

Chemical Fingerprint Berbasis Spektroskopi Inframerah (ATR-FTIR) Dipadukan dengan Kemometrik untuk Kontrol Kualitas Daun Kratom (*Mitragyna Speciosa* Korth.)

Ragil¹, Dea Aninda¹, Rosiana Pitri¹, Pingkan Ramdhan Sailendra¹, Masriani Masriani^{1*}, Rudy Heryanto²

¹Program Studi Pendidikan Kimia, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Tanjungpura, Jl. Prof Dr H. Hadari Nawawi, Kota Pontianak, 78115, Kalimantan Barat, Indonesia

²Tropical Biopharmaca Research Center-Institute of Research and Community Services, IPB University, Jl. Taman Kencana No.3 Kampus IPB Taman Kencana, Bogor 16128, Indonesia

*Penulis korespondensi: masriani@fkip.untan.ac.id

DOI: <https://doi.org/10.24198/cna.v12.n1.51276>

Abstrak: Kratom dijuluki sebagai daun narkotika dari Kalimantan yang memiliki berbagai efek biologi seperti antiinflamasi dan antinoseptif. Secara tradisional daun kratom digunakan untuk menambah stamina, mengobati diare, sakit perut, susah tidur, kolesterol, asam urat, dan diabetes. Permintaan daun kratom di pasaran begitu tinggi sehingga memunculkan masalah berupa pemalsuan daun tersebut dari tanaman yang memiliki kemiripan morfologi. Penelitian ini bertujuan mengembangkan metode analisis untuk mengidentifikasi dan mengautentikasi daun kratom dari daun jambu biji. Data hasil analisis ATR-FTIR dikombinasikan dengan analisis kemometrika untuk mengklasifikasikan serta mengelompokkan data tersebut, sehingga dapat membedakan daun kratom dan daun jambu biji. Metode analisis ATR-FTIR yang dipadukan dengan analisis kemometrik melalui pemodelan PCA (*Principal Component Analysis*) dan PLS-DA (*Partial Least Squares Discriminant Analysis*) mampu membedakan daun kratom dan daun jambu biji. PCA dengan nilai PC 90% mampu mengelompokkan sampel daun kratom dan daun jambu biji. Model PLS-DA berhasil memprediksi keaslian sampel uji daun kratom yang telah dicampur dengan daun jambu biji. Pembuatan model prediksi daun kratom dengan PLS menghasilkan R² kalibrasi, R² prediksi, RMSEC, dan RMSEV masing-masing sebesar 0,9068; 0,8641; 0,1366 dan 0,1666. Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa spektra ATR-FTIR dan kemometrik dapat digunakan untuk membedakan daun kratom dengan daun jambu biji serta mampu memprediksi keaslian daun kratom yang dipalsukan.

Kata kunci: ATR-FTIR, daun kratom, daun jambu biji, kemometrik, autentikasi, spektroskopi inframerah

Abstract: Kratom is dubbed as the narcotic leaf from Borneo that has various biological effects such as anti-inflammatory and antinociceptive. Traditionally kratom leaves used to increase stamina, treat diarrhea, stomach pain, insomnia, cholesterol, gout, and diabetes. The demand for kratom leaves in the market is so high that the problem in the form of adulteration of these leaves from plants that have morphological similarities. This research aims to develop an analytical method to identify and authenticate kratom leaves from guava leaves. Data from ATR-FTIR analysis analysis was combined with chemometric analysis to classify and categorize the data, so as to distinguish kratom leaves and guava leaves. ATR-FTIR analysis method combined with chemometric analysis through PCA modeling. chemometric analysis through PCA (*Principal Component Analysis*) and PLS modeling. Component Analysis) and PLS-DA (*Partial Least Squares Discriminant Analysis*) is able to distinguish between kratom leaves and guava leaves. PCA with a PC value of 90% able to categorize kratom leaf and guava leaf samples. The PLS-DA model successfully predicted the authenticity of the kratom leaf test samples that have been mixed with guava leaves. Modeling the prediction of kratom leaves with PLS resulted in R² calibration, R² prediction, RMSEC, and RMSEV of RMSEV respectively amounted to 0.9068; 0.8641; 0.1366 and 0.1666. The results of this study show that ATR-FTIR and chemometric spectra can be used to differentiate kratom leaves from guava leaves and are able to predict the authenticity of fake kratom leaves.

Keywords: ATR-FTIR, kratom leaves, guava leaves, chemometrics, authentication, infrared spectroscopy

PENDAHULUAN

Kratom atau tanaman dengan nama latin *Mitragyna speciosa* Korth. dijuluki sebagai daun surga atau daun narkotika dari Kalimantan. Tanaman ini termasuk ke dalam famili Rubiaceae yang secara tradisional daunnya digunakan untuk menambah stamina, mengobati diare, sakit perut, susah tidur, kolesterol, asam urat, dan diabetes (Prozialeck *et al.* 2020). Pada dosis yang rendah, kratom sering dimanfaatkan untuk meningkatkan konsentrasi, energi, dan kewaspadaan. Beberapa laporan menunjukkan bahwa kratom memiliki berbagai efek biologi seperti antiinflamasi, antinoseptif, dan sitotoksik (Boffa *et al.* 2018). Di Eropa dan Amerika, kratom banyak digunakan untuk mengobati nyeri, memperbaiki kondisi emosi dan mental serta mengobati gejala putus obat senyawa opiat (Raini 2017).

