, while the validation set showed an R^2 of 0.99986 and an RMSEP of 0.0672%, indicating high prediction accuracy. This study demonstrates that the combination of FTIR and chemometric methods is effective for rapidly, accurately, and environmentally-friendly detection of the presence and concentration of metamizole.

Keywords: Metamizole, jamu pegal linu, FTIR, chemometrics, PCA, PLS

Judul Skripsi

: **IDENTIFIKASI KANDUNGAN
METAMIZOL PADA JAMU PEGAL
LINU MENGGUNAKAN METODE
SPEKTROFOTOMETRI *FOURIER*
TRANSFORM INFRARED (FTIR) DAN
KEMOMETRIKA**

Nama Mahasiswa

: **Rahmadina Pratiwi**

Nomor Pokok Mahasiswa

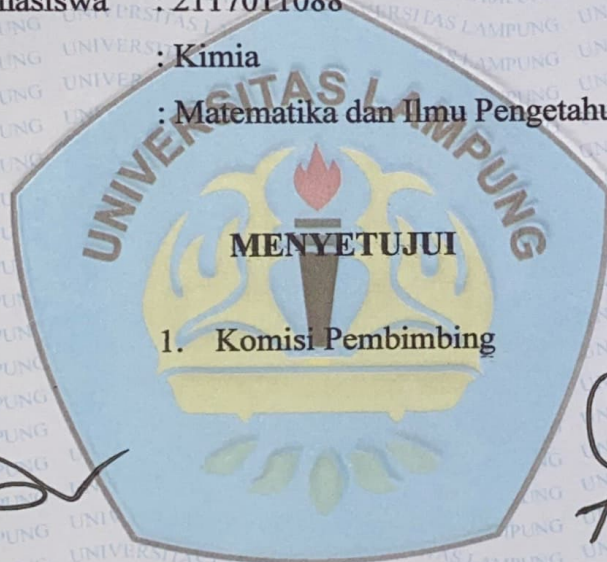
: **2117011088**

Program Studi

: **Kimia**

Fakultas

: **Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam**



1. **Komisi Pembimbing**

Dr. Sonny Widiarto, M.Sc.

NIP. 197110301997031003

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

NIP. 198203272015021002

2. **Ketua Jurusan Kimia FMIPA Universitas Lampung**

Prof. Dr. Mita Rilyanti, M.Si.

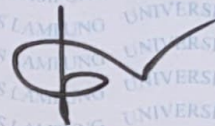
NIP. 197205302000032001

MENGESAHKAN

1. Tim Penguji

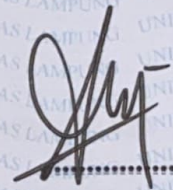
Ketua

: Dr. Sonny Widiarto, M.Sc.



Sekretaris

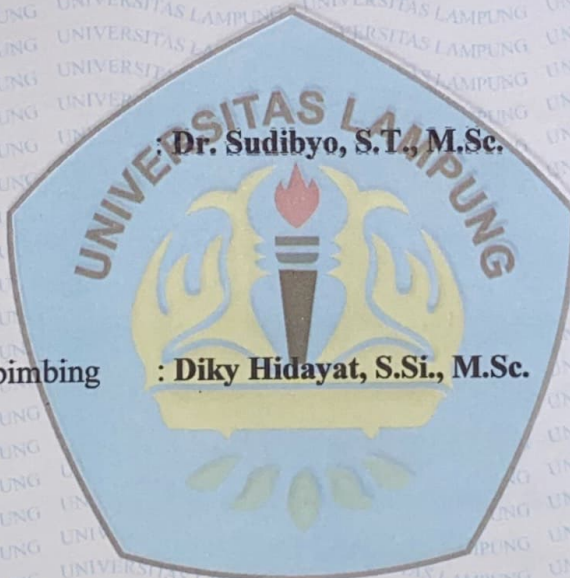
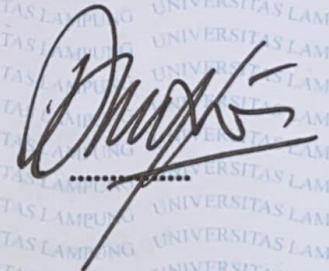
: Dr. Sudibyo, S.T., M.Sc.



Penguji

Bukan Pembimbing

: Diky Hidayat, S.Si., M.Sc.



2. Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam



Dr. Eng. Heri Satria, S.Si., M.Si
NIP. 197110012005011002

Tanggal Lulus Ujian Skripsi : 05 Agustus 2025

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : Rahmadina Pratiwi
Nomor Pokok Mahasiswa : 2117011088
Jurusan : Kimia
Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Perguruan Tinggi : Universitas Lampung

Dengan ini menyatakan bahwa skripsi saya yang berjudul **“Identifikasi Kandungan Metamizol pada Jamu Pegal Linu Menggunakan Metode Spektrofotometri *Fourier Transform Infrared* (FTIR) dan Kemometrika”** adalah hasil pekerjaan saya sendiri, dan sepengetahuan saya tidak ada karya atau pendapat yang ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini sebagaimana disebutkan dalam daftar pustaka, serta dapat diterima sebagai persyaratan penyelesaian studi pada Universitas atau Institut lainnya.

Bandar Lampung, 20 Agustus 2025

Yang Menyatakan



Rahmadina Pratiwi

RIWAYAT HIDUP



Penulis bernama lengkap Rahmadina Pratiwi, lahir di Kota Bandar Lampung, pada tanggal 09 November 2002. Penulis adalah anak terakhir dari dua bersaudara yang merupakan anak dari pasangan Bapak Rebudin dan Ibu Husnawati. Mempunyai kakak yang bernama Angga Julian Pratama. Penulis saat ini bertempat tinggal di Jalan Basuki Rahmat Gg. Rajawali,

Kelurahan Pengajaran, Kecamatan Teluk Betung Utara, Kota Bandar Lampung, Lampung.

Pendidikan penulis diawali dari Taman Kanak-Kanak TK Al-Hukama dan lulus pada tahun 2008, kemudian melanjutkan pendidikan di SDN 1 Pengajaran dan lulus pada tahun 2014. Penulis melanjutkan pendidikan di SMPN 3 Bandar Lampung dan lulus pada tahun 2017, setelah itu penulis melanjutkan sekolah di SMK SMTI Bandar Lampung dan lulus pada tahun 2020. Penulis terdaftar sebagai Mahasiswa Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Lampung melalui jalur SBMPTN pada tahun 2021.

Selama menempuh pendidikan di Jurusan Kimia, penulis mengikuti aktivitas organisasi yang dimulai menjadi Kader Muda Himpunan Mahasiswa Kimia (HIMAKI) dan terpilih menjadi anggota Bidang Sosial Masyarakat (SOSMAS) pada periode 2021/2022. Penulis melaksanakan kegiatan Kuliah Kerja Nyata (KKN) di Desa Gebang, Kecamatan Teluk Pandan, Kabupaten Pesawaran pada Januari-Februari 2024. Penulis mengikuti MBKM Magang Industri di Balai Pengujian Kesehatan Ikan dan Lingkungan (BPKIL) Serang pada Agustus-Desember 2023 dengan judul “Penentuan Kadar Amonia pada Sampel Air Laut

dengan Metode Spektrofotometri UV-Vis di Laboratorium Kualitas Air Balai Pengujian Kesehatan Ikan dan Lingkungan (BPKIL) Serang”. Pada tahun 2025 penulis dapat menyelesaikan penelitian yang dilakukan di Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN) Tanjung Bintang, Lampung Selatan dengan judul “Identifikasi Kandungan Metamizol pada Jamu Pegal Linu Menggunakan Metode Spektrofotometri *Fourier Transform Infrared* (FTIR) dan Kemometrika”.

MOTTO

“Allah tidak akan membebani seseorang melainkan sesuai dengan kemampuannya”

(Q.S. Al-Baqarah 2:286)

“Maka sesungguhnya bersama kesulitan ada kemudahan”

(Q.S. Al-Insyirah: 5)

“Hatiku tenang karena mengetahui bahwa apa yang melewatkanmu tidak akan pernah menjadi takdirku, dan apa yang ditakdirkan untukmu tidak akan pernah melewatkanmu”

(Umar bin Khatab)

“Life can be heavy, especially if you try to carry it all at once , part of growing up and moving into new chapters of your life is about catch or release. what I mean by that is, knowing what things to keep and what things to release. you can't carry all things, all grudges, all updates on your ex, all enviable promotions your school bully got at the badge fund his uncle started, decide who is yours to hold and let the rest go.”

~Taylor Swift~

“Tidak ada mimpi yang terlalu tinggi. Tak ada mimpi yang patut diremehkan. Lambungkan setinggi yang kau inginkan dan gapailah dengan selayaknya yang kau harapkan.”

-Maudy Ayunda-

“Hidup bukan saling mendahului, bermimpilah sendiri-sendiri”

-Baskara Putra-

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

Dengan menyebut nama Allah yang Maha Pengasih lagi Maha Penyayang

*Atas Rahmat Allah SWT dengan mengucapkan
Alhamdulillahilalamin dan dengan segala kerendahan hati
Ku persembahkan karya kecilku ini kepada*

*Kedua orang tuaku tercinta,
Bapak Rebutin dan Ibu Husnawati
Yang telah mendidik, menyayangi, mencintai, merawat, dan terima kasih atas
segala do'a, kesabaran, keikhlasan, serta nasehat, sehingga putrimu dapat
menyelesaikan studi ini.*

*Saudaraku tersayang,
Abang Angga Julian Pratama serta seluruh keluarga besar
yang selalu mendoakan, memberikan dukungan, dan kasih sayang.*

*Dengan segala rasa hormat kepada,
Bapak Dr. Sonny Widiarto, M.Sc., Bapak Dr. Sudibyo, S.T., M.Sc., dan Bapak
Diky Hidayat, S.Si., M.Sc.
Terima kasih atas ilmu, nasihat, dan kesabaran dalam membimbing Dan
mendidikku hingga menyelesaikan pendidikan Sarjana.*

*Bapak dan Ibu Dosen Jurusan Kimia
atas dedikasi dan seluruh ilmu yang telah diberikan.*

*Sahabat dan seluruh teman-temanku yang selalu memberikan
semangat, kebahagiaan, dukungan, dan pelajaran hidup.*

*Keluarga Besar
dan
Almamater Tercinta Universitas Lampung*

SANWACANA

Alhamdulillahirabbil'alamiin. Puji syukur kehadiran Allah SWT atas segala nikmat dan karunia-Nya sehingga penulis mampu menyelesaikan skripsi ini. Sholawat serta salam selalu tercurahkan kepada Baginda Nabi Muhammad SAW beserta keluarga dan sahabat, semoga kita mendapatkan syafa'at-Nya di yaumil akhir nanti, aamiin yaarabbal'alamin. Skripsi ini berjudul "**Identifikasi Kandungan Metamizol pada Jamu Pegal Linu Menggunakan Metode Spektrofotometri *Fourier Transform Infrared* (FTIR) dan Kemometrika**", yang merupakan salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana sains (S.Si) pada Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lampung.

Penyusunan skripsi ini tidak terlepas dari bimbingan, bantuan, saran, kritik, dan do'a dari berbagai pihak. Sebagai wujud rasa hormat, penulis mengucapkan banyak terima kasih kepada:

1. Kepada orang tuaku tercinta, Ayah Rebudin dan Almh. Ibu Husnawati yang selalu menjadi penyemangat penulis dan sandaran terkuat dari kerasnya dunia. Terima kasih penulis ucapkan atas segala dukungan baik secara moral maupun finansial, cinta, kasih sayang, do'a, ketulusan, keikhlasan, dan pengorbanan yang diberikan dalam membesarkan penulis selama ini, serta menjadi motivasi penulis untuk selalu kuat dan dapat menyelesaikan skripsi ini dengan baik. Untuk Ibu sosok yang sangat penulis rindukan, kini anakmu telah berhasil menyelesaikan apa yang sudah dimulai dan terima kasih telah menjadi alasan penulis untuk tetap semangat menjalani hidup. Meski kehadiranmu singkat di dunia ini namun, penulis yakin cintamu tetap hidup, menyatu dalam langkah dan do'a yang mengiringi penulis setiap hari.

2. Kakakku tercinta, Abang Angga Julian Pratama yang telah menemani, mendengarkan keluh kesah penulis, memberi dukungan, masukan, mendo'akan penulis, Serta telah menjadi penyemangat dan sosok kakak yang baik untuk penulis.
3. Bapak Dr. Sonny Widiarto, M.Sc., selaku Dosen Pembimbing I yang telah memberikan ilmu, bantuan, saran, motivasi, nasihat, semangat, kesabaran, dan bimbingan terbaiknya, sehingga penulis dapat menyelesaikan penelitian dan skripsi ini. Terima kasih karena telah menjadi inspirasi dan motivasi bagi penulis dalam segala hal. Semoga Allah SWT senantiasa memberikan ridho-Nya dan membalas semua kebaikan bapak dengan keberkahan Aamiin.
4. Bapak Dr. Sudibyo, S.T., M.Sc., selaku Pembimbing II, atas segala bimbingan, saran, nasihat, arahan, dan ilmu yang bermanfaat kepada penulis dalam penyelesaian penelitian dan skripsi ini. Semoga Allah SWT membalas segala kebaikan Bapak.
5. Bapak Diky Hidayat, S.Si., M.Sc., selaku Dosen Pembahas yang telah memberikan ilmu, arahan, saran, dan kritik kepada penulis sehingga skripsi ini dapat terselesaikan dengan baik.
6. Bapak Prof. Wasinton Simanjutak, Ph.D., selaku Dosen Pembimbing Akademik, penulis ingin mengucapkan terima kasih atas bimbingan, motivasi, dan nasihat dalam membimbing penulis terkait permasalahan akademik selama masa perkuliahan penulis di Jurusan Kimia FMIPA Universitas Lampung.
7. Bapak Dr. Eng. Heri Satria, S.Si., M.Si., selaku Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lampung.
8. Ibu Prof. Dr. Mita Rilyanti, S.Si., M.Si., selaku ketua Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lampung.
9. Bapak dan Ibu Dosen Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lampung atas seluruh ilmu, bimbingan, dan pengalaman yang telah diberikan kepada penulis.
10. Staff dan karyawan administrasi Jurusan Kimia FMIPA Unila yang telah memberikan bantuan kepada penulis.

