

**METABOLITE PROFILING BAGIAN AKAR, BATANG, DAUN, DAN BIJI  
*Helianthus annuus* L. MENGGUNAKAN INSTRUMEN UPLC-MS**

**SKRIPSI**

**Oleh:**

**FITROTUN NASIKHATUL MASLAKHAH  
NIM. 14670015**



**JURUSAN FARMASI  
FAKULTAS KEDOKTERAN DAN ILMU KESEHATAN  
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI  
MAULANA MALIK IBRAHIM MALANG  
2018**

***METABOLITE PROFILING* BAGIAN AKAR, BATANG, DAUN,  
DAN BIJI *Helianthus annuus* L. MENGGUNAKAN  
INSTRUMEN UPLC-MS**

**SKRIPSI**

**Diajukan Kepada:  
Fakultas Kedokteran dan Ilmu-Ilmu Kesehatan  
Universitas Islam Negeri (UIN) Maulana Malik Ibrahim Malang  
Untuk Memenuhi Salah Satu Persyaratan Dalam  
Memperoleh Gelar Sarjana Farmasi (S.Farm)**

**JURUSAN FARMASI  
FAKULTAS KEDOKTERAN DAN ILMU-ILMU KESEHATAN  
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI  
MAULANA MALIK IBRAHIM MALANG  
2018**

**METABOLITE PROFILING BAGIAN AKAR, BATANG, DAUN, DAN BIJI  
*Helianthus annuus* L. MENGGUNAKAN INSTRUMEN UPLC-MS**

**SKRIPSI**

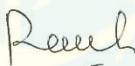
**Oleh:**

**FITROTUN NASIKHATUL MASLAKHAH  
14670015**

**Telah Diperiksa dan Disetujui untuk Diuji:**

**Tanggal: 06 Juni 2018**

**Pembimbing I**



**Dr. Roihatul Muti'ah, M. Kes. Apt  
NIP. 19800203 200912 2 003**

**Pembimbing II**



**drg. Risma Aprinda, M.Si  
NIP. 19821005 200912 2 001**

**Mengetahui,**

**Ketua Jurusan Farmasi**



**Dr. Roihatul Muti'ah, M. Kes. Apt  
NIP. 19800203 200912 2 003**

**METABOLITE PROFILING BAGIAN AKAR, BATANG, DAUN, DAN BIJI  
*Helianthus annuus* L. MENGGUNAKAN INSTRUMEN UPLC-MS**

**SKRIPSI**

**Oleh:**

**FITROTUN NASIKHATUL MASLAKHAH  
14670015**

**Telah Dipertahankan di Depan Dewan Penguji Skripsi  
Dan Dinyatakan Diterima Sebagai Salah Satu Persyaratan Untuk  
Memperoleh Gelar Sarjana Farmasi (S. Farm)**

**Tanggal: 06 Juni 2018**

**Ketua Penguji : drg. Risma Aprinda, M.Si  
NIP. 19821005 200912 2 001**

(.....)

**Anggota Penguji 1. drg. Arief Suryadinata, Sp.Ort  
NIP. 19850720 200912 1 003**

(.....)

**2. Ach Nashichuddin, MA  
NIP. 19730705 200003 1 002**

(.....)

**3. Dr. Roihatul Muti'ah, M.Kes., Apt  
NIP. 19800203 200912 2 003**

(.....)

**Mengesahkan,  
Ketua Jurusan Farmasi**



**Dr. Roihatul Muti'ah, M. Kes. Apt  
NIP. 19800203 200912 2 003**



## PERNYATAAN KEASLIAN TULISAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Fitrotun Nasikhatul Maslakhah  
NIM : 14670015  
Jurusan : Farmasi  
Fakultas : Kedokteran dan Ilmu-Ilmu Kesehatan  
Judul Penelitian : “*Metabolite Profiling* Bagian Akar, Batang, Daun,  
dan Biji *Helianthus annuus* L. Menggunakan  
Instrumen UPLC-MS”

menyatakan dengan sebenarnya bahwa skripsi yang saya tulis ini benar-benar merupakan hasil karya saya sendiri, bukan merupakan pengambilalihan data, tulisan atau pikiran orang lain yang saya akui sebagai hasil tulisan atau pikiran saya sendiri, kecuali dengan mencantumkan sumber cuplikan pada daftar pustaka. Apabila dikemudian hari terbukti dan dapat dibuktikan skripsi ini jiplakan, maka saya akan menerima sanksi atas perbuatan tersebut