Kratom mengandung lebih dari 50 senyawa, 40 diantaranya adalah alkaloid (Flores-Bocanegra *et al.* 2020) dan sisanya senyawa flavonoid, fenolik, triterpenoid, dan saponin (Meireles *et al.* 2019). Alkaloid utama adalah mitraginin (66,2%) dan turunannya, painantin (8,6%), spesioginin (6,6%), 7-hidroksimitraginin (2%), dan spesioliatin (0,8%) (Firmansyah *et al.* 2021). Kandungan alkaloid pada kratom diketahui memiliki sifat psikoaktif (Ahmad *et al.* 2022).

Produk kratom telah dijual secara online dan telah di ekspor ke Eropa, Amerika, dan negara Asia lainnya. Berdasarkan data Perkindo, sekitar 4.800 ton kratom di ekspor ke Amerika dan Eropa pada tahun 2018. Sekitar 90% ekspor kratom Indonesia berasal dari Kalimantan Barat. Firmansyah *et al.* (2021) menyebutkan harga untuk 5 gram ekstrak kratom berkisar \$35 sampai \$45. Permintaan daun kratom yang tinggi di pasaran memunculkan masalah berupa pemalsuan daun tersebut dari tanaman yang memiliki kemiripan morfologi. Beberapa laporan menunjukkan daun kratom sering dipalsukan dengan daun jambu biji karena memiliki bentuk daun yang mirip. Bahan baku penyusun produk berbasis kratom yang dipalsukan dapat menimbulkan masalah serius karena dapat menyebabkan perbedaan efek farmakologis dan mengancam keamanan konsumen. Oleh karena itu sangat penting dilakukan kontrol kualitas terhadap produk kratom yang banyak diperjualbelikan dalam bentuk bubuk, ekstrak, dan cair.

Kontrol kualitas bahan baku atau ekstrak tanaman obat menggunakan senyawa penciri dari satu atau beberapa senyawa aktif merupakan metode yang sering digunakan (Li *et al.* 2008). Namun, penggunaan metode tersebut memiliki kekurangan berupa terbatasnya jumlah senyawa penciri atau tidak khas. Selain itu khasiat suatu tanaman obat tidak hanya dipengaruhi oleh senyawa tunggal tetapi dapat disebabkan oleh 2 sinergitas senyawa-senyawa penyusunnya. Oleh karena itu kontrol kualitas

multikomponen dengan pola spektrum sidik jari suatu tanaman obat menjadi metode pilihan karena memberikan informasi yang akurat dan nyata.

Kontrol kualitas tanaman obat menggunakan spektroskopi inframerah telah banyak dilakukan seperti jahe merah menggunakan metode spektroskopi FTIR yang dikombinasikan dengan analisis multivariat kemometrik (Purwakusumah *et al.* 2014). Selain itu, analisis autentikasi lemak dan minyak pada produk pangan juga menggunakan metode tersebut (Rohman *et al.* 2020). Gabungan metode ini sangat menguntungkan karena spektroskopi inframerah akan menggambarkan karakteristik secara keseluruhan dari suatu sampel (Shafirany *et al.* 2018).

Pola spektrum inframerah yang bersifat kompleks dan tumpang tindih dapat diinterpretasikan dengan analisis data multivariat atau kemometrik untuk klasifikasi dan kuantifikasi (Rohman *et al.* 2020). Klasifikasi kemometrik seperti *Principal Component Analysis* (PCA) memberikan kemudahan pengelompokan spesies tumbuhan, sedangkan kuantifikasi kemometrik seperti *Partial Least Squares-Discriminant Analysis* (PLS-DA) dapat memberikan kemampuan prediksi tingkat pemalsuan (Yulia *et al.* 2023).

Spektrum sidik jari kimia daun kratom yang dapat diidentifikasi akan memudahkan kontrol kualitas produk daun kratom yang beredar dimasyarakat. Penggunaan metode spektroskopi ATR-FTIR yang dipadukan dengan kemometrik menggunakan klasifikasi PCA dan kuantifikasi PLS-DA akan mempercepat proses pengenalan keberadaan dan kebenaran daun kratom dalam produk. Dengan demikian, pemalsuan kratom dapat dicegah dan keamanan konsumen dapat terjamin.

Hasil penelusuran pustaka terkait penerapan spektroskopi ATR-FTIR dan kemometrik pada kontrol kualitas daun kratom belum ditemukan, sehingga perlu dilakukannya pengembangan metode klasifikasi dan kuantifikasi daun kratom dari daun jambu biji sebagai kontrol kualitas. Oleh karena itu, dalam artikel ini kami mengembangkan metode identifikasi dan autentikasi sebagai kontrol kualitas daun kratom dari tumbuhan yang memiliki morfologi daun yang sama (daun jambu biji) menggunakan kombinasi spektroskopi ATR-FTIR dan kemometrik.

BAHAN DAN METODE

Alat dan Bahan

Alat yang digunakan dalam penelitian ini adalah sonikator (Elma transsonic digital S), *rotary vaccum evaporator* (Heidolph), neraca analitik, spektrofotometer ATR-FTIR (Bruker alpha), dan perangkat lunak The unscumber X 10.4. Bahan yang digunakan dalam penelitian ini yaitu daun kratom hijau, kratom merah, dan putih yang

diperoleh dari tujuh kabupaten/kota, yaitu Kota Pontianak, Kabupaten Kubu Raya, Ketapang, Kayong Utara, Sambas, Sintang, dan Kabupaten Kapuas Hulu, daun jambu biji yang diperoleh dari tiga kabupaten, yaitu kota Pontianak, Kabupaten Sambas dan Ketapang, serbuk kratom dari PT Kreasi Alam Borneo, metanol pa (merck), dan akuades.