11. Kakak-kakak *Sonny Research* 20, Kak Dwi, Kak Sylfi, Kak Safitri, dan Kak Anin, atas segala bantuan, arahan, dan ilmu yang diberikan kepada penulis sehingga skripsi ini terselesaikan dengan baik.
12. *Sonny Research* 21, Ririn, Pretty, Nurmala, dan Haya sebagai teman seperbimbingan serta seperjuangan bersama-sama dalam menyelesaikan penelitian dan skripsi ini. Penulis ucapkan banyak terima kasih karena telah membantu, memberi dukungan, mendengarkan keluh kesah, menemani masa-masa penelitian dan penulisan skripsi penulis, serta bekerja sama dengan penulis, sehingga penelitian dan skripsi ini dapat terselesaikan dengan baik dan lancar.
13. Staff Laboratorium dan karyawan Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN) Tanjung Bintang, yang telah membantu dalam proses penelitian penulis, sehingga penulis dapat menyelesaikan penelitian ini dengan baik.
14. Sahabat penulis yang sudah dianggap seperti saudara sendiri, Yesha Pramudita, S.Si., terima kasih telah menemani penulis dari masa maba perkuliahan hingga selesainya masa perkuliahan ini, yang selalu jadi tempat berkeluh kesah, menemani penulis baik susah maupun senang, seseorang yang menjadi *support system* penulis, yang selalu menemani penulis. Terima kasih karena sudah selalu ada dan membuat perjalanan perkuliahan ini menjadi lebih menyenangkan.
15. Sahabat +7 tersayang, Yesha Pramudita, S.Si., Azzahra Sandra S, S.Si., Sabina Clarissa LN, S.Si., Sefty Yustisia S, S.Si., Amelia Normalita, S.Si., dan Alysha Mutiara S, S.Si., terima kasih sudah menemani, berjuang bersama dari awal semester perkuliahan hingga sekarang, memberikan semangat, selalu mendukung dan ada disaat momen penting penulis, serta memberikan kebahagiaan dan lelucon lucu yang membuat penulis merasakan masa perkuliahan ini menjadi lebih berkesan dan menyenangkan.
16. Sahabat 4piby, Salsa, Putri, dan Sella, yang telah menemani penulis dari masa bangku SMK hingga saat ini, terima kasih karena selalu mendukung, memberi semangat, do'a, memberi saran dan bantuan, serta menjadi pendengar yang baik untuk penulis.

17. Sahabat YKKA, Salwa, Igo, Azril, dan Novral, yang telah menemani penulis dari masa SMP hingga saat ini. Terima kasih telah memberikan dukungan, menjadi tempat untuk berkeluh kesah, dan ada disaat penulis suka maupun duka.
18. Kimia B 21, yang telah kebersamai penulis dari semester awal hingga akhir semester perkuliahan ini.
19. Teman-teman Kimia 21, atas segala bantuan dan kerjasamanya selama menjadi mahasiswa Jurusan Kimia.
20. Teman kecil penulis, Salsa atas semangat, dukungan, serta kebaikan yang diberikan kepada penulis.
21. Semua pihak yang tidak dapat penulis sebutkan satu persatu, yang telah memberikan dukungan dalam berbagai bentuk selama proses penyusunan skripsi ini.
22. Diri saya sendiri, Rahmadina Pratiwi. Terima kasih yang sebesar-besarnya kerana telah berjuang dan bertahan hingga saat ini, menghadapi dan melewati semua rintangan yang mungkin mengira sulit untuk melewatinya namun, ternyata semua itu telah berhasil dilewati. Terima kasih untuk tetap hidup dan tidak menyerah ketika keadaan memaksamu untuk menyerah. Jadilah seseorang yang tidak pernah lelah untuk selalu berusaha dan bermanfaat bagi banyak orang. *Last but not least, i wanna thank me for believing in me, i wanna thank me for doing all this hard work, i wanna thank me for having no days off, i wanna thank me for never quitting.*

Bandar Lampung, 20 Agustus 2025

Penulis,

Rahmadina Pratiwi

DAFTAR ISI

	Halaman
DAFTAR TABEL	vii
DAFTAR GAMBAR.....	viii
I. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Tujuan Penelitian.....	3
1.3 Manfaat Penelitian.....	4
II. TINJAUAN PUSTAKA.....	5
2.1 Bahan Kimia Obat	5
2.2 Jamu.....	6
2.3 Jamu Pegal Linu	8
2.4 Metamizol.....	9
2.5 Spektrofotometri <i>Fourier Transfom Infrared</i> (FTIR).....	11
2.6 Kemometrika	15
2.7 <i>Principal Component Analysis</i> (PCA).....	17
2.8 <i>Partial Least Square</i> (PLS)	19
III. METODE PENELITIAN.....	23
3.1 Waktu dan Tempat Penelitian.....	23
3.2 Alat dan Bahan	23
3.3 Prosedur Penelitian	23
3.3.1 Sampling Sampel	23
3.3.2 Preparasi Standar Metamizol.....	24
3.3.3 Preparasi Jamu Pegal Linu Referensi	24
3.3.4 Kalibrasi dan Validasi.....	24
3.3.5 Analisis dengan Menggunakan Spektrofotometer FTIR	25
3.3.6 Analisis Data Kemometrika.....	26
3.3.7 Analisis PCA dan PLS	26
3.4 Skema Penelitian	28
IV. HASIL DAN PEMBAHASAN.....	30
4.1 Pengantar	30

4.2 Lokasi Sampling	30
4.3 Preparasi Standar	31
4.3.1 Preparasi Standar Metamizol	31
4.3.2 Preparasi Standar Jamu Referensi	31
4.4 Hasil Karakterisasi Spektrum FTIR	31
4.4.1 Spektrum FTIR Standar Metamizol dan Jamu Referensi	31
4.4.2 Sampel Jamu di Pasaran	33
4.5 Analisis Kemometrika Metode <i>Principal Component Analysis</i> (PCA).....	35
4.6 Hasil Karakterisasi Spektrofotometri <i>Fourier Transform</i> <i>Infrared</i> (FTIR)	41
4.6.1 Set Kalibrasi dan Set Validasi	41
4.6.2 Set Validasi.....	42
4.7 Analisis Kemometrika Metode <i>Partial Least Square</i> (PLS).....	44
4.7.1 Pembuatan Set Kalibrasi dan Klasifikasi Set Kalibrasi.....	45
4.7.2 Pembuatan Set Validasi dan Klasifikasi Set Validasi	46
V. KESIMPULAN DAN SARAN.....	48
5.1 Kesimpulan.....	48
5.2 Saran	49
DAFTAR PUSTAKA	50
LAMPIRAN.....	56

DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
1. Set Kalibrasi Campuran Standar Metamizol dan Jamu Referensi.....	25
2. Set Validasi Campuran Standar Metamizol dan Jamu Referensi	25
3. Nilai Eigen Korelasi dengan Matriks	36

DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
1. Struktur Molekul Metamizol	10
2. Instrumen Spektrofotometer FTIR	12
3. Spektrum FTIR Metamizole dan Deksametason pada Panjang Gelombang 4000-650 cm^{-1}	14
4. Hasil <i>Score Plot</i> pada bilangan gelombang 4000-500 cm^{-1} dari metamizol (BM), dexametason (BD) dan sampel jamu rederen (JR)	19
5. Regresi PLS dari Campuran Biner Sampel Jamu Referen dan Metamizol pada Bilangan Gelombang 400-4000 cm^{-1}	22
6. Bagan Alir Penelitian Analisis Secara kualitatif	28
7. Bagan Alir Penelitian Analisis Secara Kuantitatif.....	29
8. Peta Lokasi Pengambilan Sampel.....	31
9. Spektrum FTIR Standar Metamizol dan Jamu Referensi	32
10. Spektrum FTIR Sampel di Pasaran	34
11. Spektrum FTIR Standar Metamizol dan Sampel JH 4	35
12. <i>Score Plot</i> Standar Metamizol dan Jamu Referensi	37
13. <i>Score Plot</i> PCA Standar Metamizol, Jamu Referensi, dan Sampel Jamu Pegal Linu	38
14. <i>Score Plot</i> PCA Set Kalibrasi dan Sampel Jamu Pegal Linu	39
15. Plot 3D PCA Standar Metamizol, Jamu Referensi, dan Sampel Jamu Pegal Linu	40
16. Plot 3D PCA Set Kalibrasi dan Sampel Jamu Pegal Linu.....	41
17. Spektrum FTIR Set Kalibrasi	42
18. Spektrum FTIR Set Validasi.....	43

19.	Model PLS Set Kalibrasi	45
20.	Model PLS Set Validasi	46

I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Penggunaan obat tradisional, khususnya jamu, semakin meningkat di tengah masyarakat. Jamu dipilih karena dianggap lebih aman, minim efek samping, dan harganya lebih terjangkau dibandingkan obat sintetis. Salah satu jenis jamu yang populer adalah jamu pegal linu, yang dikenal berkhasiat untuk mengatasi nyeri otot, rematik, dan asam urat (Gitawati, 2013). Di negara-negara Asia, sekitar 50% populasi menggunakan obat herbal, dan Indonesia merupakan salah satu negara dengan tingkat konsumsi jamu yang tinggi (Elfahmi *et al.*, 2014). Jamu pegal linu dapat dibeli bebas tanpa resep dokter, sekitar 40% penggunanya mengonsumsinya secara rutin selama satu tahun (Aronson *et al.*, 2010). Khasiat jamu berasal dari bahan alami seperti tumbuhan, hewan, atau mineral, baik dalam bentuk murni maupun kombinasi (Fernanda dan Wardani, 2022). Tingginya permintaan jamu ini juga membuka peluang terjadinya pemalsuan produk, terutama dengan penambahan Bahan Kimia Obat (BKO) untuk meningkatkan efek terapeutik. Salah satu BKO yang umum disalahgunakan dalam jamu pegal linu adalah metamizol, yang berfungsi sebagai analgesik dan antipiretik (BPOM, 2006). Meskipun metamizol efektif untuk meredakan nyeri, penggunaannya dalam jangka panjang tanpa pengawasan medis dapat menimbulkan efek samping serius seperti agranulositosis, gangguan pencernaan, dan gangguan ginjal (Kurniawati *et al.*, 2012).

Pengawasan terhadap BKO pada jamu menjadi sangat penting. BPOM telah menarik sejumlah produk jamu dari peredaran karena terbukti mengandung BKO yang membahayakan konsumen (Ariffin *et al.*, 2021). Adanya bahan kimia

sintetis dalam jamu yang diklaim alami sangat bertentangan dengan tujuan pengobatan tradisional sehingga, diperlukan metode analisis yang cepat, akurat, dan ramah lingkungan untuk mendeteksi keberadaan BKO dalam jamu. Berbagai metode analisis telah digunakan untuk mendeteksi keberadaan metamizol dalam produk herbal, baik secara kualitatif maupun kuantitatif. Metode yang paling umum digunakan antara lain Kromatografi Cair Kinerja Tinggi (KCKT/HPLC), Kromatografi Lapis Tipis (KLT), dan Kromatografi Gas (GC), yang dikenal memiliki sensitivitas dan selektivitas tinggi dalam mengidentifikasi senyawa kimia obat. Spektrofotometri UV-Vis dan Spektrometri Massa (MS) juga sering dimanfaatkan untuk analisis metabolit dan senyawa aktif dalam produk farmasi. Namun, metode-metode tersebut memerlukan waktu analisis yang lama, penggunaan pelarut organik, serta proses preparasi sampel yang kompleks. Sebagai alternatif, Spektrofotometri *Fourier Transform Infrared* (FTIR) menjadi pilihan karena lebih cepat, ramah lingkungan, membutuhkan jumlah sampel yang kecil, dan bersifat non-destruktif. FTIR mampu menghasilkan spektrum inframerah yang mencerminkan karakteristik gugus fungsi kimia dalam sampel, sehingga sangat berguna dalam mengidentifikasi adanya senyawa asing seperti bahan kimia obat (BKO) dalam produk herbal.