Malang, 06 Juni 2018

Yang Membuat Pernyataan



Fitrotun Nasikhatul Maslakhah  
NIM. 14670015

## MOTTO

“Jadilah seperti karang di lautan, yang kuat dihantam ombak. Dan kerjakanlah hal yang bermanfaat untuk diri sendiri dan orang lain, karena hidup hanyalah sekali.

Ingat hanya pada Allah apapun dan di manapun kita berada, kepada Dia-lah tempat meminta dan memohon”



## HALAMAN PERSEMBAHAN

Dengan mengucapkan syukur Alhamdulillah, kupersembahkan karya kecilku ini untuk orang-orang yang kusayangi:

Kedua orangtua tercinta, Bapak Ngantiono dan Ibu Suaibah yang tidak pernah berhenti berdoa demi kesuksesan putra-putrinya. M. Dafik Irwanto, Siti Kholifah, Roikhatul Jannah, dan Much. Ainul Mustofa yang selalu memberikan dukungan dan tidak pernah berhenti menyemangati.

Sahabat-sahabatku Fauzta, Teh Ely, Nastiti, Firdiana, serta teman-teman seperjuangan Metabolite Profiling, Anticancer Squad dan Platinum Generation 2014 berjuang dan berkorban bersama selama kurang lebih empat tahun yang turut memberikan dukungan dan motivasinya selama pengerjaan naskah skripsi.

## KATA PENGANTAR

*Assalamu'alaikum Warahmatullahi Wabarakaatuh*

Puji syukur kehadiran Allah SWT yang telah melimpahkan rahmat dan hidayah-Nya, sehingga skripsi yang berjudul **“Metabolite Profiling Bagian Akar, Batang, Daun, dan Biji *Helianthus annuus* L. Menggunakan Instrumen UPLC-MS”** dapat diselesaikan dengan baik. Sholawat serta salam senantiasa tercurahkan kepada junjungan kita, Nabi Muhammad SAW yang telah membimbing kita menuju jalan yang diridhai Allah SWT. Skripsi ini merupakan salah satu syarat menyelesaikan program S1 di Jurusan Farmasi Fakultas Kedokteran dan Ilmu-Ilmu Kesehatan, Universitas Islam Negeri (UIN) Maulana Malik Ibrahim Malang.

Penulis mengucapkan terimakasih dengan segenap kesungguhan dan kerendahan hati kepada:

1. Bapak Prof. Dr. Abdul Haris, M.Ag., selaku Rektor Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.
2. Bapak Prof. Dr. dr. Bambang Pardjianto, Sp.B., Sp.BP-RE(K), selaku Dekan Fakultas Kedokteran dan Ilmu-Ilmu Kesehatan.
3. Ibu Dr. Roihatul Muti'ah, M.Kes., Apt., selaku Ketua Jurusan Farmasi, Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang serta dosen pembimbing utama yang telah meluangkan waktu untuk membimbing dan memberi motivasi kepada penulis sehingga skripsi ini dapat terselesaikan dengan baik.

4. Ibu drg. Risma Aprinda, M.Si., selaku pembimbing II yang bersedia membimbing dan memberikan solusi terhadap permasalahan yang muncul selama penelitian.
5. Bapak drg. Arief Suryadinata, Sp.Ort., selaku penguji utama yang bersedia meluangkan waktu untuk memberikan arahan atas kesalahan-kesalahan penulis selama menyusun skripsi.
6. Bapak Ach.Nasichuddin, M.Ag., selaku Penguji Agama yang telah bersedia memberikan arahan di bidang Agama pada skripsi ini.
7. Para Dosen Pengajar di Jurusan Farmasi yang telah membagi ilmunya kepada penulis selama berada di Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.
8. Para Staf Administrasi dan Laboran yang telah banyak membantu pengurusan surat dan kebutuhan penelitian.
9. Kedua orangtua tercinta, Bapak Ngantiono dan Ibu Suaibah yang tidak pernah berhenti berdoa demi kesuksesan putra-putrinya. Kakak-kakakku M. Dafik Irwanto, Siti Kholifah, dan Roikhatul Jannah yang selalu memberikan dukungan dan tidak pernah berhenti menyemangati.
10. Keluarga Besar Abu Bakar yang senantiasa menyemangati dan mendoakan selama penelitian.
11. Much. Ainul Mustofa yang tidak pernah berhenti mendoakan dan memberikan dukungan untuk segera menyelesaikan naskah skripsi ini.
12. Saudaraku Fauzta Norma Ayu Anggraini, Alfiyah Laili Inayatin, Nastiti Nur Patria Westri dan Firdiana Retno Herdiani yang bersedia menjadi rumah