Pengumpulan dan Penyiapan sampel

Sampel berupa daun kratom hijau, merah, putih yang dikumpulkan dari tujuh kabupaten di Kalimantan Barat diperoleh dari tujuh kabupaten/kota. Selain itu, sampel daun kratom juga dikumpulkan dari PT Kreasi Alam Borneo dalam bentuk serbuk (Tabel 1). Sampel daun jambu biji dikumpulkan dari tiga kabupaten di Kalimantan Barat yakni kota Pontianak, Kabupaten Sambas dan Ketapang (Tabel 2).

Tabel 1. Daerah Pengumpulan Sampel Daun Kratom

No	Varian	Wilayah
1	Merah	Pontianak, Kalbar
2	Merah	Pontianak, Kalbar
3	Merah	Kuburaya, Kalbar
4	Merah	Kuburaya, Kalbar
5	Merah	Kuburaya, Kalbar
6	Merah	Kuburaya, Kalbar
7	Merah	Kuburaya, Kalbar
8	Hijau	Kuburaya, Kalbar
9	Merah	Ketapang, Kalbar
10	Merah	Ketapang, Kalbar
11	Merah	Kayong Utara, Kalbar
12	Merah	Sambas, Kalbar
13	Putih	Sambas, Kalbar
14	Putih	Sintang, Kalbar
15	Merah	Kapuas Hulu, Kalbar
16	Merah	Kapuas Hulu, Kalbar
17	Merah	Kapuas Hulu, Kalbar
18	Merah	Kapuas Hulu, Kalbar
19	Merah	Kapuas Hulu, Kalbar
20	Merah	Kapuas Hulu, Kalbar
21	Putih	Kapuas Hulu, Kalbar
22	Putih	Kapuas Hulu, Kalbar
23	Hijau	Kapuas Hulu, Kalbar
24	Merah	PT. Kreasi Alam Borneo
25	Hijau	PT. Kreasi Alam Borneo
26	Putih	PT. Kreasi Alam Borneo

Tabel 2. Daerah Pengumpulan Sampel Daun Jambu Biji

No	Jenis	Wilayah
1	Daun Jambu biji	Sambas, Kalbar
2	Daun Jambu biji	Sambas, Kalbar
3	Daun Jambu biji	Pontianak, Kalbar
4	Daun Jambu biji	Pontianak, Kalbar
5	Daun Jambu biji	Pontianak, Kalbar
6	Daun Jambu biji	Pontianak, Kalbar
7	Daun Jambu biji	Ketapang, Kalbar
8	Daun Jambu biji	Ketapang, Kalbar

Sampel yang dalam bentuk daun segar dibersihkan dan dikeringanginkan selama kurang lebih satu minggu di ruangan (tidak terkena sinar matahari secara langsung) hingga mengering. Sampel yang telah kering dihaluskan dan dibuat serbuk menggunakan blender. Simplisia yang dihasilkan dilakukan pengujian kadar air untuk memastikan mutu simplisia yang digunakan. Penentuan kadar air simplisia dilakukan dengan cara menimbang sebanyak 2 gram simplisia sampel. Lalu dimasukkan ke dalam cawan kosong yang telah dipanaskan dan dan ditimbang. Simplisia dioven selama 3 jam pada suhu 105°C. Setelah itu didinginkan cawan dan simplisia di dalam desikator selama 30 menit kemudian ditimbang. Kadar air yang baik untuk simplisia adalah dibawah 10% (Lestari *et al.* 2018).

Selanjutnya sebanyak 2 gram simplisia dari semua sampel ditambahkan 20 mL metanol PA dan disonikasi dengan kecepatan 40 Hz selama 30 menit (Fahmi 2020). Ekstrak metanol yang dihasilkan dipisahkan menggunakan *vacuum rotary evaporator* pada suhu 50° C. Kemudian dibuat ekstrak campuran antara daun kratom dan daun jambu biji dengan rasio daun kratom 80%, 75%, 50%, dan 25%

Pembuatan Spektrum ATR-FTIR

Diambil sejumlah tertentu ekstrak pekat semua sampel dan langsung diletakkan di tempat sampel secara merata pada area *scanning* inframerah ATR-FTIR (Bruker alpha). Satu sampel dipindai sebanyak 3 kali (langkah tersebut diulangi untuk semua sampel). Digunakan software Bruker OPUS untuk pengukuran, pemrosesan dan evaluasi ATR-FTIR. Hasil pemindaian disajikan dalam 2 bentuk file yakni DPT dan JcampDX.

Analisis Data dan Pembuatan Model Identifikasi dan Autentikasi

Dilakukan perlakuan pendahuluan berupa pemrosesan sinyal pada setiap spektrum ATR-FTIR yang dihasilkan yaitu *smoothing*, koreksi garis dasar dan normalisasi (Siregar *et al.* 2015). Pembuatan model identifikasi dan autentikasi daun kratom dilakukan dengan menggunakan data absorbans pada bilangan gelombang 1800-600 cm⁻¹. Analisis multivariat yang digunakan yaitu *Principal Component Analysis* (PCA) dan *Partial Least Square Discriminant Analysis* (PLS-DA). Perangkat lunak yang digunakan dalam pembuatan model tersebut yaitu *The Unscrambler X 10.4* (Camosoftware).

