

## INTISARI

Asam benzoat dan asam salisilat dalam sediaan kombinasi tidak dapat dianalisis secara simultan dengan spektrofotometri karena memiliki spektrum yang *overlap*. Metode spektrofotometri dengan pendekatan kemometrika *partial least squares-1* (PLS-1) dikembangkan dan divalidasi untuk menganalisis senyawa asam benzoat dan asam salisilat secara simultan dalam sediaan larutan.

Model PLS-1 dibangun dengan set kalibrasi sebanyak 16 seri pada konsentrasi 1,96-7,84 µg/ml untuk asam benzoat dan 2,88-11,52 µg/ml untuk asam salisilat. Kemudian model divalidasi secara internal dengan *leave one out-cross validation* (LOO-CV) dan secara eksternal dengan set validasi yang dibuat sebanyak 10 seri pada rentang konsentrasi yang sama, namun komposisinya belum digunakan dalam set kalibrasi. Parameter statistik yang diuji meliputi *root mean squares error of calibration* (RMSEC), *root mean squares error of prediction* (RMSEP), dan koefisien determinasi ( $r^2$ ). Validasi metode analisis dilakukan dengan menguji nilai linearitas, akurasi, presisi, batas deteksi dan batas kuantitasi.

Hasil validasi menunjukkan bahwa metode yang dikembangkan memenuhi beberapa persyaratan parameter validasi, seperti linearitas dan presisi. Sedangkan untuk akurasi hanya asam salisilat yang memenuhi persyaratannya. Sehingga metode ini dapat diaplikasikan untuk analisis simultan asam benzoat dan asam salisilat dalam sediaan larutan dengan hasil *recovery* masing-masing sebesar 109,97-114,411% dan 92,20-102,32%.

**Kata Kunci:** Asam benzoat, asam salisilat, spektrofotometri, kemometrika, PLS-1

## ABSTRACT

Benzoic and salicylic acid in combination preparation can not be analyzed simultaneously by spectrophotometry because of the overlapping of their UV spectra. Chemometrics assisted spectrophotometry partial least square 1 (PLS-1) was developed and validated to analyze benzoic and salicylic acid simultaneously in the preparation of solution.

PLS-1 model was built by a calibration set of 16 series in the concentration range of 1.96-7.84  $\mu\text{g/ml}$  for benzoic acid and 2.88-11.52  $\mu\text{g/ml}$  for salicylic acid. Then the model was validated internally with a leave-one out-cross validation (LOO-CV) and externally with the 10 series validation set at the same concentration range. Statistical parameters that used in this study were the root mean squares error of calibration (RMSEC), root mean squares error of prediction (RMSEP), and the coefficient of determination ( $r^2$ ). The method was validated by testing the value of linearity, accuracy, precision, detection limits and quantitation limits.

The result of validation showed that the method developed was satisfied on the linearity and precision requirements. Meanwhile, only salicylic acid that was satisfied the accuracy requirement. Therefore, this method can be applied for analyzing simultaneously benzoic and salicylic acid in the solution preparation with a recovery yield of 109.97-114.411% and 92.20-102.32%, respectively.

**Keywords:** benzoic acid, salicylic acid, spectrophotometry, chemometric, PLS-1