kedua dan selalu mengingatkan atas segala salah yang penulis perbuat selama penelitian.

13. Teman-teman seperjuangan *Metabolite Profiling, Anticancer Squad* dan Platinum Generation 2014 yang berjuang dan berkorban bersama selama kurang lebih empat tahun yang turut memberikan dukungan dan motivasinya selama pengerjaan naskah skripsi.
14. Semua rekan dan semua pihak yang tidak dapat penulis sebutkan satu persatu atas segala bantuannya kepada penulis.

Penulis menyadari adanya kekurangan dan keterbatasan dalam skripsi ini. Oleh karena itu, dengan segala kerendahan hati penulis mengharapkan kritik dan saran yang membangun dari semua pihak demi penyempurnaan skripsi ini. Semoga skripsi ini dapat bermanfaat bagi kita semua.

*Wassalamu'alaikum Warahmatullahi Wabarakaatuh*

Malang, 06 Juni 2018

Penulis



## DAFTAR ISI

<b>KATA PENGANTAR .....</b>	<b>i</b>
<b>DAFTAR ISI .....</b>	<b>iv</b>
<b>DAFTAR GAMBAR .....</b>	<b>vi</b>
<b>DAFTAR TABEL .....</b>	<b>vii</b>
<b>DAFTAR SINGKATAN .....</b>	<b>viii</b>
<b>ABSTRAK .....</b>	<b>ix</b>
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	5
1.3 Tujuan .....	6
1.4 Manfaat Penelitian .....	6
1.4.1 Manfaat Teoritis .....	6
1.4.2 Manfaat Terapan .....	6
1.5 Batasan Masalah .....	7
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA</b>	
2.1 Pemanfaatan Tanaman Sebagai Obat Dalam Perspektif al-Quran .....	8
2.2 Tanaman Bunga Matahari ( <i>Helianthus annuus</i> L.) .....	10
2.2.1 Morfologi <i>H. annuus</i> .....	11
2.2.2 Kandungan Senyawa <i>H. annuus</i> .....	12
2.2.3 Manfaat <i>H. annuus</i> .....	13
2.3 Metabolisme .....	14
2.3.1 Metabolit Primer .....	14
2.3.2 Metabolit Sekunder .....	15
2.4 Ekstraksi Metode UAE .....	17
2.5 <i>Metabolite Profiling</i> Menggunakan Instrumen UPLC-MS .....	19
2.6 UPLC-QToF-MS/MS .....	22
2.7 Teknik Analisis <i>Principal Component Analysis</i> (PCA) .....	25
<b>BAB III KERANGKA KONSEPTUAL</b>	
3.1 Bagan Kerangka Konseptual .....	29
3.2 Uraian Kerangka Konseptual .....	30

## **BAB IV METODE PENELITIAN**

4.1 Jenis dan Rancangan Penelitian .....	32
4.2 Waktu dan Tempat Penelitian .....	32
4.3 Variabel Penelitian dan Definisi Operasional .....	32
4.3.1 Variabel Penelitian .....	32
4.3.2 Definisi Operasional .....	33
4.4 Alat dan Bahan Penelitian .....	35
4.4.1 Alat .....	35
4.4.2 Bahan .....	35
4.5 Prosedur Penelitian .....	35
4.5.1 Pembuatan Simplisia .....	35
4.5.2 Pengujian Kadar Air Siimplisia .....	36
4.5.3 Pembuatan Esktrak .....	36
4.5.4 <i>Metabolite Profiling</i> Menggunakan UPLC-MS .....	37
4.6 Analisis Data Multivariat .....	38