HASIL DAN PEMBAHASAN

Spektrum ATR-FTIR Daun Kratom dan Daun Jambu Biji

Sampel-sampel yang telah dikeringkan dan dibuat serbuk, diekstraksi menggunakan pelarut metanol dan

metode sonikasi selama 30 menit pada 40 Hz. Pemilihan metode sonikasi untuk mengekstraksi sampel karena mempunyai beberapa keuntungan, yakni murah, sederhana, dan ukuran sampel yang dapat diekstraksi beragam. Selain itu, ekstraksi dengan gelombang ultrasonik juga dapat mempercepat waktu ekstraksi karena terjadi kontak antara sampel dan pelarut semakin cepat sehingga perpindahan massa metabolit bioaktif dari sel tumbuhan ke pelarut akan semakin cepat (Ashley *et al.* 2001).

Setelah diperoleh ekstrak metanol pada semua sampel, dipekatkan menggunakan *vacuum rotary evaporator* pada suhu 50 C. Ekstrak yang telah pekat diambil sejumlah tertentu dan letakkan diatas area untuk *scanning* sampel pada instrumentasi ATR-FTIR. Dilakukan pengulangan sebanyak 3 kali untuk setiap sampel. Profil spektrum dari ekstrak metanol daun kratom dan daun jambu memiliki pola yang hampir sama. Hal ini menunjukkan ada kemiripan dari segi karakteristik senyawa kimianya. Pola spektrum dari daun kratom dan daun jambu biji dapat dilihat pada Gambar 1.

Gugus fungsi yang teridentifikasi digunakan sebagai penciri dari kedua tumbuhan yaitu daun kratom dan daun jambu biji. Rentang bilangan gelombang yang dihasilkan pada spektrum IR yaitu 4000-600 cm^{-1} . Pada daun kratom di rentang bilangan gelombang 3340-3300 cm^{-1} terdapat gugus N-H dan pada serapan pita 2890-2880 cm^{-1} mengandung gugus C-H (Jintawiwat *et al.* 2023). Pada bilangan gelombang 1639 cm^{-1} terdapat gugus C=O. Serapan pada bilangan gelombang 1500-1464 cm^{-1} menunjukkan gugus C=C (cincin aromatik). Kemudian pada area bilangan gelombang 1100 cm^{-1}

menunjukkan adanya gugus C-O-C eter (Sani 2021; Suryandari *et al.* 2018).

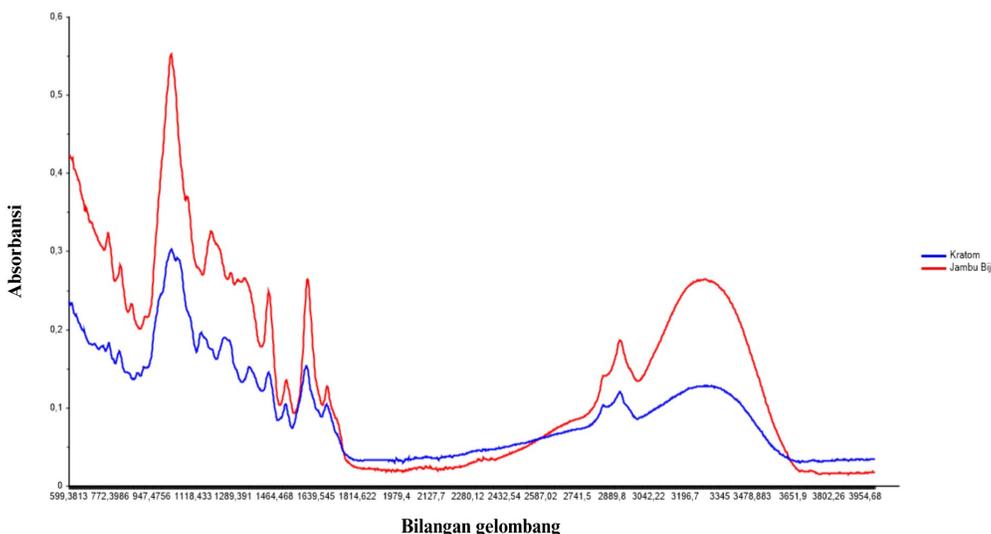
Pada daun jambu biji dalam hal ini ekstrak didapatkan serapan yang melebar dan kuat pada bilangan gelombang 3400-3200 cm^{-1} , yang diduga sebagai gugus fungsi O-H, serta adanya serapan pada bilangan gelombang 1639-1600 cm^{-1} yang merupakan area gugus fungsi karbonil. Kemudian adanya serapan C-O pada bilangan gelombang 1100-1000 cm^{-1} . Serapan pada bilangan gelombang 2089 cm^{-1} adanya gugus C-H (Jeyasundari *et al.* 2017; Sani 2021; Sari *et al.* 2022).

