

## Abstrak

### ANALISIS KEMOMETRIK SPEKTROFOTOMETRI DERIVATIF *FINGERPRINTING* UNTUK AUTENTIKASI BAWANG MERAH (*Allium ascalonicum L.*)

Adelia Puteri<sup>1</sup>, Hendri Wasito<sup>2</sup>, Triyadi Hendra Wijaya<sup>2</sup>

**Latar Belakang:** Bawang merah varietas bima brebes memiliki permintaan yang tinggi di pasaran sehingga memicu pencampuran dengan varietas lain. Autentikasi perlu dilakukan untuk mengetahui keaslian bawang merah dan dapat dilakukan dengan spektrofotometri derivatif *fingerprinting* yang dikombinasikan dengan kemometrik. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui spektra asli dan hasil derivatisasinya serta pengelompokkan untuk diskriminasi varietas-varietas bawang merah melalui analisis profil spektra derivatif *fingerprinting* dengan pendekatan kemometrik.

**Metodologi:** Penelitian ini menggunakan sampel minyak atsiri tiga varietas bawang merah dan campurannya yang diuji dengan spektrofotometri UV-Vis dan dilakukan langkah derivatisasi spektra. Data spektra dilihat pola spektrumnya dari masing-masing sampel varietas bawang merah dan campurannya serta dianalisis lebih lanjut dengan kemometrik menggunakan tipe PCA dan PLS-DA.

**Hasil Penelitian:** Spektra asli dan derivatnya menunjukkan kemiripan antar perlakuan sampel. Hasil analisis PCA dan PLS-DA menunjukkan pemisahan terbaik pada data derivat orde kedua dengan nilai total PC1 dan PC2 sebesar 62,2%; nilai total komponen 1 dan 2 sebesar 60,1%; *VIP score* terbesar pada panjang gelombang 225 nm; dan hasil PLS-DA tervalidasi tidak *overfit* dilihat dari hasil *cross validation* Q<sup>2</sup>/R<sup>2</sup> yang cukup baik sebesar 0,693 serta uji permutasi yang signifikan.

**Kesimpulan:** Spektrofotometri derivatif *fingerprinting* yang dikombinasikan dengan pendekatan kemometrik dapat mengelompokkan antar perlakuan sampel sehingga dapat diketahui keaslian suatu varietas bawang merah.

**Kata Kunci:** Bawang merah, Spektrofotometri UV-Vis, *fingerprinting*, Kemometrik, Derivatisasi spektra

<sup>1</sup>Mahasiswa Jurusan Farmasi, Fakultas Ilmu-ilmu Kesehatan, Universitas Jenderal Soedirman

<sup>2</sup>Jurusan Farmasi, Fakultas Ilmu-ilmu Kesehatan, Universitas Jenderal Soedirman

## Abstract

### CHEMOMETRIC ANALYSIS OF FINGERPRINTING DERIVATIVE SPECTROPHOTOMETRY FOR AUTHENTICATION OF SHALLOTS (*Allium ascalonicum* L.)

Adelia Puteri<sup>1</sup>, Hendri Wasito<sup>2</sup>, Triyadi Hendra Wijaya<sup>2</sup>

**Background:** The Bima Brebes variety of shallots is in high demand in the market, leading to the mixing with other varieties. Authentication is necessary to know the authenticity of shallots, which can be achieved using derivative spectrophotometric fingerprinting combined with chemometrics. This study aims to determine original spectra and its derivatization results, as well as the classification for the discrimination of shallot varieties through derivative spectrophotometric fingerprinting analysis using a chemometric approach.

**Methodology:** This research utilized essential oil samples from three varieties of shallots and their mixtures, tested with UV-Vis spectrophotometry, followed by spectral derivatization. The spectral data were analyzed to identify the spectral patterns of each sample, including the individual varieties of shallots and their mixtures, and further analyzed using chemometrics with PCA and PLS-DA.

**Results:** The original spectra and their derivatives showed similarities across the sample treatments. PCA and PLS-DA analysis indicated the best separation in the second-order derivative data, with a total PC1 and PC2 value of 62.2%; total component 1 and 2 value of 60.1%; the highest VIP score at a wavelength of 225 nm; and validated PLS-DA results that were not overfit, demonstrated by a satisfactory cross-validation Q<sup>2</sup>/R<sup>2</sup> value of 0.693 and significant permutation test.

**Conclusion:** Derivative spectrophotometry fingerprinting combined with a chemometric approach can classify different sample treatments, allowing the authenticity of a specific shallot variety to be determined.

**Keyword:** Shallots, UV-Vis Spectrophotometry, Fingerprinting, Chemometrics, Spectral Derivatization.

<sup>1</sup>Student of Department of Pharmacy, Faculty of Health Sciences, Jenderal Soedirman University

<sup>2</sup>Departement of Pharmacy, Faculty of Health Sciences, Jenderal Soedirman University