## **BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN**

5.1 Determinasi Tanaman <i>H. annuus</i> .....	39
5.2 Preparasi Sampel .....	40
5.3 Analisis Kadar Air .....	42
5.4 Ekstraksi Menggunakan Metode UAE .....	43
5.5 Analisis Profil Metabolit Menggunakan UPLC-MS .....	46
5.6 Analisis Multivariat PCA .....	60
5.7 Pemanfaatan Tanaman Bunga Matahari ( <i>Helianthus annuus</i> L.) Sebagai Obat dalam Perspektif al-Quran .....	65

## **BAB VI PENUTUP**

6.1 Simpulan .....	68
6.2 Saran .....	69

<b>DAFTAR PUSTAKA</b> .....	70
-----------------------------	----

<b>LAMPIRAN</b> .....	76
-----------------------	----

## DAFTAR GAMBAR

<b>Gambar 2.1</b> <i>Helianthus annuus</i> L. ....	10
<b>Gambar 2.2</b> Senyawa Turunan Heliangolides .....	13
<b>Gambar 2.3</b> Struktur Tokoferol .....	13
<b>Gambar 2.4</b> Alur Utama Biosintesis .....	15
<b>Gambar 2.5</b> Ekstraksi Metode UAE .....	19
<b>Gambar 2.6</b> Instrumen UPLC-MS .....	25
<b>Gambar 5.1</b> Determinasi Tanaman <i>H.annuus</i> .....	40
<b>Gambar 5.2</b> Proses Pengeringan <i>H.annuus</i> .....	40
<b>Gambar 5.3</b> Simplisia <i>H.annuus</i> .....	41
<b>Gambar 5.4</b> Proses Ekstraksi UAE .....	44
<b>Gambar 5.5</b> Esktrak <i>H.annus</i> .....	45
<b>Gambar 5.6</b> Kromatogram Analisis Profil Metabolit .....	48
<b>Gambar 5.7</b> Spektra dan Struktur Senyawa Bagian Akar .....	58
<b>Gambar 5.8</b> Spektra dan Struktur Senyawa Bagian Batang .....	59
<b>Gambar 5.9</b> Spektra dan Struktur Senyawa Bagian Daun .....	59
<b>Gambar 5.10</b> Spektra dan Struktur Senyawa Bagian Biji .....	59
<b>Gambar 5.11</b> <i>Score Plot</i> Pengelompokkan Senyawa Kimia .....	62
<b>Gambar 5.12</b> <i>Score Plot</i> Pengelompokkan Senyawa Kimia .....	62
<b>Gambar 5.8</b> <i>Loading Plot</i> Pengelompokkan Senyawa Kimia .....	63
<b>Gambar 5.9</b> Struktur Senyawa <i>12-Phenyldodecanoic acid</i> .....	64

## DAFTAR TABEL

<b>Tabel 2.1</b> Perbandingan instrumen HPLC dan UPLC .....	23
<b>Tabel 4.1</b> Klasifikasi instrumen UPLC-MS .....	38
<b>Tabel 5.1</b> Hasil uji kadar air .....	36
<b>Tabel 5.2</b> Randemen ekstrak <i>H.annuus</i> .....	45
<b>Tabel 5.3</b> Data Senyawa Hasil Interpretasi .....	51
<b>Tabel 5.4</b> Aktivitas Farmakologi <i>H.annuus</i> .....	65

## DAFTAR SINGKATAN

WHO	: <i>World Health Organization</i>
UPLC-MS	: <i>Ultra Performance Liquid Chromatography-Mass Spectrometry</i>
°C	: Derajat Celcius
UAE	: <i>Ultrasonic Assisted Extraction</i>
GC-MS	: <i>Gas Chromatography-Mass Spectrometry</i>
LC-MS	: <i>Liquid Chromatography-Mass Spectrometry</i>
CE-MS	: <i>Capillary Electrophoresis-Mass Spectrometry</i>
psi	: <i>Pounds per Square Inch</i>
ESI	: <i>Electrospray Ionization</i>
QToF	: <i>Quadrupole Time of Flight</i>
MS	: <i>Mass Spectrometry</i>
PCA	: <i>Principal Component Analysis</i>
PC	: <i>Principal Component</i>
b/v	: Bobot (gram) per volum (mililiter)
mg	: miligram
ml	: mililiter
μl	: mikro liter
UPT	: Unit Pelaksana Teknis
v:v	: Volume (mililiter) per volume (mililiter)