Pembuatan Model Identifikasi dan Kuantifikasi

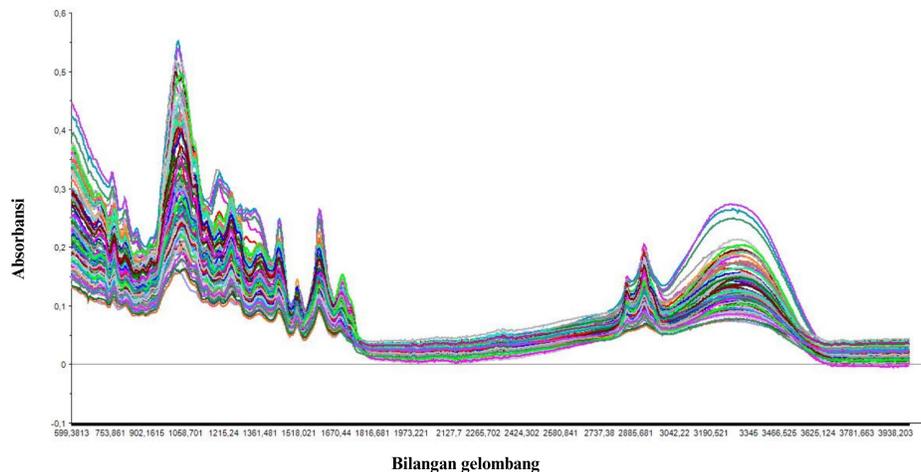
Spektra yang dihasilkan dari daun kratom dan daun jambu biji memiliki pola spektrum yang hampir sama. Terlihat pada Gambar 2 bahwa spektra yang dihasilkan kompleks dan tumpang tindih. Hal ini membuat sulit untuk menginterpretasikan secara visual perbedaannya. Oleh karena itu, diperlukan analisis kemometrik untuk membedakan spektrum dari daun kratom dan daun jambu biji.

Spektra IR yang dihasilkan dari daun kratom dan daun jambu biji dikelompokkan berdasarkan spesiesnya masing-masing menggunakan *Principal Component Analysis* (PCA). PC melakukan reduksi variabel-variabel yang dimuat dalam spektrum menjadi variabel-variabel utama saja. Proses reduksi ini dapat membuat daun kratom dan daun jambu biji terkelompokkan berdasarkan korelasi informasi variabel yang dimiliki. Kemiripan sampel-sampel disebabkan oleh korelasi antar sampel (Siregar *et al.*, 2015).

Metode PCA yang digunakan belum mampu mengelompokkan spektra asli baik tanpa pemrosesan



Gambar 1. Spektra IR daun kratom (biru) dan daun jambu biji (merah)



Gambar 2. Plot line spektra IR daun kratom dan daun jambu biji

maupun dengan pemrosesan (Gambar 3A dan B). Hal ini dikarenakan masih terdapat noise dan pergeseran garis dasar. Pemrosesan yang dilakukan berupa *smoothing*, *baseline*, dan *de-trending*. Hal ini sesuai dengan Peris-Diaz *et al.* (2021) menyatakan bahwa pemrosesan spektroskopi bisa dilakukan dengan *smoothing*, *baseline* dan *detrending*. Selanjutnya untuk mendapatkan hasil PCA yang lebih baik dilakukan segmentasi bilangan gelombang yaitu pada area 1800-600 cm^{-1} . Bilangan gelombang area 1800-600 cm^{-1} merupakan area sidik jari (*fingerprint*) dalam spektroskopi inframerah tengah (Balan *et al.* 2019). Pada area sidik jari, spektra yang dihasilkan memiliki spektra yang unik dan menjadi penciri karena setiap molekul menghasilkan spektra yang berbeda (Alauhdin *et al.* 2021).

Segmentasi bilangan gelombang dilakukan untuk meningkatkan kualitas PCA, akan tetapi juga dapat mengurangi hasil analisis karena adanya penghilangan informasi penting di dalam spektrum (Zou *et al.* 2005). Gambar 3(C) menunjukkan pengelompokan daun kratom, daun jambu biji, dan campuran ekstrak antara daun kratom-daun jambu biji dengan rasio daun kratom 50% (CMPR50) dan 75% (CMPR75) pada segmentasi bilangan gelombang 1800-600 cm^{-1} . Hasil PCA yang diberikan sudah mampu mengelompok pada masing-masing grup yaitu daun kratom, daun jambu biji dan campuran daun kratom-daun jambu biji. Nilai PC yang diperoleh sebesar 90%.