Penggabungan FTIR dengan metode kemometrika seperti *Principal Component Analysis* (PCA) dan *Partial Least Square* (PLS) juga telah terbukti mampu meningkatkan akurasi dalam menganalisis campuran kompleks. PCA digunakan untuk menyederhanakan data spektrum yang sangat besar dan kompleks menjadi beberapa komponen utama (*principal components*) yang mampu menjelaskan variabilitas data paling signifikan. Melalui PCA, sampel dapat diklasifikasikan berdasarkan kemiripan atau perbedaan pola spektralnya, sehingga mempermudah dalam identifikasi keberadaan metamizol pada jamu. (Rohaeti *et al.*, 2015). Metode PLS digunakan untuk membangun model prediksi kuantitatif antara data spektrum FTIR dan konsentrasi metamizol. PLS sangat efektif digunakan ketika data prediktor (dalam hal ini absorbansi FTIR pada berbagai bilangan gelombang) memiliki hubungan multikolinear dan kompleks terhadap variabel respons (konsentrasi metamizol). Kombinasi PCA dan PLS memungkinkan penelitian ini tidak hanya mampu mendeteksi secara kualitatif keberadaan metamizol dalam

sampel jamu, tetapi juga mampu memprediksi kadarnya secara akurat berdasarkan model kalibrasi yang dibangun. Keefektifan kombinasi FTIR dan kemometrika juga telah dibuktikan oleh beberapa penelitian sebelumnya Rohaeti *et al.* (2015) berhasil membedakan ekstrak kunyit dan temulawak menggunakan kombinasi FTIR dan PCA, sedangkan Cebi *et al.* (2017) mampu mendeteksi pemalsuan dalam produk madu dengan FTIR dan PLS. Fatmarahmi. (2021) dalam penelitiannya juga menunjukkan bahwa kombinasi FTIR dan kemometrika mampu membedakan dengan baik antara jamu murni dan jamu yang tercemar metamizol oleh karena itu, penggunaan metode FTIR yang dikombinasikan dengan kemometrika PCA dan PLS dalam penelitian ini dipandang sebagai pendekatan yang cepat, akurat, dan efisien dalam mendeteksi keberadaan metamizole pada jamu pegal linu yang beredar di pasaran Kota Bandar Lampung.

1.2 Tujuan Penelitian

Tujuan dilakukannya penelitian ini adalah:

1. Mengidentifikasi kandungan metamizol dalam jamu pegal linu yang beredar di Kota Bandar Lampung menggunakan metode spektrofotometri *Fourier Transform Infrared* (FTIR) yang dikombinasikan dengan analisis kemometrika.
2. Menganalisis kemurnian sampel jamu pegal linu secara kualitatif melalui pengelompokan data spektrum menggunakan metode *Principal Component Analysis* (PCA).
3. Membangun model prediksi kuantitatif kadar metamizol dalam sampel jamu pegal linu menggunakan metode *Partial Least Square* (PLS).
4. Menilai akurasi dan keandalan model kalibrasi dan validasi yang dikembangkan untuk memprediksi kadar metamizole dalam jamu dengan indikator nilai *Coefficient of Determination* (R^2) dan *Root Mean Square Error of Calibration* (RMSEC).

1.3 Manfaat Penelitian

Manfaat dari penelitian ini adalah:

1. Memberikan kontribusi dalam pengembangan metode analisis cepat dan akurat untuk mendeteksi keberadaan Bahan Kimia Obat (BKO) seperti metamizol dalam produk jamu dengan memanfaatkan kombinasi FTIR dan kemometrika.
2. Memberikan informasi kepada masyarakat dan instansi pengawas seperti BPOM mengenai kemungkinan pemalsuan jamu pegal linu yang mengandung bahan kimia berbahaya, sehingga dapat dijadikan dasar pengawasan mutu produk jamu di pasaran.
3. Menunjukkan efektivitas penggunaan PCA dalam analisis kualitatif dan PLS dalam analisis kuantitatif untuk aplikasi spektroskopi FTIR dalam bidang kontrol kualitas produk herbal.
4. Sebagai acuan metode analisis yang lebih ramah lingkungan (*green chemistry*), efisien, dan tidak memerlukan pelarut atau reagen kimia berbahaya seperti metode kromatografi konvensional.

II. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Bahan Kimia Obat

Bahan Kimia Obat (BKO) adalah senyawa kimia tunggal yang memiliki kemampuan untuk menghasilkan efek farmakologis pada tubuh. BKO masuk dalam kategori obat keras yang penggunaannya harus diawasi secara ketat. Jika dikonsumsi secara berlebihan atau digunakan dalam jangka waktu yang lama, BKO dapat menimbulkan berbagai efek samping yang merugikan bagi kesehatan. Penggunaan BKO harus mengikuti anjuran dokter untuk menghindari potensi komplikasi kesehatan (Sartika *et al.*, 2015). Bahan kimia obat (BKO) adalah senyawa sintetis atau produk kimia yang terbuat dari bahan alami yang sering digunakan dalam pembersihan modern. Tujuan dari BKO adalah untuk meningkatkan efektivitas obat tradisional dengan memaksimalkan manfaatnya. Bahan kimia yang berasal dari bahan kimia ini dimaksudkan untuk menghasilkan formula yang lebih stabil, terukur, dan mudah beradaptasi untuk digunakan dalam pemecahan masalah. Kombinasi obat tradisional dan BKO menciptakan strategi pertahanan yang lebih komprehensif, memperkuat integritas bahan alami, tetapi dengan kemanjuran yang lebih tinggi karena kemajuan teknologi farmasi modern (Nugraha *et al.*, 2015).

Penggunaan bahan kimia obat (BKO) pada jamu tradisional dapat membahayakan kesehatan. Efek samping dari mengonsumsi jamu alami biasanya tidak langsung terlihat, oleh karena itu diperlukan waktu yang lama dan konsumsi yang teratur untuk merasakan manfaatnya. Namun, ketika jamu dicampur dengan BKO, efeknya akan muncul lebih cepat, sehingga membuat orang percaya akan khasiatnya yang instan. Meski demikian, penggunaan BKO justru meningkatkan

risiko kesehatan, karena efek yang cepat muncul bukan berasal dari bahan alami jamu, melainkan dari bahan kimia yang dapat berbahaya dalam jangka panjang (Roberts *et al.*, 2016).

Bahan kimia obat (BKO) sangat berbahaya jika dicampur dengan jamu. Meskipun khasiat penyembuhannya dapat langsung terasa, namun penggunaan BKO yang tidak terkontrol dengan dosis yang tidak menentu dapat menimbulkan efek samping yang serius, mulai dari mual, diare, pusing, sakit kepala, gangguan penglihatan, nyeri dada, hingga kerusakan organ yang parah, seperti kerusakan hati, gagal ginjal, gangguan jantung, gastritis, bahkan kematian (Muhrodi dan Maesaroh, 2023). Penambahan bahan kimia obat (BKO) pada jamu pegal linu sangat berbahaya bagi kesehatan apabila dikonsumsi dalam jangka yang panjang, karena tidak terkontrolnya dosis, jumlah, dan aturan pakai sehingga dapat menimbulkan efek samping yang tidak diinginkan (Ariffin *et al.*, 2021).

2.2 Jamu

Salah satu jenis obat tradisional yang populer di kalangan masyarakat Indonesia adalah jamu. Jamu merupakan salah satu bentuk perawatan kesehatan tradisional yang telah diwariskan dan digunakan oleh masyarakat Indonesia selama berabad-abad, baik untuk menjaga kesehatan maupun mengobati berbagai macam penyakit. Menurut Riset Kesehatan Dasar (RISKESDAS) 2018, sekitar 48% masyarakat Indonesia menggunakan produk jamu siap pakai, sementara 31,8% lebih memilih untuk meracik jamu sendiri. Konsumsi jamu yang meluas di Indonesia didorong oleh beberapa faktor, termasuk keterjangkauan harga, aksesibilitas, dan risiko efek samping yang relatif rendah dibandingkan dengan obat-obatan modern. Hal ini menyoroti pentingnya jamu sebagai pengobatan alternatif yang dipercaya oleh masyarakat (Rosyada *et al.*, 2019). Karena tingginya permintaan, semakin banyak produsen jamu yang bermunculan, mulai dari industri besar hingga usaha kecil rumahan. Jamu merupakan warisan obat tradisional Indonesia yang terbuat dari bahan-bahan alami, seperti tumbuhan dan hewan, yang diolah secara tradisional. Penyajiannya pun beragam, mulai dari

seduhan, serbuk, cairan, hingga pil atau kapsul, sehingga memudahkan masyarakat untuk memilih sesuai dengan kebutuhan dan kesukaannya (Jayanti *et al.*, 2015). Jamu merupakan salah satu produk obat alami Indonesia dengan persentase konsumen sebesar 59,12%. Relatif tingginya persentase masyarakat yang menggunakan jamu ini dikarenakan persepsi jamu memiliki efek samping yang lebih sedikit, asalkan aspek keamanannya terpenuhi. Seiring dengan meningkatnya penggunaan obat tradisional yang berdasarkan manfaat turun-temurun, maka peluang terjadinya pemalsuan bahan baku obat (simplisia) semakin meluas. Bahkan, beberapa produk jamu mengandung bahan kimia obat (BKO) yang secara tegas dilarang untuk ditambahkan, baik sengaja maupun tidak sengaja, ke dalam obat tradisional (Fauziah *et al.*, 2015).

Obat tradisional dilarang untuk menggunakan bahan kimia terisolasi atau sintetis yang berkhasiat obat, atau yang biasa disebut dengan bahan kimia obat (BKO), sebagaimana diatur dalam Peraturan BPOM Nomor 25 Tahun 2023 tentang kriteria dan tata laksana registrasi obat bahan alam. Jamu adalah obat herbal yang mengandung tanaman aktif, tanaman dalam bentuk lain, atau kombinasi tanaman secara bersamaan. Jamu sering berfungsi sebagai salah satu komponen utama dari sistem kekebalan tubuh yang komprehensif yang dapat mendorong penggunaan suplemen berbasis mineral, tanaman, dan hewan untuk mencegah dan mengobati penyakit. Pengobatan ini digunakan disebagian besar negara di dunia dan telah terbukti meningkatkan, memperkuat, dan meningkatkan kesehatan manusia. Menurut Organisasi Kesehatan Dunia (WHO), hingga 80% orang yang lahir di negara berkembang masih menggunakan obat-obatan tradisional untuk menjaga kesehatan mereka (WHO, 2005). Menurut *Public Warning* yang dikeluarkan oleh (BPOM, 2014), hasil pengawasan jamu tradisional melalui sampling dan pengujian laboratorium menunjukkan adanya produk jamu yang dicampur dengan bahan kimia obat (BKO) seperti fenilbutazon, deksametason, antalgin, parasetamol, piridoksin, teofilin, dan berbagai senyawa kimia lainnya. BPOM mengidentifikasi 59 jenis obat tradisional yang terkontaminasi campuran BKO. Dari jumlah tersebut, 57 produk tidak terdaftar secara resmi, sementara hanya dua yang terdaftar. Temuan ini menyoroti potensi risiko kesehatan yang mungkin timbul akibat mengonsumsi produk jamu yang telah dicampur dengan bahan

kimia berbahaya tanpa pengawasan yang baik.

2.3 Jamu Pegal Linu

Berdasarkan manfaatnya, jamu terdiri dari berbagai jenis yang disesuaikan dengan kebutuhan kesehatan tertentu, seperti jamu untuk rematik, asma, batuk, dan pegal linu. Di antara jenis-jenis jamu tersebut, jamu pegal linu merupakan salah satu yang paling populer dan banyak digunakan oleh masyarakat Indonesia. Jenis jamu ini dikenal karena keampuannya dalam meredakan rasa nyeri dan tidak nyaman pada persendian, yang biasanya disebabkan oleh kelelahan fisik, aktivitas yang berlebihan, atau kekakuan otot. Karena kemampuannya dalam meredakan nyeri otot, jamu pegal linu menjadi obat tradisional yang sering dipilih untuk menjaga kebugaran tubuh, terutama setelah beraktivitas berat atau menjalani rutinitas harian yang melelahkan (Khoirunnisa *et al*, 2019).

Jamu pegal linu merupakan obat tradisional yang berasal dari bahan atau ramuan berupa tumbuhan, hewan, mineral, sediaan galenik (ekstrak), atau gabungan dari bahan- bahan tersebut yang telah digunakan secara turun-temurun untuk tujuan pengobatan dan dapat digunakan sesuai dengan aturan yang berlaku di masyarakat (PERMENKES RI Nomor 007 Tahun 2012). Pegal linu adalah suatu kondisi yang ditandai dengan rasa sakit dan ketidaknyamanan akibat kelelahan, yang sering kali memengaruhi persendian. Area yang paling sering terkena dampaknya meliputi leher, punggung, lengan, kaki, dan bahu. Penyebab utama pegal linu biasanya adalah kekakuan otot yang terjadi setelah melakukan aktivitas fisik yang berlebihan atau postur tubuh yang buruk dalam waktu lama. Namun, dalam beberapa kasus, nyeri ini juga dapat disebabkan oleh kondisi medis tertentu, seperti gangguan saraf atau peradangan sendi, yang memerlukan perhatian lebih lanjut (JK Aronson, 2010). Jamu pegal linu merupakan salah satu produk obat tradisional yang sangat digemari oleh masyarakat, dipercaya dapat meredakan nyeri otot, kelelahan, nyeri otot dan tulang, melancarkan peredaran darah, memperkuat sistem kekebalan tubuh, dan meringankan ketidaknyamanan tubuh secara keseluruhan. Banyak industri obat tradisional, serta produsen obat

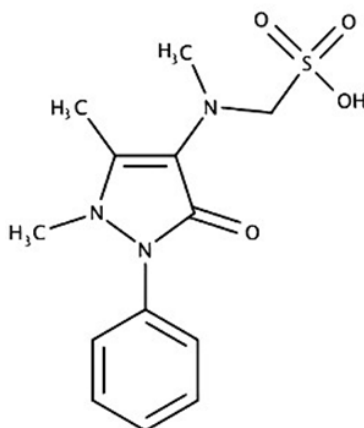
tradisional skala kecil, mengembangkan jamu ini dengan menggunakan ramuan herbal tertentu (Wahyuni dan Sujono, 2004).