## ABSTRAK

Maslakhah, F.N. 2018. *Metabolite Profiling* Bagian Akar, Batang, Daun, dan Biji *Helianthus annuus* L. Menggunakan Instrumen UPLC-MS. Skripsi. Jurusan Farmasi Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan. Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.

Pembimbing : (I) Dr. Roihatul Muti'ah, M.Kes., Apt  
(II) drg. Risma Aprinda, M.Si

Tanaman bunga matahari (*Helianthus annuus* L.) merupakan salah satu tanaman yang mudah didapatkan dan berdasarkan penelitian sebelumnya yang menjelaskan adanya efek farmakologi yang dihasilkan dari senyawa kimia *H. annuus* sehingga dapat meningkatkan peluang untuk digunakan sebagai bahan obat herbal. Senyawa kimia dalam suatu tumbuhan dihasilkan dari proses metabolit yang berbeda pada bagian organ, sehingga *metabolite profiling* yang terkandung dalam bagian organ juga berbeda. Tujuan penelitian ini adalah untuk memperoleh data profil metabolit, senyawa penciri dan senyawa mayor bagian akar, batang, daun, dan biji *H.annuus*.

Proses pembuatan ekstrak dilakukan dengan menggunakan bantuan pelarut etanol 96% dengan metode UAE sehingga diperoleh ekstrak kental bagian akar, batang, daun, dan biji. Keempat ekstrak yang diperoleh selanjutnya dianalisis menggunakan UPLC-MS fase gerak air:asam formiat (99,9:0,1) dan asetonitril:asam formiat (99,9:0,1) dengan sistem elusi gradien dan fase diam kolom C18 (oktadesil silika). Hasil analisis tersebut selanjutnya diinterpretasi menggunakan aplikasi *Masslynx* dan di analisis data multivarian menggunakan PCA menggunakan perangkat lunak *Minitab* versi 4.1.

Terdapat perbedaan profil metabolit bagian akar, batang, daun, dan biji *H.annuus*. Terdapat 6 senyawa penciri yang ditemukan pada bagian akar, batang, daun, dan biji *H.annuus* serta terdapat senyawa mayor pada bagian akar, batang, daun, dan biji dengan kadar masing-masing 5,9490%; 5,5558%; 8,6758%; 9,2157%.

**Kata Kunci:** *metabolite profiling*, *Helianthus annuus* L., UPLC-MS, multivariant PCA



## ABSTRACT

Maslakhah, F.N. 2018. Metabolite Profiling in *Helianthus annuus* L. Roots, Stems, Leaves, and Seeds Extract Using UPLC-MS. Thesis. Department of Pharmacy, Faculty of Medicine and Health Sciences, Islamic University Maulana Malik Ibrahim Malang.

Advisor : (I) Dr. Roihatul Muti'ah, M.Kes., Apt  
(II) drg. Risma Aprinda, M.Si

The sunflower (*Helianthus annuus* L.) is one of the plant which is easy to obtain and it was studied for its secondary metabolite compounds that have pharmacological effects that can be used as herbal medicine ingredients. There is remaining. Chemical compounds in plants resulting from different metabolic processes in the organs, the metabolite profile that is contained in different parts of organs. The purpose of this study was to obtain the metabolite profile data, identifier and major compound of roots, stems, leaves, and seeds of *H.annuus*.

*H. annuus* extract has made by using 96% ethanol solvent with UAE method to obtain the thick extact of the roots, stems, leaves, and seeds. The extract were then analyzed using UPLC-MS used phase aqueous:formic acid (99,9:0,1) and acetonitrile:formic acid (99,9:0,1) with a gradient elution system and stationery phase C18 column (octadecyl silica). The result of the analysis are further interpreted using *Masslynx* application and in multivariant data analysis using *PCA Minitab* software version 4.1.