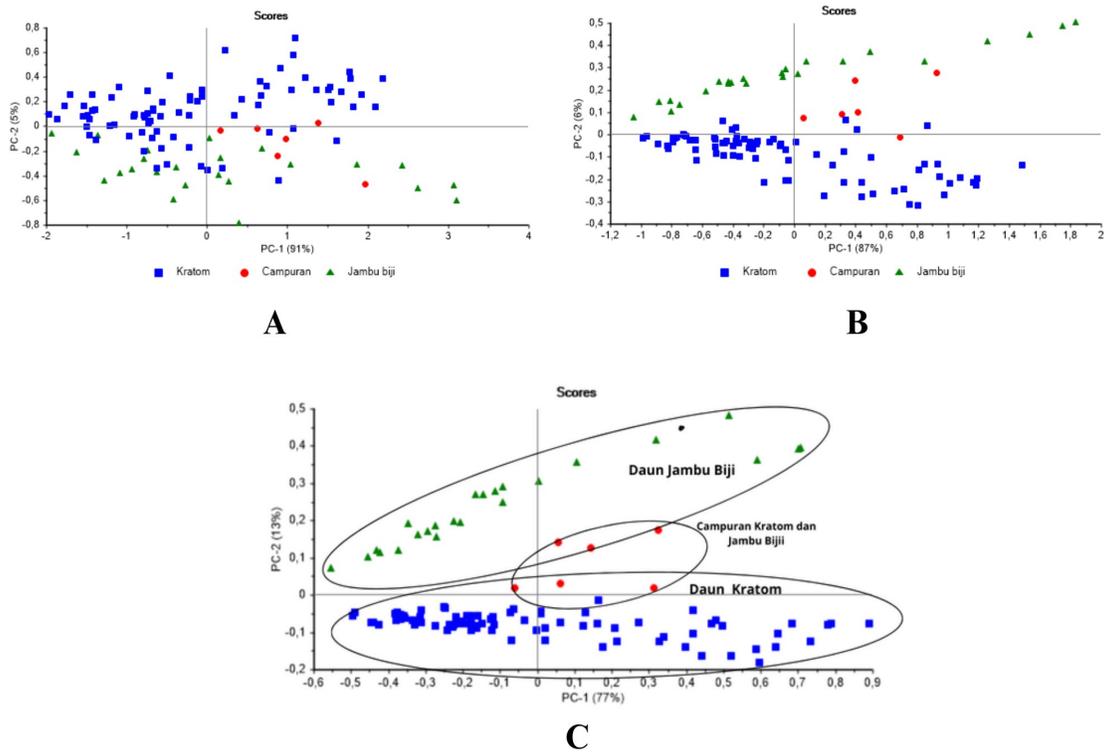
Pemisahan yang paling baik dan memiliki nilai PC yang tinggi dari analisis PCA akan digunakan sebagai model PLS-DA. Hasil dari *score plot* pada Gambar 3(C) yang akan dijadikan model PLS-DA. Pengelompokan sampel dengan PLS-DA dilakukan terhadap 2 matriks, yaitu matriks X berasal dari data absorbansi ATR-FTIR dan matriks Y adalah matriks

respon untuk setiap sampel. Nilai 1 diberikan untuk sampel anggota kelompok dan 0 untuk sampel bukan anggota kelompok. Model dari PLS dikatakan baik apabila nilai kalibrasi dan validasi silang untuk R^2 -nya saling berdekatan. 1. Nilai korelasi harus besar dan nilai galat harus kecil (Baranska *et al.* 2005).

Model regresi yang baik dapat dilihat dari nilai korelasi (R^2), RMSECV, dan kemiringan garis regresi (*Slope*) pada hasil kalibrasi dan prediksi. Model regresi semakin bagus jika nilai korelasi besar, RMSECV kecil, dan kemiringan garis (*slope*) mendekati 1 (45°) (Naes *et al.* 2017). Tabel 3 menunjukkan nilai model PLS berupa R^2 , RMSE, *offset* dan *slope* untuk sampel daun kratom dengan non kratom (daun jambu biji, campuran daun kratom-daun jambu). Hasil yang ditunjukkan pada Tabel 3 bahwa model PLS yang dibangun telah baik dan layak karena nilai R^2 mendekati 1, RMSE mendekati nol dan nilai antara kalibrasi dan validasi tidak berjauhan.

Model kalibrasi yang telah dibuat digunakan untuk memprediksi keaslian sampel yang telah dicampur antara daun kratom dan daun jambu biji pada dengan komposisi daun kratom 25% (CMPR 25) dan campuran daun kratom dengan daun jambu biji dengan komposisi daun kratom 80% (CMPR 80). Y1 adalah daun kratom akan bernilai satu, sedangkan daun jambu biji dan campuran ekstrak daun kratom daun jambu biji (50:50 & 75:2) akan bernilai nol. Y2 adalah daun jambu biji dan campuran ekstrak daun kratom-daun jambu biji (50:50 & 75:25) akan bernilai satu, sedangkan daun kratom akan bernilai nol. Hasil prediksi sampel dikatakan berhasil apabila nilainya mendekati 1 (Siregar *et al.* 2015).

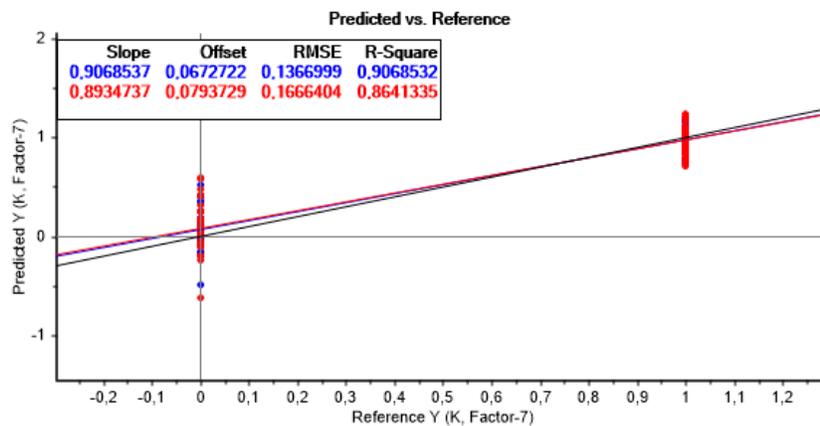
Hasil nilai prediksi pada model PLS-DA sampel yang bukan asli kratom yakni kode sampel CMPR25 dan kode sampel CMPR80 ditunjukkan pada Tabel 4



Gambar 3. Score plot PCA (A) spektra asli tanpa pemrosesan, (B) spektra dengan pemrosesan, dan (C) spektra segmentasi bilangan gelombang 1800-600 cm^{-1} dengan pemrosesan

