

INTISARI

Buah Manggis (*Garcinia mangostana* L.) atau disebut juga “*Queen of Fruit*” merupakan buah yang dapat digunakan untuk mencegah beberapa jenis penyakit. Saat ini, buah ini diteliti senyawa bioaktifnya, terutama senyawa xanton seperti α -mangostin (AM), γ -mangostin (GM), and gartanin (GT). Senyawa tersebut memiliki aktivitas farmakologis antara lain antioksidan, anti jamur, anti inflamasi, dan anti helmintic. Kandungan senyawa aktif dari buah manggis dipengaruhi oleh kondisi geografis. Oleh karena itu pengembangan metode analisis yang mampu mendapatkan profil metabolit perlu untuk dikembangkan. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui hubungan antara spektra *FTIR* dan kromatogram dari *HPLC* yang dikombinasikan dengan kemometrika untuk analisis kuantitatif ekstrak etanol kulit buah manggis. Kulit buah manggis diekstrak menggunakan teknik maserasi. Ekstrak kulit buah manggis dianalisis menggunakan instrumen spektrofotometer *FTIR* pada bilangan gelombang 4000-650 cm^{-1} dan *HPLC* dengan detektor *PDA* (pada panjang gelombang 281 nm). Data yang diperoleh kemudian dianalisis dengan kemometrika *partial least square (PLS)* dan *principal component analysis (PCR)*. Nilai absorbansi yang didapatkan dari spektra *FTIR* dan data dari kromatogram *HPLC* digunakan sebagai variabel dalam analisis kemometrika. Hasil menunjukkan bahwa pada daerah bilangan gelombang 3700-2700 cm^{-1} memberikan metode yang reliabel untuk analisis kuantitatif dari senyawa GM dengan koefisien determinasi (R^2) 0,9573 dalam kalibrasi dan 0,8134 dalam validasi dengan nilai *RMSEC* 0,0487% dan nilai *RMSEP* 0,120%. Spektra *FTIR* dengan turunan kedua pada daerah bilangan gelombang 3700-663 cm^{-1} dengan koefisien determinasi (R^2) >0,99 dalam model kalibrasi dan validasi dengan nilai *RMSEC* dan nilai *RMSEP* terendah dapat digunakan untuk analisis kuantitatif senyawa AM dan GT. Berdasarkan hasil analisis dapat disimpulkan bahwa spektra *FTIR* dan data *HPLC* dikombinasikan dengan kemometrika pada daerah bilangan gelombang yang spesifik memberikan hasil yang akurat dan presisi dibuktikan dengan nilai R^2 yang tinggi dan nilai *RMSEC* dan *RMSEP* yang rendah untuk analisis AM, GM, dan GT.

Kata kunci: *Garcinia mangostana* L., Spektra *FTIR*, Kromatogram *HPLC*, *partial least square*, *principal component regression*.

ABSTRACT

Mangosteen (*Garcinia mangostana* L.) known as “Queen of Fruit” is a typical fruit used to prevent some diseases. Currently, this fruit is considered as emerging fruit to investigate due to its bioactive compounds, especially xanthone derivatives such as α -mangostin (AM), γ -mangostin (GM), and gartanin (GT). These compounds had been reported to exert some pharmacological activities such as antioxidant, antifungal, anti-inflammatory, and anthelmintic. The active compounds of mangosteen (xanthone derivatives) are affected by geographical origin. The development of an analytical method capable of obtaining metabolite profiles should be studied. This study aimed to determine the correlation between FTIR Spectra and HPLC chromatogram combined with chemometric for quantitative analysis of ethanolic extracts of mangosteen pericarp. The ethanolic extracts of mangosteen pericarp have been prepared by the maceration technique. The obtained extracts were subjected to measurement using instruments of FTIR spectrophotometer at wavenumbers of 4000-650 cm^{-1} and HPLC using PDA (at a wavelength of 281 nm). The acquired data were subjected to chemometric analysis of partial least square (PLS) and principal component regression (PCR). The absorbances values from FTIR spectra, as well as data from HPLC chromatograms, were used as variables during the chemometrics analysis. The result showed that the wavenumber regions of 3700-2700 cm^{-1} offered a reliable method for quantitative analysis of GM with a coefficient of determination (R^2) 0.9573 in calibration and 0.8134 in validation models along with RMSEC value of 0.0487% and RMSEP value 0.120%. FTIR spectra using the second derivatives at wavenumber 3700-663 cm^{-1} with a coefficient of determination (R^2) > 0.99 in calibration and validation models along with the lowest RMSEC value and RMSEP value were used for quantitative analysis of GT and AM. It can be concluded that FTIR spectra and HPLC data combined with chemometrics at specific wavenumbers region are accurate and precise indicated by high R^2 and low values of RMSEC and RMSEP for analysis of AM, GM, and GT.

Keywords: *Garcinia mangostana* L., FTIR Spectra, HPLC Chromatogram, partial least square, principal component regression.