Jamu pegal linu merupakan salah satu obat herbal yang paling banyak beredar di masyarakat. Masyarakat percaya bahwa mengonsumsinya dapat meredakan nyeri dan rasa sakit tanpa menimbulkan efek samping yang berbahaya. Anggapan ini tidak selalu benar, karena banyak ditemukan kasus penambahan bahan kimia obat (BKO) pada jamu.

Menurut hasil pemeriksaan yang dilakukan oleh BPOM (Badan Pengawas Obat dan Makanan), BKO yang umum ditemukan dalam jamu pegal linu yakni antalgin atau biasa dikenal dengan nama metamizol. Analgesik dan obat antiinflamasi nonsteroid (NSAID) umumnya digunakan oleh masyarakat untuk mengurangi rasa sakit dan peradangan pada penyakit rematik. Beberapa obat pereda nyeri dan antirematik ditambahkan ke dalam jamu pegal linu untuk meningkatkan efeknya (BPOM RI, 2006)

2.4 Metamizol

Metamizol atau dikenal sebagai *dipyrone*, adalah obat sintesis *non-opioid* dengan berbagai manfaat farmasi, yang paling utama adalah efek analgesik, antipiretik, dan spasmolitik yang kuat. Sebagai analgesik, metamizol bekerja secara efektif untuk mengurangi sensitivitas kulit pada tingkat sedang, sehingga menjadikannya pilihan populer untuk perawatan luka di area tangan atau kaki. Selain itu, sifat anti-piretiknya memungkinkannya untuk mengurangi kelembapan dengan cepat, sehingga berguna dalam mengendalikan kondisi kelembapan yang tidak sensitif terhadap efek *anti-piretik*. Efek spasmodik metamizol juga membuatnya efektif dalam mengobati kejang atau kram otot, yang sering terjadi pada kondisi pencernaan atau kritis. Meskipun banyak digunakan di beberapa negara, ada kekhawatiran tentang efek sampingnya, seperti risiko agranulositosis, yang membatasi penggunaannya di beberapa wilayah (Huber *et al.*, 2015).



Gambar 1. Struktur Molekul Metamizol (Fatmarahmi dkk., 2021)

Metamizol atau metamipiron, metamizol natrium, Natrium [(1,5-dimetil-3-okso-2-fenil-2,3-dihidro-1H-pirazol-4-il)-N-metilamino] metansulfonat monohidrat ($C_{13}H_{16}N_3NaO_4S \cdot H_2O$), memiliki berat molekul 351,4. Dipiron mengandung tidak kurang dari 99,0% dan tidak lebih dari 101,0% $C_{13}H_{16}N_3NaO_4S$, dihitung berdasarkan zat kering. Zat ini tampak sebagai bubuk kristal, berwarna putih atau hampir putih. Zat ini sangat mudah larut dalam air, larut dalam etanol, dan praktis tidak larut dalam metilen klorida. Khasiat dan kegunaannya antara lain sebagai analgesik dan antipiretik (Depkes RI, 2020). Metamizol adalah obat antiinflamasi non-steroid (OAINS) yang digunakan secara luas di banyak negara sebagai penghilang nyeri dan penurun demam. Obat ini sangat efektif, terutama dalam mengobati nyeri perut atau kolik, berkat sifat spasmolitiknya yang mampu meredakan kejang otot. Metamizol merupakan senyawa garam sulfonat dari aminopirin dan memiliki sifat yang serupa dengan OAINS lainnya. Beberapa sinonim dari metamizol termasuk metamipiron, dipiron, analginum, dan sulpirin. Meskipun memiliki berbagai manfaat, obat ini juga memiliki risiko yang perlu diperhatikan, terutama bila digunakan dalam jangka waktu yang lama (Martindele, 2009).

Metamizol atau yang dikenal sebagai antalgin, merupakan senyawa turunan metanesulfonat dari amidopirin yang berperan dalam sistem saraf pusat. Obat ini

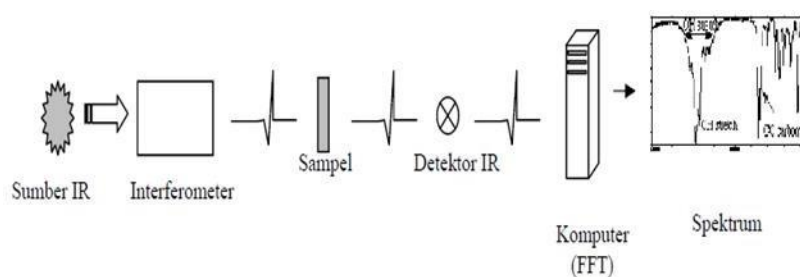
bekerja dengan menurunkan kepekaan reseptor terhadap rasa nyeri dan memengaruhi pusat pengaturan suhu tubuh. Antalgin memiliki tiga efek utama, yaitu sebagai pereda nyeri (analgesik), penurun panas (antipiretik), dan anti-peradangan (anti-inflamasi) (Fatimah dkk., 2017). Metamizol berpotensi menyebabkan berbagai efek samping. Efek samping yang paling umum adalah gangguan pada saluran pencernaan, seperti diare, sakit perut, muntah, dan mual. Selain itu, penggunaan metamizol juga dapat menyebabkan efek samping yang serius dari gangguan fungsi ginjal. Efek hipersensitivitas pada kulit juga sering dilaporkan, seperti munculnya ruam, gatal-gatal (*urtikaria*), atau kemerahan pada kulit (*eritema*). Efek samping lain yang sering terjadi adalah sakit kepala dan pusing. Penggunaan metamizol perlu kehati-hatian, terutama pada pasien yang memiliki alergi atau gangguan saluran cerna, untuk mencegah komplikasi yang lebih serius (Zukowski and Kotfis, 2009).

Setelah diketahui bahwa metamizol dapat menyebabkan agranulositosis, kondisi yang sangat berbahaya dan berpotensi mematikan, beberapa negara memilih untuk melarang peredarannya atau memperketat regulasi penggunaannya. Namun, di negara lain, metamizol masih diperbolehkan sebagai obat bebas dan kandungan metamizol sering ditemukan dalam jamu herbal, meskipun seharusnya jamu seperti jamu pegal linu tidak mengandung bahan kimia obat (BKO) seperti metamizol. Penggunaan metamizol juga dikaitkan dengan peningkatan risiko agranulositosis, syok, anemia aplastis, serta reaksi kulit (Goodman, 1996).

2.5 Spektrofotometri *Fourier Transfom Infrared* (FTIR)

Spektrofotometri FTIR adalah metode analisis yang digunakan untuk mengidentifikasi gugus fungsi suatu senyawa secara kualitatif. Teknik ini tidak memerlukan penggunaan bahan radioaktif atau reagen tambahan dalam proses analisis. Prinsip utama spektrofotometri FTIR adalah mendeteksi gugus fungsi suatu senyawa melalui penyerapan inframerah. Setiap senyawa memiliki pola serapan inframerah yang unik, sehingga memungkinkan senyawa dibedakan dan diidentifikasi berdasarkan karakteristik spektrum yang dihasilkan (Sjahfirdi dkk.,

2015). Spektrofotometri *Fourier Transform Infrared* (FTIR) adalah teknik yang biasa digunakan untuk mendeteksi pemalsuan makanan. Hasilnya disajikan sebagai nilai absorbansi atau transmitansi dalam bentuk spektrum, yang mengungkapkan ikatan molekul dan gugus fungsi dalam sampel yang dianalisis. Spektrum ini kemudian dapat digunakan untuk mengidentifikasi identitas sampel. Ada dua jenis instrumen utama yang biasa digunakan dalam spektroskopi yakni Instrumen FTIR dan instrumen dispersif. Instrumen FTIR dapat secara simultan mendeteksi beberapa sinyal spektral, sedangkan instrumen dispersif terbatas hanya mendeteksi satu sinyal spektral dalam satu waktu (Leo and Nollet, 2015). Berikut gambaran dari instrumen spektrofotometer FTIR yang disajikan pada Gambar 2.



Gambar 2. Instrumen Spektrofotometer FTIR (Suseno dan Firdausi, 2008)

Spektroskopi FTIR menawarkan beberapa keuntungan yang menjadikannya teknik analisis yang sangat handal. Salah satu manfaat utamanya adalah prosesnya yang cepat, sehingga hasil dapat diperoleh dalam waktu singkat. Selain itu, metode ini relatif sederhana, tidak memerlukan persiapan sampel yang rumit, dan mudah dioperasikan. Dari segi biaya, spektroskopi FTIR lebih ekonomis karena mengurangi kebutuhan bahan kimia dan reagen tambahan. Yang paling penting, teknik ini mampu menganalisis analit secara komprehensif, memberikan gambaran lengkap tentang struktur kimia sampel tanpa menyebabkan kerusakan. Hal ini menjadikannya solusi yang efisien dan efektif untuk berbagai aplikasi analisis kimia (Rohman dkk., 2011). Spektrofotometri FTIR beroperasi berdasarkan prinsip penyerapan panjang gelombang inframerah oleh suatu senyawa. Kisaran spektrum inframerah terletak di antara panjang gelombang 0,78

hingga 1000. Dalam instrumen spektroskopi inframerah, spektrum dibagi ke dalam tiga jenis radiasi utama: inframerah-dekat, inframerah-tengah, dan inframerah-jauh. Masing-masing kategori ini memiliki karakteristik panjang gelombang yang berbeda, sehingga memungkinkan analisis yang lebih rinci, tergantung pada jenis radiasi yang digunakan (Bintang, 2010). Berdasarkan penelitian yang dilakukan oleh Fatmarahmi *et al.* (2021), Metode spektroskopi FTIR merupakan teknik yang efektif dalam mengidentifikasi, mengkualifikasi, dan mengkuantifikasi sampel tanpa memerlukan perlakuan awal yang rumit. Selain itu, metode ini meminimalkan penggunaan reagen toksik, membuatnya lebih aman dan ramah lingkungan. Spektroskopi FTIR juga dikenal sebagai teknik yang cepat, sederhana, dan hemat biaya, menjadikannya pilihan yang efisien untuk menganalisis seluruh analit. Dengan kemampuan ini, metode FTIR sangat berguna dalam mengidentifikasi kandungan bahan kimia obat yang terdapat dalam obat-obatan herbal tradisional secara akurat. Salah satu metode untuk menganalisis data FTIR adalah dengan menggunakan teknik kalibrasi multivariat, yang merupakan cabang dari kemometrika. Teknik ini memungkinkan analisis data yang lebih mendalam, sehingga informasi yang diperoleh dari spektrum FTIR menjadi lebih akurat.

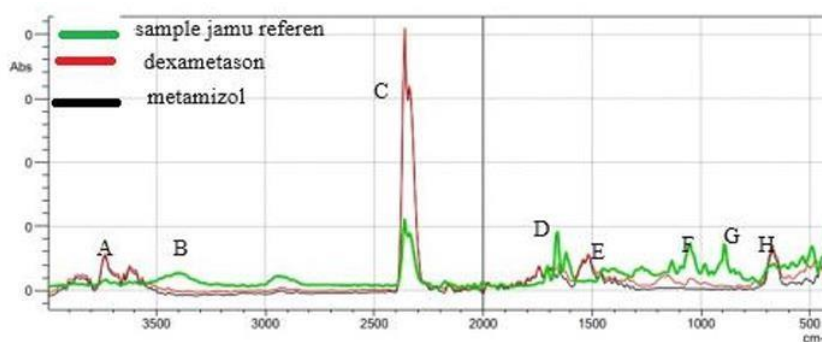
Spektrofotometri FTIR memiliki beberapa keunggulan, antara lain:

1. Tidak merusak sampel
2. Hasil analisis dapat diperoleh dalam waktu singkat dengan tingkat akurasi yang tinggi.
3. Proses persiapan sampel tidak memerlukan langkah-langkah yang rumit.
4. Ramah lingkungan
5. Baik sampel padat maupun cair dapat dianalisis langsung untuk menghasilkan spektrum, tanpa perlu perlakuan tambahan yang kompleks (Ahdaini, 2013).