Tabel 3. Nilai Parameter Model PLS Kalibrasi dan Validasi sampel daun kratom dengan daun jambu biji dan campuran ekstrak daun kratom-jambu biji

Kalibrasi				Validasi			
R ²	RMSE	Offset	Sloope	R ²	RMSE	Offset	Sloope
0.9068	0.1366	0.0672	0.9068	0.8641	0.1666	0.0793	0.8934



Gambar 4. Model Kalibrasi dan Prediksi menggunakan PLS-DA daun kratom

Tabel 4. Nilai prediksi pada model PLS-DA campuran ekstrak daun kratom-daun jambu biji

Sampel	Nilai Prediksi Model PLS-DA	
	Prediksi	Deviasi
CMPR25-A	1,0986	0,1120
CMPR25-B	1,1553	0,1164
CMPR25-C	1,0805	0,1016
CMPR80-A	0,5497	0,2584
CMPR80-B	0,5239	0,1924
CMPR80-C	0,5856	0,2218

yang memperlihatkan bahwa sampel uji campuran ekstrak memiliki nilai prediksi mendekati 1 apabila dibandingkan dengan kelompok non kratom (daun jambu biji dan campuran daun kratom dengan daun jambu biji). Hal ini dapat dikatakan bahwa sampel uji daun kratom yang dicampur dengan daun jambu biji tersebut bukan asli daun kratom. Dengan demikian, keaslian daun kratom dapat diperoleh menggunakan model PLS-DA ini.

KESIMPULAN

Kesimpulan yang didapat dari penelitian ini adalah metode analisis ATR-FTIR yang dipadukan dengan kemometrik melalui pemodelan PCA dan PLS-DA mampu membedakan daun kratom dan daun jambu biji. PCA yang dihasilkan pada penelitian ini mengelompok berdasarkan spesiesnya dan memiliki nilai PC 90%. Pengelompokan juga dilakukan dengan PLS-DA dan sampel uji berupa campuran ekstrak daun kratom dengan daun jambu biji pada rasio 25:75 & 80:20 dapat diprediksi keaslian daun kratom yang dipalsukan. Pembuatan model prediksi sampel uji dengan PLS menghasilkan model yang sangat baik karena nilai R² yang dihasilkan mendekati 1 dan RMSE yang dihasilkan mendekati nol untuk model kalibrasi maupun prediksinya.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terimakasih kepada Kementerian Pendidikan dan Kebudayaan yang telah membiayai kegiatan ini melalui pendanaan PKM, Universitas Tanjungpura, Laboratorium Biofarmaka IPB, Novatech Research & Laboratorium Equipment selaku penyedia instrumentasi ATR-FTIR, Rudy Heryanto, M.Si selaku Dosen Kemometrik IPB, Ibu Dr. Masriani, M.Si. Apt selaku dosen pembimbing yang telah memberikan arahan sehingga riset ini dapat selesai dengan baik.

DAFTAR PUSTAKA

Ahmad, I., Prabowo, W.C., Arifuddin, M., Fadraersada, J., Indriyanti, N., Herman, H., Purwoko, R.Y., Nainu, F., Rahmadi, A., Paramita, S., Kuncoro, H., Mita, N., Narsa, A. C., Prasetya, F., Ibrahim, A., Rijai, L., Alam,

- G., Mun'im, A. & Dej-adisai, S. (2022). *Mitragyna* species as pharmacological agents: from abuse to promising pharmaceutical products. *Life*. **12(2)**: 193–217.
- Alauhdin, M., Eden, W.T. & Alighiri, D. (2021). Aplikasi spektroskopi inframerah untuk analisis tanaman dan obat herbal. *Inovasi Sains Dan Kesehatan*. **4**: 83–118.
- Ashley, K., Andrews, R.N., Cavazos, L. & Demange, M. (2001). Ultrasonic extraction as a sample preparation technique for elemental analysis by atomic spectrometry. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*. **16(10)**: 1147–1153.
- Balan, V., Mihai, CT., Cojocaru, FD., Uritu, CM., Dodi, G., Botezat, D. & Gardikiotis, I. (2019). Vibrational spectroscopy fingerprinting in medicine: from molecular to clinical practice. *Materials*. **12(18)**: 2884.
- Baranska, M., Schulz, H., Siuda, R., Strehle, M.A., Rösch, P., Popp, J., Joubert, E. & Manley, M. (2005). Quality control of Harpagophytum procumbens and its related phytopharmaceutical products by means of NIR-FT-Raman spectroscopy. *Biopolymers*. **77(1)**: 1–8.
- Boffa, L., Ghè, C., Barge, A., Muccioli, G. & Cravotto, G. (2018). Alkaloid profiles and activity in different *Mitragyna speciosa* strains. *Natural Product Communications*. **13(9)**: 1111–1116.
- Fahmi, A. D. (2020). Analisis komposisi kimia daun kratom (*Mitragyna speciosa*) secara kromatografi gas-spektrometri massa di balai laboratorium bea dan cukai kelas II Surabaya. Laporan Tugas Akhir Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam. Universitas Islam Indonesia. Yogyakarta.
- Firmansyah, A., Sundalian, M., Nurmeilasari, N., & Taufiq, M. (2021). Kratom (*Mitragyna speciosa* Korth) for a New Medicinal: a Review of Pharmacological and Compound Analysis. *Biointerface Research in Applied Chemistry*. **11(2)**: 9704-9718.
- Flores-Bocanegra, L., Raja, H.A., Graf, T.N., Augustinović, M., Wallace, E.D., Hematian, S., Kellogg, J.J., Todd, D.A., Cech, N.B. & Oberlies, N.H. (2020). The chemistry of Kratom (*Mitragyna speciosa*): updated