The chemical compound of roots, stems, leaves, and seeds of *H.annuus*. Metabolite profiles of roots, stems, and leaves of *H. annus* was different and the concentration of major compounds are 5,9490%; 5,5558%; 8,6758%; 9,215% respectively.

**Keyword:** *metabolite profiling, Helianthus annuus* L., UPLC-MS, multivariant PCA

### ملخص البحث

مصلحة، ف.ن. 2018. تنميط الأيض في جزء الجذر والساق والورق وبذر *Helianthus annuus* L. باستخدام الأداة UPLC-MS. البحث العلمي. قسم الصيدلة كلية الطبية والعلوم الصحية جامعة مولانا مالك إبراهيم الإسلامية الحكومية مالانج.

المشرفة: (1) الدكتورة رائحة المطيعة

(2) ريسما أبريندا الماجستير

إن نبات زهرة الشمس (*Helianthus annuus* L.) من أنواع النبات التي يسهل الحصول عليها و يشرح البحث القديم أن فيه التأثير الدوائي الناتج عن المستحضر الكيميائي *H. annuus* ويعني هذا وجود الفرص الوفيرة في استخدامها كمكونات الأدوية العشبية. ويستند استخدام الأدوية العشبية على محتوى المستحضر الأيضي الثانوي المحتوى على تأثير دوائي، وحيث أن معرفة المستحضرات الواردة في *H. annuus* تحتاج إلى تنميط الأيض. يهدف هذا البحث إلى الحصول على البيانات لملف الأيض والمستحضر المعرفي والمستحضر الرئيسي للجذور والسيقان والأوراق وبذور *H. annuus*.

تم إجراء عملية استخراج المستخرج باستخدام مذيب إيثانول 96% بطريقة UAE بحيث تحصل المستخرجات المكثفة في الجذر والساق والورق والبذر. ثم تُحلَّل المستخرجات الأربعة باستخدام UPLC-MS مرحلة حركة المياه : حمض الفورميك (0.1 : 99.9) وأستونتريل : حمض الفورميك (0.1 : 99.9) مع نظام شطف متدرج ومرحلة ساكنة العمود C18 (oktadesil silika). ثم تفسَّر تلك نتائج التحليل باستخدام برنامج *Masslynx* وتحلَّل البيانات متعددة المتغيرات باستخدام PCA برنامج *Minitab* الإصدار 4.1.

في الجذر والساق والورق وبذر *H. annuus* اختلاف ملف الأيض. توجد 6 مستحضرات المعرفية في الجذر والساق والورق وبذر *H. annuus*. وتوجد المستحضرات الرئيسية في الجذر والساق والورق والبذر بدرجة كل منها 5.9490%؛ 5.5558%؛ 8.6758%؛ 9.2157%.

الكلمات الرئيسية : تنميط الأيض، UPLC-MS، *Helianthus annuus* L. ، تعدد المتغيرات PCA



## **BAB I**

### **PENDAHULUAN**

#### **1.1 Latar Belakang**

Indonesia merupakan salah satu negara yang kaya akan flora dan fauna yang banyak dimanfaatkan oleh masyarakat baik di bidang sandang, pangan maupun papan. Selain itu, masyarakat Indonesia banyak memanfaatkan kekayaan flora dan fauna sebagai pengobatan berbagai macam penyakit berdasarkan pengalaman empiris dan resep yang diperoleh secara turun-temurun. Bahan obat yang diperoleh dari pemanfaatan flora dan fauna biasa disebut dengan obat tradisional. Menurut Permenkes RI No. 246/Menkes/Per/V/1990, yang dimaksud dengan obat tradisional adalah bahan tumbuhan, bahan hewan, bahan mineral, sediaan galenik atau campuran dari bahan-bahan tersebut, yang secara tradisional telah digunakan untuk pengobatan berdasarkan pengalaman.

Berdasarkan data hasil kesehatan dasar 2010, hampir setengah (49,53%) penduduk Indonesia berusia 15 tahun ke atas mengkonsumsi jamu. Sekitar 5% (4,36%) mengkonsumsi jamu setiap hari, sedangkan sisanya (45,17%) mengkonsumsi jamu sesekali (Depkes, 2011).