Spektrofotometri FTIR menghasilkan spektrum yang berisi informasi lengkap mengenai karakteristik kimia dari suatu sampel. Spektrum tersebut mencakup data terkait gugus fungsi yang ada dalam senyawa, bilangan gelombang yang menunjukkan frekuensi vibrasi, jenis getaran yang terjadi pada gugus fungsi

tersebut, serta tingkat absorbansi sampel sesuai dengan hukum *Lambert-Beer*. Hukum *Lambert-Beer* menjelaskan hubungan antara absorbansi cahaya oleh sampel dengan konsentrasi dan panjang jalur optik, memungkinkan pengukuran kuantitatif senyawa dalam sampel. Melalui spektrum ini, FTIR dapat mengidentifikasi struktur molekul dan interaksi kimia dalam sampel dengan sangat detail dan akurat, membuatnya menjadi alat yang sangat efektif untuk analisis kimia (Rohman *et al.*, 2019). Menggabungkan teknik spektroskopi FTIR-ATR dengan analisis multivariat memungkinkan deteksi dan pengukuran pemalsuan pada jamu tradisional Indonesia yang telah dicampur dengan bahan berbahaya seperti Metamizol. Spektroskopi FTIR- ATR (*Attenuated Total Reflectance*) memungkinkan pengambilan spektrum inframerah dari sampel dengan cepat dan tanpa perlakuan yang rumit. Analisis multivariat digunakan untuk mengolah data spektrum dan membedakan antara jamu asli dan yang telah dipalsukan. Pendekatan ini menawarkan cara yang lebih efisien dan akurat untuk mengidentifikasi pemalsuan produk herbal, yang bisa membahayakan kesehatan konsumen (Fatmarahmi *et al*, 2021).

Pada penelitian yang dilakukan Rahayu dkk. (2024) mengenai analisis cepat kandungan metamizol dan deksametason pada jamu pegal linu yang menghasilkan pola dan panjang gelombang yang ditunjukkan pada Gambar 3.



Gambar 3. Spektrum FTIR Metamizole dan Deksametason pada Panjang Gelombang 4000-650 cm^{-1} (Rahayu dkk., 2024)

Berdasarkan spektrum yang diperoleh, Metamizol menunjukkan beberapa puncak khas pada bilangan gelombang tertentu. Pada rentang bilangan gelombang 3600-

3500 cm^{-1} , terdapat puncak yang mengindikasikan adanya gugus fungsi N-H *stretching*. Puncak pada bilangan gelombang 1600-1500 cm^{-1} menunjukkan keberadaan gugus fungsi C=O *stretching*. Sementara itu, rentang 1000-1200 cm^{-1} memperlihatkan gugus fungsi C-O *bending*. Selain itu, puncak pada bilangan gelombang 1238 dan 1318 cm^{-1} mengindikasikan keberadaan gugus fungsi =CH₂ dan C=C. Kombinasi dari puncak-puncak ini menegaskan keberadaan gugus fungsi amida pada senyawa metamizol, yang merupakan ciri khas dari struktur kimianya (Rahayu dkk., 2024).

2.6 Kemometrika

Kemometrika adalah salah satu teknik analisis yang sangat berguna untuk menggabungkan kumpulan data yang besar dan kompleks, seperti spektrum FTIR. Tujuan utama penggunaan kemometrika adalah untuk mengukur informasi yang terkandung dalam matriks dengan mengurangi dimensi data yang tersedia. Dengan cara ini, analisis memudahkan peneliti untuk memahami hubungan atau pola dalam data yang diberikan. Selain itu, kemometrika membantu dalam identifikasi kesamaan dan perbedaan antara berbagai input, termasuk variabel sembarang, sehingga memfasilitasi proses pengembangan output yang lebih akurat dan efisien (Aouidi *et al.*, 2012).

Istilah “kemometrika” pertama kali digunakan pada tahun 1971 oleh dua ilmuwan terkemuka dari Amerika Serikat, Bruce R. Kowalski dari Amerika Serikat dan Swante Wold dari Swiss. Dalam bahasa Swedia, konsep ini disebut sebagai “kemometri,” yang memiliki padanan dalam bahasa Inggris yang dikenal sebagai “chemometrics.” Secara umum, kemometri mengacu pada cabang ilmu yang mengintegrasikan logika formal, statistik, dan teori matematika untuk menganalisis dan memahami data yang diperoleh dari berbagai konteks kimia. Menurut definisi yang diberikan oleh *International Chemometrics Society* (Masyarakat Kemometrika Internasional), kemometrika adalah disiplin ilmu yang berhubungan dengan menghubungkan hasil proses atau sistem kimia dengan penerapan prinsip-prinsip matematika dan statistik (Rohman dkk., 2012)

Saat ini, analisis multivariat adalah alat yang sangat penting untuk menganalisis data yang dihasilkan dari banyak pengamatan yang dilakukan pada beberapa variabel. Tujuan dari teknik ini adalah untuk mengekstrak informasi yang terkandung dalam data dengan jumlah dimensi yang lebih sedikit, sehingga memungkinkan karakterisasi yang lebih akurat terhadap perbedaan atau kesamaan antara variabel dan pengamatan. Sampel daun zaitun berupa serbuk padat pada percobaan ini. Efek cahaya MIR (*mid-infrared*) terjadi ketika cahaya menyentuh sampel serbuk yang sesuai. Karena hal ini, metode regresi SNV (*Standard Normal Variate*) diterapkan pada semua spektrum untuk menghilangkan informasi spektrum fisik yang disebabkan oleh ukuran partikel. Dengan cara ini, model prediktif dan diskriminatif akan lebih fokus pada informasi spektrum (Aouidi *et al.*, 2012). Kemometrika mengalami perkembangan pesat pada awal abad ke-20. Salah satu faktor utama yang mendorong kemajuan ini adalah melimpahnya data yang dihasilkan oleh instrumen analitik seperti spektrofotometer. Data yang dihasilkan sangat banyak dan kompleks, sehingga memerlukan metode pengolahan yang lebih efisien. Di samping itu, popularitas penggunaan komputer dengan perangkat lunak canggih turut berperan penting dalam memajukan kemometrika. Dengan bantuan teknologi ini, proses pengolahan data menjadi lebih cepat, dan data-data yang rumit dapat diolah dan disederhanakan sehingga lebih mudah untuk diinterpretasikan. Hal ini memungkinkan para ilmuwan untuk mendapatkan wawasan yang lebih mendalam dari data analitik dengan waktu yang lebih singkat (Bosque-Sendra *et al.*, 2012).

Salah satu metode kalibrasi multivariat yang sering digunakan adalah *Principal Component Analysis* (PCA) dan *Partial Least Square* (PLS). PCA adalah teknik yang berfungsi untuk mengurangi jumlah data dengan mengidentifikasi serta memproyeksikan variabel-variabel yang memiliki korelasi ke dalam dimensi yang lebih sedikit, sehingga memudahkan analisis tanpa menghilangkan informasi penting. Di sisi lain, PLS merupakan metode statistik multivariat yang lebih kompleks, mampu menangani banyak variabel respon secara bersamaan, dan sering diterapkan ketika terdapat hubungan linier antara variabel bebas dan variabel tergantung. Teknik ini membantu meningkatkan ketepatan prediksi dalam model analisis. Kedua pendekatan ini sangat penting dalam pengolahan data yang

rumit dan memiliki kegunaan luas di berbagai bidang ilmiah maupun industri (Miller and Miller, 2010).

2.7 *Principal Component Analysis (PCA)*

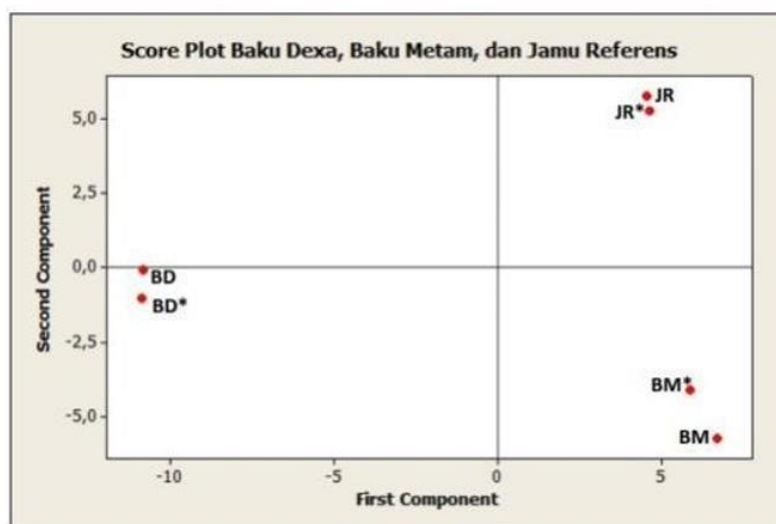
Spektrum inframerah (IR) menghasilkan data multivariat, yang berarti bahwa data tersebut terdiri dari banyak variabel yang saling berhubungan, membuatnya sulit untuk dianalisis secara langsung. Oleh karena itu, diperlukan metode kemometrik untuk memproses dan menginterpretasikan data tersebut secara lebih efisien. Beberapa teknik analisis multivariat yang sering digunakan untuk memahami spektrum IR termasuk *Principal Component Analysis (PCA)*, yang berfungsi untuk mengurangi dimensi data dan mengidentifikasi komponen-komponen utama yang paling berpengaruh (Biancolillo and Marini, 2018). PCA adalah proses menghasilkan grafik tanpa parameter yang diketahui. Tujuan utama dari PCA adalah untuk mereduksi data dan mengumpulkan informasi untuk mengidentifikasi variabel atau faktor yang paling penting untuk ditampilkan dalam sebuah kumpulan data. PCA memiliki kemampuan untuk mengubah variabel yang tidak berkorelasi menjadi variabel baru yang dikenal sebagai komponen utama (*principle component*), yang memaksimalkan varian yang diamati dalam data untuk setiap komponen yang terkubur di bawah permukaan menjadi ortogonal dengan PC sebelumnya (Rajalahti and Kvalheim, 2011). Jenis pola pengenalan tanpa pengawasan yang paling umum disebut PCA, yang dapat mendeteksi kemiripan tanpa memerlukan sumber daya eksternal (Brereton, 2007).

Principal Component Analysis (PCA) adalah salah satu teknik penyelesaian data yang digunakan dalam kemometrika, yang merupakan penerapan pengetahuan matematika dan statistik dalam analisis data kimia. Perangkat lunak ini memiliki kapasitas untuk mengelompokkan dan mengungkap hubungan antara berbagai sampel dalam dataset yang kompleks. Penerapan metode ini biasanya dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak yang khusus untuk kemometrika. Tujuan utama dari PCA adalah untuk mengurangi dimensi yang berisik dalam ruang data menjadi dimensi yang lebih halus dalam ruang yang sesuai, yang pada akhirnya

membantu dalam deskripsi data (Pratiwi dan Harjoko, 2013). *Principal Component Analysis* (PCA) digunakan untuk menilai kemampuan untuk membandingkan data sampel asli dengan data sampel yang dianalisis berdasarkan kandungan sibutramin dari sampel tersebut. Klasifikasi sampel yang disebutkan di atas dianalisis secara visual menggunakan PCA untuk mengamati perbedaan antara kedua jenis sampel. Dengan cara ini, PCA memberikan representasi grafis yang jelas tentang distribusi sampel dan hubungan sampel, sehingga memudahkan untuk menentukan apakah kumpulan sampel yang dijadikan sampel dapat diambil secara efektif dari kumpulan sampel asli berdasarkan variabel yang diamati (Cebi *et al.*, 2017). Beberapa penelitian menunjukkan bahwa metode *Fourier Transform Infrared* (FTIR) yang dikombinasikan dengan *Principal Component Analysis* (PCA) merupakan pendekatan yang sangat menjanjikan untuk analisis Bahan Kimia Obat (BKO). Salah satu penelitian yang dilakukan oleh Fatmarahmi dkk (2021) berhasil menggunakan kombinasi teknik FTIR dan kemometrik untuk mendeteksi metamizol dalam produk pereda nyeri herbal. Penelitian ini menunjukkan keefektifan metode ini dalam mengidentifikasi senyawa kimia dengan akurasi tinggi, sekaligus menawarkan solusi yang lebih cepat dan efisien untuk menganalisis kandungan BKO dalam obat-obatan tradisional. Kombinasi ini memberikan keuntungan dalam menghasilkan data yang lebih terstruktur dan memfasilitasi interpretasi hasil yang lebih rinci.

PCA (*Principal Component Analysis*) merupakan metode yang digunakan untuk mengurangi dimensi data dengan mencari koordinat alternatif yang lebih sederhana. PCA bekerja dengan menggunakan transformasi ortogonal untuk mengubah nilai spektrum asli menjadi sekumpulan nilai baru yang tidak berkorelasi dengan data awal. Nilai-nilai baru ini disebut Komponen Utama (PC). Jumlah komponen utama selalu kurang dari atau sama dengan jumlah variabel dalam data asli. Proses transformasi dimulai dengan memilih komponen utama pertama berdasarkan varians terbesar dalam data. Komponen utama kedua dipilih berdasarkan varians terbesar berikutnya, asalkan tidak berkorelasi dengan komponen pertama. Proses ini terus berlanjut hingga semua komponen utama dipilih. Dengan cara ini, PCA menyederhanakan data dengan mengidentifikasi dan mempertahankan informasi yang paling signifikan dari data asli, sehingga

memudahkan interpretasi dan analisis (Dubessy and Caumon, 2012). Pada penelitian Rahayu dkk. (2024) telah dilakukan analisis kualitatif terhadap metamizol menggunakan metode *Principal Component Analysis* (PCA) terhadap spektrum FTIR pada rentang bilangan gelombang yang digunakan adalah 4000-500 cm^{-1} . Hasil dari analisis ini menghasilkan *score plot* yang dapat dilihat pada Gambar 4.