- characterization data and methods to elucidate indole and oxindole alkaloids. *Journal of Natural Products*. **83(7)**: 2165–2177.
- Jeyasundari, J., Praba, P.S., Jacob, Y.B.A., Vasantha, V.S. & Shanmugaiah, V. (2017). Green synthesis and characterization of zero valent iron nanoparticles from the leaf extract of *Psidium guajava* plant and their antibacterial activity. *Chemical Science Review and Letters*. **6(22)**: 1244-1252.
- Jintawiwat, R., Punamornarakul, N., Hirunyasiri, R., Jarupoom, P., Pankasemsuk, T., Supasin, S. & Kawee-ai, A. (2023). Testing the efficacy of a prototype that combines ultrasound and pulsed electric field for extracting valuable compounds from *Mitragyna speciosa* Leaves. *AgriEngineering*. **5(4)**: 1879-1892.
- Lestari, R.F., Suhaimi & Wildaniah, W. (2018). Penetapan parameter standar simplisia dan ekstrak etanol daun Kratom (*Mitragyna speciosa* korth.) yang tumbuh di kabupaten Kapuas Hulu dan Kabupaten Melawi. *Jurnal Insan Farmasi Indonesia*. **1(1)**: 72–84.
- Li, S., Han, Q., Qiao, C., Song, J., Cheng, L.C. & Xu, H. (2008). Chemical markers for the quality control of herbal medicine: an overview. *Chinese Medicin*. **3(7)**: 1–16.
- Meireles, V., Rosado, T., Barroso, M., Soares, S., Gonçalves, J., Luís, Á., Caramelo, D., Simão, A., Fernández, N., Duarte, A. & Gallardo, E. (2019). *Mitragyna speciosa*: clinical, toxicological aspects and Analysis in biological and non-biological samples. *Medicines*. **6(1)**: 35–56.
- Naes, T., Isaksson, T., Fearn, T. & Davies, T. (2017). A user-friendly guide to Multivariate Calibration and Classification. 2nd ed. NIR Publication.
- Prozialeck, W.C., Edwards, J.R., Lamar, P.C., Plotkin, B.J., Sigar, I.M., Grundmann, O. & Veltri, C.A. (2020). Evaluation of the mitragynine content, levels of toxic metals and the presence of microbes in kratom products purchased in the western suburbs of Chicago. *International Journal of Environmental Research and Public Health*. **17(15)**: 5512–5525.
- Purwakusumah, E.D., Rafi, M., Safitri, U.D., Nurcholis, W. & Adzkiya, M.A.Z. (2014). Identifikasi dan autentikasi jahe merah menggunakan kombinasi spektroskopi FTIR dan kemometrik. *AgriTech*. **34(1)**: 82-87.
- Raini, M. (2017). Kratom (*Mitragyna speciosa* Korth.). Manfaat, efek samping dan legalitas. *Media Litbangkes*. **27(3)**: 175–184.
- Rohman, A., Ghazali, M.A.B., Windarsih, A., Irnawati, I., Riyanto, S., Yusof, F.M. & Mustafa, S. (2020). Comprehensive review on application of ftir spectroscopy coupled with chemometrics for authentication analysis of fats and oils in the food products. *Molecules*. **25(22)**: 5485–5512.
- Sani. (2021). *Karakterisasi Material*. In Hastuti, S.B. (Eds). 1st. Bumi Aksara. Jakarta.
- Sari, F., Yustinah, Y., Fithriyah, NH., Susanty, S. & Harum, N.A. (2022). *In Seminar Nasional Sains dan Teknologi 2022*. Jakarta. 2 November 2022. pp. 1-6.
- Shafirany, M.Z., Susilawati, Y. & Musfiroh, I. (2018). Aplikasi kemometrik dalam penentuan mutu tumbuhan obat. *Majalah Farmasi, Sains, Dan Kesehatan*. **4(2)**: 6-14.
- Siregar, Y.D.I., Heryanto, R., Lela, N. & Lestari, T. H. (2015). Karakterisasi karbon aktif asal tumbuhan dan tulang hewan menggunakan FTIR dan analisis kemometrika. *Jurnal Kimia Valensi*. **1(2)**: 103-116.
- Suryandari, P., Ardinarsih, P. & Widiyantoro, A. (2018). Senyawa sitotoksik dari fraksi diklorometana daun kratom (*Mitragyna speciosa* Korth.) terhadap sel kanker payudara T47D. *Jurnal Kimia Khatulistiwa*. **7(2)**: 1-7.
- Yulia, M., Ningtyas, K.R., Widodo, S. & Suhandy, D. (2023). Autentikasi cepat kopi spesialti arabika java preanger kultivar typica, sigarar utang dan yellow bourbon menggunakan spektroskopi UV dan Metode PLS-DA. *JTEP: Jurnal Keteknik Pertanian*. **11(1)**: 1–15.
- Zou H.B., Yang G.S. & Qin Z.R. 2005. Progress in quality control of herbal medicine with IR fingerprint spectra. *Analytical Letters*. **38**: 1457-1475.