

ABSTRACT

Sidaguri (*Sida rhombifolia*) is widely distributed in tropical and subtropical regions and has been reported to possess many bioactive compounds that are beneficial for human health, including polyphenolics as having antioxidant activities. Therefore, it is necessary to analyze its antioxidant activities in Sidaguri extracts. However, the conventional method of extraction is time-consuming and needs more solvent, which leads to the massive production of the waste of noxious solvent. As a consequence, an ultrasound-assisted extraction (UAE) is proposed for the extraction of Sidaguri containing antioxidant compounds.

The objective of this study was (1) to optimize the extraction of Sidaguri having antioxidant activities (2) to evaluate antioxidant activities of extracts resulting from the optimized condition using DPPH radical scavenging assay (3) to classify Sidaguri based on FTIR spectra with chemometrics of principal component analysis, and (4) to correlate the antioxidant activities with FTIR spectra using chemometrics of partial least square regression.

The optimum UAE conditions obtained were: solvent to solid ratio of 26:1, the temperature of extraction of 45.45 °C, methanol concentration of 42%, power of sonication of 86%, and time of extraction of 5 min. Kretek and Ngemplak had the highest RSA value, accounting for $83.69 \pm 0.30\%$, $82.95 \pm 0.49\%$, respectively. From the PCA result, the score plot managed to classify Sidaguri from different regions using 14 variables of FTIR spectra based on PC1 and PC2 score plots. PLS regression using the second derivative FTIR spectra at $3662\text{-}659\text{ cm}^{-1}$ could predict radical scavenging activities (RSA) of Sidaguri with R^2 values of 0.9636 and 0.9024 for calibration and validation model, with RMSEC and RMSEP values of 1.45% and 2.65%, respectively. It can be concluded that FTIR spectra followed by chemometrics were reliable for the classification of Sidaguri from different regions and for the prediction of antioxidant activities of Sidaguri.

Keywords: Sidaguri, principal component analysis, ultrasound-assisted extraction, antioxidant activities, partial least square

INTISARI

Sidaguri (*Sida rhombifolia*) tersebar luas di daerah tropis dan subtropis dan dilaporkan memiliki banyak senyawa bioaktif yang bermanfaat bagi kesehatan manusia, termasuk polifenol sebagai aktivitas antioksidan. Oleh karena itu, perlu dilakukan analisis aktivitas antioksidan pada ekstrak sidaguri. Namun, metode ekstraksi konvensional memakan waktu dan membutuhkan lebih banyak pelarut, yang mengarah pada produksi limbah pelarut berbahaya secara masif. Sebagai konsekuensinya, ekstraksi berbantu ultrasonik (UAE) diusulkan untuk ekstraksi Sidaguri yang mengandung senyawa antioksidan.

Tujuan dari penelitian ini adalah (1) mengoptimalkan ekstraksi Sidaguri yang memiliki aktivitas antioksidan, (2) mengevaluasi aktivitas antioksidan dari ekstrak Sidaguri yang didapat dari optimasi UAE menggunakan *radikal scavenging activity* (RSA) DPPH, (3) mengklasifikasikan Sidaguri berdasarkan spektra FTIR dengan kemometri dengan *principal component analysis*, dan (4) untuk mengkorelasikan aktivitas antioksidan dengan spektra FTIR menggunakan kemometri *partial least square*.

Kondisi UAE optimum yang diperoleh adalah: rasio pelarut terhadap padatan 26:1, suhu ekstraksi 45,45 °C, konsentrasi metanol 42%, daya sonikasi 86%, dan waktu ekstraksi 5 menit. Kretek dan Ngemplak memiliki nilai RSA tertinggi, masing-masing sebesar $83.69 \pm 0.30\%$, $82.95 \pm 0.49\%$. Dari hasil PCA, plot skor berhasil mengklasifikasikan Sidaguri dari berbagai wilayah menggunakan 14 variabel spektra FTIR berdasarkan PC1 dan PC2. Regresi PLS menggunakan spektra FTIR turunan kedua pada daerah $3662-659\text{ cm}^{-1}$ dapat memprediksi RSA Sidaguri dengan nilai R^2 sebesar 0,9636 dan 0,9024 untuk model kalibrasi dan validasi, dengan nilai RMSEC dan RMSEP sebesar 1,45% dan 2,65%. Dapat disimpulkan bahwa spektra FTIR yang diikuti oleh kemometrik dapat diandalkan untuk klasifikasi Sidaguri dari berbagai daerah dan untuk prediksi aktivitas antioksidan Sidaguri.

Kata kunci: Sidaguri, analisis komponen utama, ekstraksi berbantu ultrasonik, aktivitas antioksidan, partial least square