Gambar 4. Hasil *Score Plot* pada bilangan gelombang 4000-500 cm^{-1} dari metamizol (BM), dexametason (BD) dan sampel jamu rederen (JR) (Rahayu dkk., 2024).

Score plot menunjukkan adanya tiga kelompok yang berbeda yaitu dexametason, metamizol dan sampel jamu referen. Melalui analisis PCA berbasis kemometrik, sampel jamu yang diperoleh dari pasaran berhasil diidentifikasi. Hasilnya menunjukkan bahwa sampel-sampel tersebut tidak mengandung dexametason maupun metamizol (Rahayu dkk., 2024).

2.8 Partial Least Square (PLS)

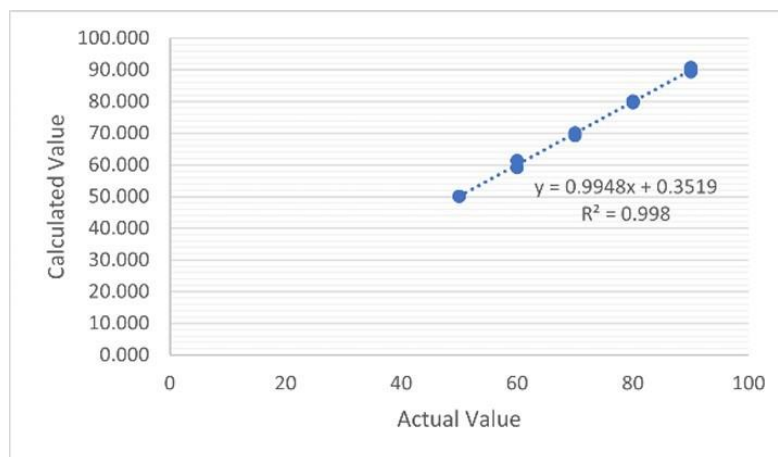
Dalam upaya mengidentifikasi kandungan BKO dalam jamu, sangat penting untuk mengembangkan metode analisis yang dapat mendeteksi zat kimia secara efisien dan akurat. Metode-metode ini harus dapat memberikan hasil prediksi yang

mendekati nilai aktual, seperti yang ditunjukkan dalam analisis menggunakan teknik *Partial Least Squares* (PLS), dan juga harus dapat menyelesaikan pengujian dalam waktu yang singkat. Hal ini membuat metode ini sangat cocok untuk menguji dan memantau kandungan BKO dalam produk jamu tanpa mengorbankan keakuratannya (Rohman, 2014). PLS adalah model kalibrasi multivariat tunggal di mana konstanta analitik direkonstruksi menggunakan PC atau faktor daripada variabel independen (spektrum FTIR) (Fadzlillah *et al.*, 2014). Salah satu model kalibrasi multivariat yang disebut *Partial Least Square* (PLS) digunakan untuk menghubungkan sentimen analitik ke komponen utama (PC) atau faktor, daripada langsung ke variabel independen seperti spektrum *Fourier Transform Infrared*. Teknik ini memiliki kemampuan untuk mengurangi kompleksitas data dengan memanfaatkan informasi yang relevan dan signifikan dari spektrum FTIR. Melalui proses ini, PLS dapat mengidentifikasi variabel yang tidak berkontribusi secara signifikan terhadap model, sehingga menghasilkan model kalibrasi yang lebih akurat dan efisien dalam mengurangi ketidakpastian analitik. Pengurangan jumlah data yang tidak signifikan membantu meningkatkan kecepatan analisis dan meminimalkan *overfitting*, sehingga PLS sangat berguna untuk aplikasi sains material dan analitik (Miller and Miller, 2005). Metode *Partial Least Square* (PLS) merupakan salah satu pendekatan dalam kemometrika yang berbasis regresi linier. Teknik kalibrasi multivariat ini banyak digunakan dalam berbagai analisis kuantitatif, terutama pada data spektrofotometri dan elektrokimia. Kekuatan metode PLS terletak pada kemampuannya untuk menangani sejumlah besar variabel respon (variabel dependen) dan variabel prediktor (variabel independen) secara simultan, bahkan ketika terdapat kolinearitas yang tinggi di antara variabel-variabel tersebut. Selain itu, PLS dirancang untuk menganalisis struktur linear sistematis dalam data, bahkan dalam situasi di mana data tidak lengkap atau hilang. Fleksibilitas dan efisiensinya dalam mengelola kumpulan data yang kompleks telah membuat PLS sangat populer di berbagai bidang penelitian, terutama yang membutuhkan analisis hubungan variabel yang mendalam dan akurat (Miller and Miller, 2010). Metode *Partial Least Square* (PLS) semakin banyak digunakan dalam kalibrasi multivariat, terutama karena kualitas model kalibrasi yang dihasilkannya dan kemudahan

dalam aplikasinya.

Regresi PLS adalah teknik analisis multivariat yang sangat canggih, yang menjelaskan peningkatan signifikan dalam penggunaannya dalam spektroskopi inframerah, terutama untuk analisis kuantitatif. Kekuatan metode ini terletak pada kemampuannya untuk menangani data yang kompleks dan multivariat secara efisien. Ketika spektrum sampel yang diketahui dianalisis, PLS dapat merekonstruksi spektrum dari spektrum pemuatan. Dengan menggunakan teknik ini, konsentrasi senyawa dalam sampel yang tidak diketahui dapat diprediksi secara akurat. PLS bekerja dengan menghubungkan variabel spektral dengan konsentrasi sampel, memungkinkan model untuk memprediksi hasil berdasarkan informasi spektral yang tersedia (Ahdaini, 2013). Pada penelitian Rahayu dkk. (2024) Analisis kuantitatif dilakukan menggunakan metode kemometrik PLS pada lima seri konsentrasi metamizol dengan sampel jamu referensi. Rentang bilangan gelombang yang digunakan adalah $4000\text{--}500\text{ cm}^{-1}$ dengan konsentrasi 10-50% campuran metamizol dengan jamu pegal linu, karena rentang ini menghasilkan nilai R^2 yang mendekati 1 dan nilai RMSEC yang rendah. Pada formula campuran antara sampel jamu referensi dan metamizol, didapatkan nilai RMSEC sebesar 0,676 dan R^2 sebesar 0,998, yang menunjukkan hasil yang sangat baik. Model kalibrasi ini memiliki performa yang baik, dengan nilai R^2 mendekati 1, yaitu 0,999 dan 0,998, yang mengindikasikan hubungan yang sangat erat antara nilai aktual dan prediksi dari instrumen FTIR. Nilai R^2 menggambarkan tingkat kedekatan antara hasil pengukuran sesungguhnya dengan hasil prediksi (Rohman, 2014). Nilai R^2 yang diperoleh dalam penelitian ini menunjukkan korelasi yang sangat baik, karena mendekati nilai 1, yang mengindikasikan model memiliki akurasi yang tinggi dalam memprediksi kadar senyawa yang diukur. Dengan demikian, dapat disimpulkan bahwa model kalibrasi ini memiliki kemampuan yang andal dalam memperkirakan konsentrasi dari formula campuran metamizol dan sampel jamu referensi. Nilai R^2 yang mendekati 1 menandakan bahwa model tersebut dapat menjelaskan hampir seluruh variabilitas antara data aktual dan hasil prediksi, menjadikan metode ini efektif untuk analisis kuantitatif dalam penelitian (Shafirany dkk., 2019). Berdasarkan hasil uji validasi silang (*cross validation*) analisis PLS pada campuran biner metamizol dan jamu referensi menunjukkan

nilai R^2 sebesar 0,998 dan RMSEC 0,676 dapat dilihat pada Gambar 5.



Gambar 5. Regresi PLS dari Campuran Biner Sampel Jamu Referen dan Metamizol pada Bilangan Gelombang 400-4000 cm^{-1} (Rahayu dkk., 2024).

III. METODE PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan pada bulan Oktober 2024 hingga Januari 2025. Preparasi sampel dan analisis FTIR dilakukan di Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN) Tanjung Bintang, Lampung Selatan.

3.2 Alat dan Bahan

Alat-alat yang digunakan pada penelitian ini adalah satu unit alat Spektrofotometer FTIR-ATR *BRUKER INVENIO R 730* yang dilengkapi *Software* Horizon MB, neraca analitik, mortar, alu, kertas perkamen, plastik klip, spatula, tisu, cooper, vial, dan perangkat lunak computer *Software* Minitab 19.

Bahan-bahan yang digunakan pada penelitian ini adalah standar metamizol (BPFI) yang diperoleh dari PPPOMN. Jamu referensi dibuat dengan bahan sebagai berikut kunyit, jahe, temulawak, lengkuas, kencur, meniran, daun mint, dan rumput teki. 9 sampel jamu pegal linu yang diperoleh dari toko jamu dan pasar tradisional di Kota Bandar Lampung, dan aseton 96%.

3.3 Prosedur Penelitian

Adapun metode penelitian yang akan digunakan adalah sebagai berikut

3.3.1 Sampling Sampel

Sebelum mengambil sampel untuk penelitian, langkah awal yang diambil adalah melakukan survei di toko jamu dan pasar tradisional di Kota Bandar Lampung. Survei ini dilakukan untuk mendapatkan informasi mengenai beberapa produk jamu pegal linu.

3.3.2 Preparasi Standar Metamizol

Standar Metamizol yang digunakan pada penelitian ini didapatkan dari Pusat Pengembangan Pengujian Obat dan Makanan Nasional (PPOMN). PPOMN merupakan lembaga resmi yang berwenang menyediakan bahan referensi standar untuk keperluan analisis mutu dan keamanan obat, makanan, serta produk kesehatan lainnya (BPOM, 2021). Adapun untuk penyiapan standar dengan cara ditimbang sebanyak 15 mg serbuk standar metamizol kemudian ditempatkan pada wadah sampel (kristal ATR) dan ditekan menggunakan penjepit kompresi yang dikendalikan mikrometer untuk memastikan kontak yang tepat dan diamati pada panjang gelombang $4000\text{-}650\text{ cm}^{-1}$. Kristal ATR dibersihkan dengan etanol 96% untuk menghilangkan sisa sampel kemudian dianalisis menggunakan instrumen spektrofotometer FTIR (Widhihastuti, 2024).

3.3.3 Preparasi Jamu Pegal Linu Referensi

Pembuatan jamu pegal linu referensi dengan cara dicuci semua bahan herbal dengan air yang mengalir agar sisa kotoran hilang dan mengurangi resiko kontaminasi (Handayani dkk., 2021). Setelah semua bahan bersih kemudian dikeringkan menggunakan oven pada suhu $50\text{-}60^{\circ}\text{C}$ selama kurang lebih 8-12 jam. Selanjutnya bahan-bahan tersebut dihaluskan menggunakan blender hingga menjadi bubuk (Yuliana dkk., 2020).

3.3.4 Kalibrasi dan Validasi

Pembuatan set kalibrasi dan validasi terdiri dari campuran standar metamizol dan jamu referensi. Dimana, set kalibrasi dibuat dengan cara mencampurkan standar metamizol dan jamu referensi pada rentang konsentrasi 0%, 20%, 40%, 60%, 80%, dan 100%. Dengan adanya rentang perbedaan konsentrasi ini disebabkan penelitian ini difokuskan untuk mendeteksi kemurnian dari jamu pegal linu yang beredar di pasaran Kota Bandar Lampung. Kemudian dilakukan pengukuran menggunakan spektrofotometer FTIR. Komposisi set kalibrasi dari standar metamizol dan jamu referensi dapat dilihat pada Tabel 1.

Tabel 1. Set Kalibrasi Campuran Standar Metamizol dan Jamu Referensi

Konsentrasi (%)	Standar Metamizol (mg)	Jamu Referensi (mg)	Kategori
0	0	15	Murni
20	3	12	Campuran
40	6	9	Campuran
60	9	6	Campuran
80	12	3	Campuran
100	15	0	Murni

Set validasi dibuat dengan cara mencampurkan standar metamizol dan jamu referensi pada perbandingan konsentrasi 0%, 10%, 30%, 50%, 70%, 90%, dan 100%. Setelah diperoleh campuran set validasi dilakukan pengukuran menggunakan spektrofotometer FTIR. Komposisi set validasi dari standar metamizol dan jamu referensi dapat dilihat pada Tabel 2.

Tabel 2. Set Validasi Campuran Standar Metamizol dan Jamu Referensi

Konsentrasi (%)	Standar Metamizol (mg)	Jamu Referensi (mg)	Kategori
0	0	15	Murni
10	1.5	13.5	Campuran
30	4.5	10.5	Campuran
50	7.5	7.5	Campuran

70	10.5	4.5	Campuran
90	13.5	1.5	Campuran
100	15	0	Murni

3.3.5 Analisis dengan Menggunakan Spektrofotometer FTIR

Semua sampel yang sudah disiapkan diletakkan pada plat ATR. Kemudian melakukan optimasi dengan cara melakukan scanning sebanyak 32 kali pada kisaran bilangan gelombang $4000\text{--}650\text{ cm}^{-1}$ dengan resolusi 16 cm^{-1} . Pembacaan spektrum dilakukan pada waktu dan kondisi yang sama. Sebelum dilakukan analisis sampel dilakukan uji blanko terhadap udara. lalu Kristal ATR dibersihkan dengan menggunakan aseton (Rahayu dkk., 2024).

3.3.6 Analisis Data Kemometrika

Data spektrum FTIR yang akan diperoleh akan menjalani analisis menggunakan pendekatan kemometrika, yaitu *Principal Component Analysis* (PCA) dan *Partial Least Square* (PLS). Dalam analisis kualitatif, PCA bertujuan untuk mengklasifikasikan variabel yang saling berhubungan dan menggantinya dengan kelompok baru yang disebut komponen utama atau PC (*Principal Component*). Diambil data berupa hasil nilai absorbansi yang kemudian dianalisis menggunakan bantuan *Software Minitab 19* dan sampel akan menghasilkan *Score Plot* yang kemudian dikelompokkan berdasarkan kesamaan spektrum yang dimiliki oleh baku pembanding, berdasarkan intensitas serapan pada pola spektrum FTIR. Analisis PLS kemometrik dilakukan untuk analisis kuantitatif. Kemudian dilakukan penentuan nilai R^2 dan *Root Mean Square Error of Calibration* (RMSEC), dimana nilai R^2 yang baik mendekati 1 dan nilai RMSEC yang kecil (Rahayu dkk., 2024).

3.3.7 Analisis PCA dan PLS

Hasil dari data absorbansi spektrum FTIR selanjutnya akan diolah menggunakan metode PCA dan PLS dengan menggunakan *software* Minitab 19.

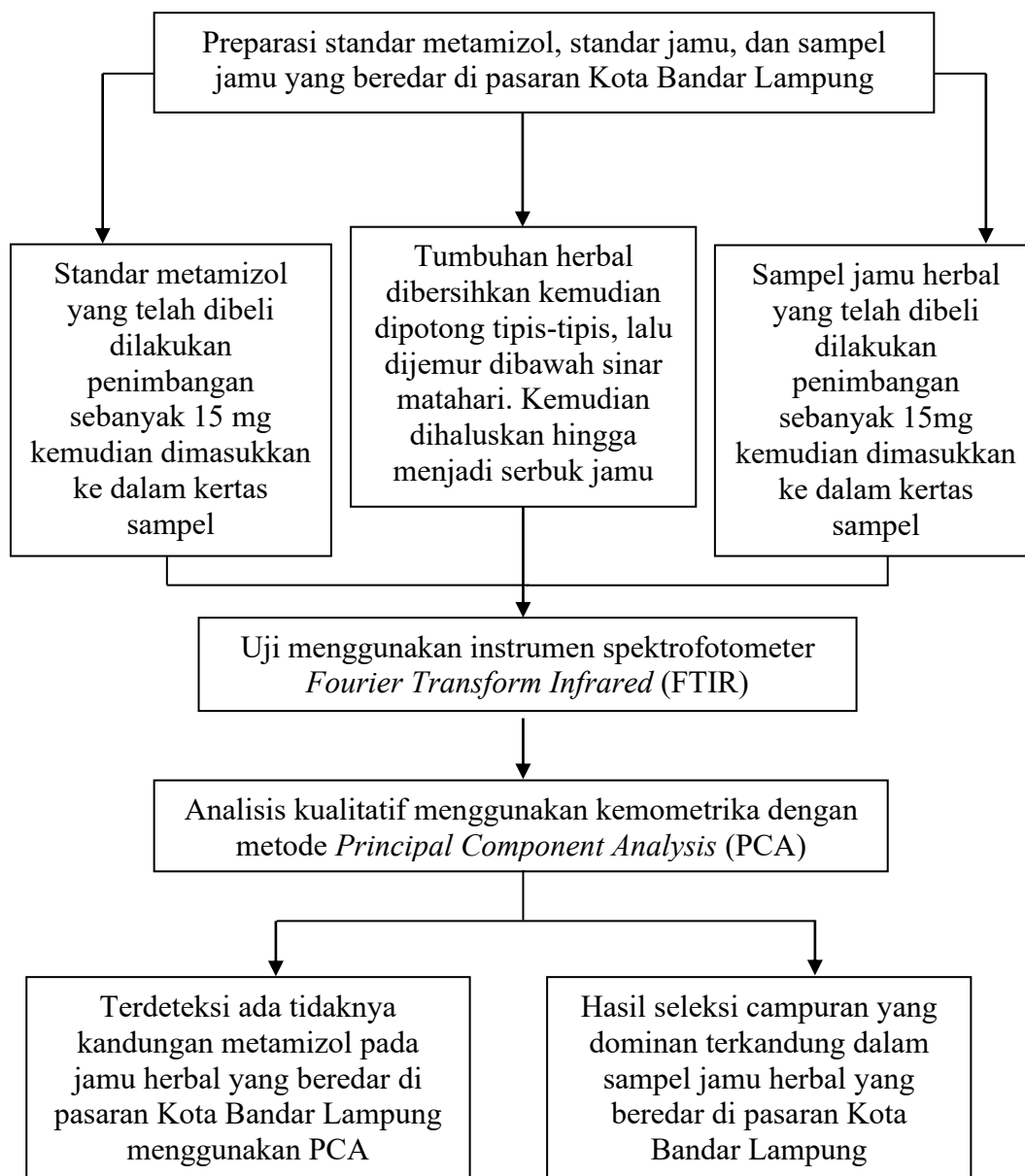
Menganalisis data pengoperasian PCA menggunakan *software* Minitab 19 dengan cara sebagai berikut:

1. Dibuka *Worksheet* Minitab 19 kemudian dimasukkan data.
2. Untuk analisis PCA, diklik: *Start* → *Multivariate* → *Principal Components*.
3. Kemudian, dimasukkan contoh variabel ke kotak variabel.
4. Diklik *Graph*, bagian ini mengandung informasi yang penting.
5. Untuk memperoleh hasil analisis maka diklik OK, maka dalam windows *session* yang berisi *output* (hasil) analisis PCA. Nilai-nilai yang mengandung kontribusi variabel untuk tiap komponen. Semakin besar suatu nilai koefisien, maka semakin besar kontribusi variabel terhadap nilai *principle components*.
6. Untuk mengedit graph supaya menampilkan label tiap titik, maka diklik kanan pada grafik lalu pilih: Add → Data Label: *Use labels from column*.
7. Diklik OK maka akan menampilkan hasil output (Rohman dkk., 2021).

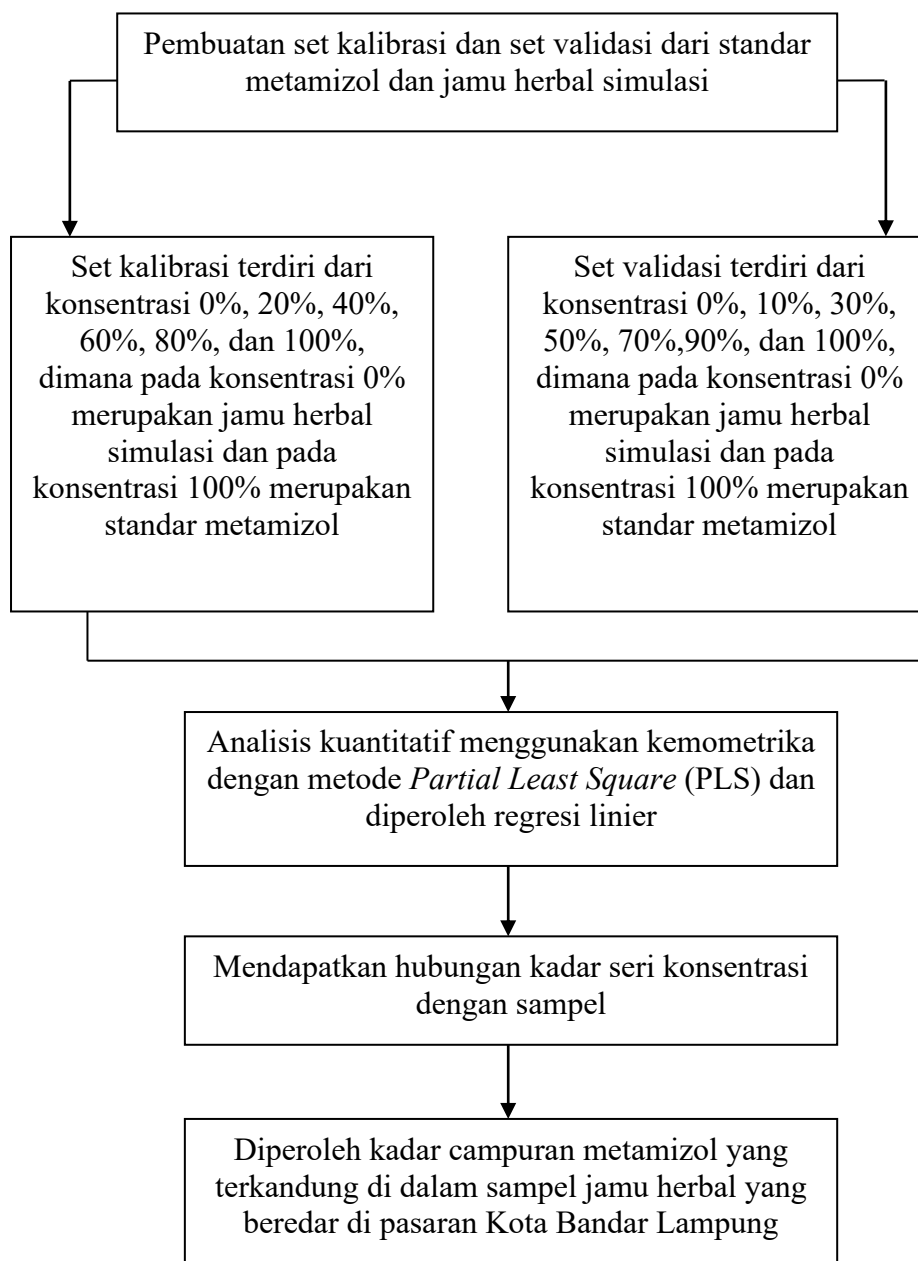
Menganalisis data pengoperasian PCA menggunakan *software* Minitab 19 dengan cara sebagai berikut:

1. Dibuka jendela Minitab 19.
2. Dimasukkan data dalam *Worksheet* Minitab 19.
3. Diklik *Start* → *Regression* → *Partial Least Square*.
4. Untuk respons diisi dengan C1, sedangkan untuk model diisi dengan A1-16.
5. Selanjutnya untuk melakukan validasi *leave one out*, diklik *Options* → pilih *leave one out* → diklik Ok, maka diperoleh output data (Rohman dkk., 2021).

3.4 Skema Penelitian



Gambar 6. Bagan Alir Penelitian Analisis Secara kualitatif



Gambar 7. Bagan Alir Penelitian Analisis Secara Kuantitatif

V. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

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

1. Berdasarkan analisis PCA menunjukan bahwa kedelapan sampel mengelompok pada standar jamu referensi, sedangkan pada sampel JH 4 berada di plot standar metamizol. Hal ini, mengindikasikan adanya campuran metamizol. Sehingga, dilakukan pemodelan metamizol dan jamu referensi menggunakan metode PLS.
2. Identifikasi kemurnian jamu pegal linu telah berhasil dilakukan dengan menggunakan spektrofotometer FTIR dan kemometrika (PCA), dimana didapatkan nilai kumulatif sebesar 93% dari PC1 dan PC2, sehingga kedua komponen utama tersebut sudah dapat memberikan informasi yang memadai untuk seluruh komponen.
3. Hasil pemodelan set kalibrasi menggunakan metode PLS menghasilkan nilai R^2 sebesar 0,999797 dengan nilai RMSEC sebesar 1,42063%
4. Hasil pemodelan set validasi menggunakan metode PLS menunjukan nilai R^2 sebesar 0,99986 dengan nilai RMSEP sebesar 0,0672%

5.2 Saran

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan, disarankan untuk menggunakan metode lainnya seperti *Linear Discriminant Analysis* (LDA), *Cluster Analysis* (CA), *Principal Component Regression* (PCR) dan sebagainya. Serta pengolahan data analisis kemometrika dilakukan menggunakan aplikasi *Unscramble*. Sehingga data yang diperoleh dari software tersebut lebih lengkap dan lebih akurat.

DAFTAR PUSTAKA

- Ahdaini, M. P. 2013. Analisis Minyak Babi pada Krim Pelembab Wajah yang Mengandung Minyak Zaitun dengan Menggunakan *Spektroskopi Fourier Transform Infrared* (FTIR). *Skripsi*. Universitas Islam Negeri Syarif Hidayatullah. Jakarta.
- Aouidi, F., Dupuy, N., Artaud, J., Roussos, S., Msallem, M., Perraud-Gaime, I., and Hamdi, M. 2012. Discrimination of five Tunisian cultivars by Mid InfraRed spectroscopy combined with chemometric analyses of olive *Olea europaea* leaves. *Food Chemistry*, 131(1), 360–366.
- Ariffin, S. H., A Wahab, I., Hassan, Y., and Abd Wahab, M. S. 2021. Adulterated Traditional-Herbal Medicinal Products and Its Safety Signals in Malaysia. *Drug, Healthcare and Patient Safety*, 13, 133–140.
- Aronson, J.K. 2010. *Meyler's Side Effects of Analgesics and Anti-inflammatory Drugs*. Elsevier B.V.Oxford UK.
- Biancolillo, A., & Marini, F. 2018. Chemometrics Applied to Plant Spectral Analysis. In *Comprehensive Analytical Chemistry* (1st ed., Vol. 80). Elsevier B.V.
- Bintang, M. 2010. *Biokimia: teknik penelitian*. Erlangga. Jakarta.
- Bosque-Sendra, J. M., Cuadros-Rodríguez, L., Ruiz-Samblás, C., and de la Mata, A. P. 2012. Combining chromatography and chemometrics for the characterization and authentication of fats and oils from triacylglycerol compositional data-A review. *Analytica Chimica Acta*, 724, 1–11.
- BPOM. 2006. *Bahaya Bahan Kimia Obat (BKO) yang Dibubuhkan ke dalam Obat Tradisional (Jamu)*.
- BPOM RI. 2014. Peraturan Badan Pengawasan Obat dan Makanan No 7 Tahun 2014 Tentang Pedoman Uji Toksisitas Nonklinis Secara In Vivo. *Badan Pengawas Obat Dan Makanan Republik Indonesia*, 1–165.
- Brereton, R. G. 2007. Introduction -Applied Chemometrics for Scientists. *Applied Chemometrics for Scientists*, 1–8.

- Cebi, N., Yilmaz, M. T., and Sagdic, O. 2017. A rapid ATR-FTIR spectroscopic method for detection of sibutramine adulteration in tea and coffee based on hierarchical cluster and principal component analyses. *Food Chemistry*, 229, 517–526.
- Dewi Sartika, Hilda Aprilia Wisnuwardhani, B. R. 2015. Optimasi Metode Ekstraksi Fase Padat dan KCKT Untuk Analisis Kuantitatif Bahan Kimia Obat Paracetamol dan Deksametason dalam Jamu Pegal Linu. *Prosiding Penelitian SPeSIA UNISBA*, 1(1), 45–52.
- Dubessy, J., Caumon, M. C., and Rull, F. 2012. Applications of Raman Spectroscopy to Earth Sciences and Cultural Heritage. *European Mineralogical Union and the Mineralogical Society of Great Britain & Ireland*, 12.
- Elfahmi, Woerdenbag, H. J., and Kayser, O. 2014. Jamu: Indonesian traditional herbal medicine towards rational phytopharmacological use. *Journal of Herbal Medicine*, 4(2), 51–73.
- Endro Suseno, J., & Firdausi, K. S. 2008. Rancang bangun spektroskopi FTIR (Fourier Transform Infrared) untuk penentuan kualitas susu sapi. *Berkala Fisika*, 11(1), 23-28.
- Fadzlillah, N. A., Che Man, Y. B., and Rohman, A. 2014. FTIR spectroscopy combined with chemometric for analysis of sesame oil adulterated with corn oil. *International Journal of Food Properties*, 17(6), 1275–1282.
- Fatimah, S., Rahayu, M., dan Indari, D. F. 2017. Analisis Antalgin dalam Jamu Pegal Linu yang Dijual di Pasar Beringharjo Yogyakarta. *Journal of Health*, 4(1), 29.
- Fatmarahmi, D. C., Susidarti, R. A., Swasono, R. T., and Rohman, A. 2021. Identification and Quantification of Metamizole in Traditional Herbal Medicines Using Spectroscopy FTIR-ATR Combined with Chemometrics. *Journal of Pharmacy and Technology*, 14(8), 4413–4419.
- Fatmarahmi, D. C., Susidarti, R. A., Rohman, A., and Swasono, R. T. 2024. The Green Analytical Method of Detecting Analgesic and Antiinflammation Drugs in Pain Reliever Herbal Using Spectroscopy FTIR-ATR Combined with Multivariate Analysis. *BIO Web of Conferences*, 135.
- Fauziah, S. S., Lestari, F., Lukmayani, Y., dan W, H. A. 2015. Pengaruh Pemberian Jamu Pegal Linu Mengandung Bahan Kimia Obat (BKO) Terhadap Fungsi Hati Tikus Wistar Jantan. *Kesehatan Surya Merdeka*, 96–103.
- Ferry Fernanda, M. A. H., dan Kusuma Wardani, R. 2022. Analisis Semikuantitatif Parasetamol Dalam Jamu Pegal Linu Menggunakan

- Pemrosesan Gambar Digital dari Hasil Kromatografi Lapis Tipis. *Pharmaceutical Journal of Indonesia*, 8(1), 71–77.
- Gitawati, R. 2013. Analysis of Adulterated Jamu Pegal Linu Obtained from the Market in Jakarta. *Buletin Penelitian Sistem Kesehatan*, 16(3), 269–274.
- Goodman, and G. 1996. Pharmacological Basic of Therapeutics, ninth edition. In *JAMA: The Journal of the American Medical Association: Vol. XXVII* (Issue 16).
- Handayani, S., Prasetyo, A., dan Rahayu, E. 2021. Pengaruh Teknik Pencucian Terhadap Kualitas Bahan Baku Jamu Tradisional. *Jurnal Fitofarmaka Indonesia*, 8(1), 10–16.
- Huber, M., Andersohn, F., Sarganas, G., Brönder, E., Klimpel, A., Thoma, M., Konzen, C., Kreutz, R., and Garbe, E. 2015. Metamizole-induced agranulocytosis revisited: Results from the prospective Berlin Case-Control Surveillance Study. *European Journal of Clinical Pharmacology*, 71(2), 219–227.
- Jayanti, R., Aprilia, H., dan Lukmayani, Y. 2015. Analisis Kualitatif Bahan Kimia Obat (BKO) Glibenklamid dalam Sediaan Jamu Diabetes yang Beredar Dipasaran. *Dewanto*, 2007, 1(2), 649–653.
- Kepala BPOM RI. 2023. Peraturan BPOM Nomor 25 Tahun 2023 tentang Kriteria dan Tata Laksana Registrasi Obat Bahan Alam. *Hukum Dan HAM RI*, 11, 1–16.
- Khoirunnisa, S. M. 2019. Identifikasi Dekametason dalam Jamu Pegal Linu Sediaan Serbuk yang Beredar di Pasar-pasar Kota Bandar Lampung secara Kromatografi Lapis Tipis. *Journal of Science and Application Technology*, 2(1), 94–101.
- Kurniawati, M., Ikawati, Z., dan Raharjo, B. 2012. Evaluasi Penggunaan Metamizol Di Beberapa Tempat Pelayanan Farmasi Di Kabupaten Cilacap. *Jurnal Manajemen Dan Pelayanan Farmasi*, 2(1), 50–55.
- Leo M.L., Nollet, F. T. 2015. *Handbook of Food Analysis - Two Volume Set* (3rd Editio). CRC Press.
- Lukman, H., Wulandari, L., dan Retnaningtyas, Y. 2016. Penentuan Kadar Flavonoid pada Ekstrak Daun Tanaman Menggunakan Metode NIR dan Kemometrik. *Pustaka Kesehatan*, 4(1), 8–13.
- Maqsuroh, F. H. 2018. Analisis minyak zaitun, sawit, babi, dan campuran berbasis data FTIR dengan kualifikasi menggunakan PCA dan CA. *Doctoral dissertation*. Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim. Malang.

- Martindale. 2009. Martindale: The Complete Drug Reference 38th edition. *Journal of Forensic and Legal Medicine*, 28(October), 54.
- Miller, J. N., and Miller, J. C. 2010. *Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry. 6th Ed.* In Pearson Pendidikan Terbatas.
- Miller, J. N., and Miller, J. C. 2005. *Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry : Fifth Edition.* In Akusherstvo i Ginekologiya.
- Muhrodi, O., dan Maesaroh, I. 2023. Identifikasi Bahan Kimia Obat Natrium Diklofenak Pada Jamu Pegal Linu Yang Dijual Di Kecamatan Garawangi. *Jurnal Farmaku (Farmasi Muhammadiyah Kuningan)*, 8(1), 31–36.
- Nugraha, R., Aprilia, H., dan Rusnadi, R. 2015. Pengembangan Alat Uji Carik Berbasis Polistiren Divinilbenzen (PSDVB) Untuk Identifikasi Bahan Kimia Obat Parasetamol Dalam Jamu Pegal Linu. *Prosiding Penelitian SPeSIA UNISBA*, 007, 415–420.
- Pratiwi, D. E., dan Harjoko, A. 2013. Implementasi Pengenalan Wajah Menggunakan PCA (*Principal Component Analysis*). *Ijeis*, 3(2), 175–184.
- Prayitno, Y. A., Emmawati, A., Prabowo, S., Candra, K. P., dan Rahmadi, A. 2021. Autentikasi Cepat Madu Hutan Kalimantan Timur Dengan Atr-Ftir Spektroskopi Kombinasi Analisis Kemometrika. *Jurnal Teknologi Dan Industri Pangan*, 32(1), 181–189.
- Rahayu, W. S., Buono, E. C., dan 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.
- Rajalahti, T., and Kvalheim, O. M. 2011. Multivariate data analysis in pharmaceuticals: A tutorial review. *International Journal of Pharmaceutics*, 417(1–2), 280–290.
- Roberts, E., Nunes, V. D., Buckner, S., Latchem, S., Constanti, M., Miller, P., Doherty, M., Zhang, W., Birrell, F., Porcheret, M., Dziedzic, K., Bernstein, I., Wise, E., and Conaghan, P. G. 2016. Paracetamol: Not as safe as we thought? A systematic literature review of observational studies. *Annals of the Rheumatic Diseases*, 75(3), 552–559.
- Rohaeti, E., Rafi, M., Syafitri, U. D., and Heryanto, R. 2015. Fourier transform infrared spectroscopy combined with chemometrics for discrimination of *Curcuma longa*, *Curcuma xanthorrhiza* and *Zingiber cassumunar*. *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 137, 1244–1249.

- Rohman, A., Irnawati., dan Riswanto, F. D. O. 2021. *Kemometrika*. Gadj Mada University Press. Yogyakarta.
- Rohman, A., and Man, Y. B. C. 2011. Potential Use of FTIR-ATR Spectroscopic Method for Determination of Virgin Coconut Oil and Extra Virgin Olive Oil in Ternary Mixture Systems. *Food Analytical Methods*, 4(2), 155–162.
- Rohman, A., Windarsih, A., Hossain, M. A. M., Johan, M. R., Ali, M. E., and Fadzilah, N. A. 2019. Application of near- and mid-infrared spectroscopy combined with chemometrics for discrimination and authentication of herbal products: A review. *Journal of Applied Pharmaceutical Science*, 9(3), 137–147.
- Rosyada, E., Muliasari, H., and Yuanita, E. 2019. Analysis of Diclofenac as drug chemical in jamu for rheumatism sold in Mataram city Analisis kandungan bahan kimia obat Natrium Diklofenak dalam jamu pegal linu yang dijual di Kota Mataram. *Jurnal Ilmiah Farmasi*, 15(1), 12–19.
- Shafirany, M. Z., Susilawati, Y., dan Musfiroh, I. 2019. Aplikasi Kemometrik dalam Penentuan Mutu Tumbuhan Obat. *Pharmauho: Jurnal Farmasi, Sains, Dan Kesehatan*, 4(2).
- 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 *Fourier Transform Infrared* (FTIR) Application and Genital Observation in Detecting Primate. *Jurnal Kedokteran Hewan*, 9(2), 156–160.
- Sri Rahayu, W., Cahyo Buono, E., dan Singgih Raharjo, A. 2024. Analisis Cepat Kandungan Metamizole dan Deksmetason pada Jamu Pegal Linu dengan Metode FTIR Kombinasi dengan Kemometrik Rapid Analysis of Metamizole and Dexamethasone in Traditional Herbal Preparations for Rheumatoid Arthritis Treatment with FTIR-Chemome. *Pharmaceutical Journal of Indonesia*, 20(02), 178–182.
- Wahyuni, A. S., dan Sujono, T. A. 2004. Studi Aktivitas Daya Analgetik Jamu Pegel Linu the Study of Analgesic Activity of Jamu Pegel Linu. *Jurnal Penelitian Sains Dan Teknologi*, 5(1), 21–32.
- WHO. 2005. National policy on traditional medicine and regulation of herbal medicines Report of a WHO global survey. *World Health*, May, 168.
- Widhihastuti, E. 2024. *Analysis Study of Methampyrone in Jamu Pegal Linu Circulating in Semarang City using Fourier Transform Infrared (FTIR) Spectrophotometry and UV-Vis Spectrophotometry Quantitative Analysis by UV-Vis Spectrophotometry*. 4(2).

- Yuliana, L., Pramudya, W., dan Sari, R. 2020. Evaluasi Pencampuran Serbuk Jamu Secara Homogen Untuk Produksi Skala Kecil. *Jurnal Industri Herbal*, 3(2), 88–93.
- Zaitun, A. M., dan Campuran, D. A. N. 2018. *MENGGUNAKAN PCA DAN CA SKRIPSI Oleh : FIKI HURUM MAQSUROH*.
- Zukowski, M., and Kotfis, K. 2009. Safety of metamizole and paracetamol for acute pain treatment. *Anestezjologia intensywna terapia*. 41(3), 170-175.