Obat tradisional mudah diterima oleh masyarakat karena efek samping yang relatif lebih sedikit dan tidak membutuhkan biaya yang terlalu mahal apabila dibandingkan dengan obat-obatan sintetis. Bahkan, WHO merekomendasikan untuk menggunakan obat tradisional (obat herbal) untuk pemeliharaan kesehatan

masyarakat, pencegahan dan pengobatan penyakit baik penyakit kronis maupun penyakit degeneratif dan kanker (Bustanussalam, 2016).

Faktor pendorong peningkatan penggunaan obat herbal adalah usia harapan hidup yang lebih panjang pada penderita kanker dengan penggunaan obat herbal, adanya kegagalan penggunaan obat modern pada penyakit tertentu seperti kanker, dan semakin luasnya informasi pengobatan herbal di dunia (Bustanussalam, 2016).

Allah berfirman dalam QS. Asy-Syu'ara ayat 7 sebagai berikut:

أَوَلَمْ يَرَوْا إِلَى الْأَرْضِ كَمْ أَنْبَتْنَا فِيهَا مِنْ كُلِّ زَوْجٍ كَرِيمٍ (7).

*“Dan apakah mereka tidak memperhatikan bumi, berapakah banyaknya Kami tumbuhkan di bumi itu berbagai macam (tumbuh-tumbuhan) yang baik?”*

Menurut tafsir dari Quraish Shihab ayat tersebut menjelaskan bahwasanya adakah mereka akan terus mempertahankan kekufuran dan pendustaan serta tidak merenungi dan mengamati sebagian ciptaan Allah di bumi ini? Sebenarnya, jika mereka bersedia merenungi dan mengamati hal itu, niscaya mereka akan mendapatkan petunjuk. Kamilah yang mengeluarkan dari bumi ini beraneka ragam tumbuh-tumbuhan yang mendatangkan manfaat. Dan itu semua hanya dapat dilakukan oleh Tuhan yang Mahaesa dan Mahakuasa (Shihab, 2010).

Berdasarkan penjelasan tafsir tersebut maka dapat diketahui bahwasanya Allah SWT menciptakan beraneka ragam tumbuhan dengan berbagai manfaat didalamnya sehingga tanaman yang diciptakan dapat membantu kehidupan manusia baik sebagai bahan makanan, tempat tinggal maupun sebagai bahan alternatif pengobatan.



Salah satu flora yang sering dimanfaatkan oleh masyarakat sebagai alternatif pengobatan adalah tanaman bunga matahari (*Helianthus annuus* L.). *Helianthus annuus* L. dibudidayakan oleh masyarakat sebagai tanaman hias. *Helianthus annuus* L. merupakan salah satu tanaman yang mudah didapatkan dan hasilnya melimpah sehingga dapat meningkatkan peluang untuk digunakan sebagai bahan obat herbal.

*Helianthus annuus* L. dapat digunakan sebagai bahan obat herbal karena mengandung senyawa yang disebut dengan metabolit sekunder. Metabolit sekunder adalah senyawa yang disintesis oleh makhluk tumbuhan, mikrobia atau hewan melewati proses biosintesis yang digunakan untuk menunjang kehidupan namun tidak vital (Saifudin A. , 2014). Ekstrak metanol bunga *H. annuus* positif mengandung senyawa terpenoid, seskuiterpen, triterpen dan steroid (Mutiah *et al*, 2013). Senyawa yang terkandung pada daun tanaman bunga matahari adalah alkaloid, flavonoid, dan fenol (Kamal J. , 2011). Batang *H. annuus* mengandung senyawa hemiselulosa yang dapat digunakan sebagai antitumor (Barlow, *et al*. 2012) serta mengandung senyawa alkaloid, fenol, dan flavonoid (Kamal, 2011). Biji *H. annuus* mengandung karbohidrat, flavonoid, tanin, alkaloid, saponin, fitosterol, steroid, dan minyak atsiri (Subashini R. R., 2012). Sampai saat ini belum ada penelitian yang meneliti profil metabolit ekstrak etanol *H. annuus* dikarenakan penelitian sebelumnya lebih banyak melakukan penelitian menggunakan ekstrak metanol untuk melihat kandungan metabolit sekunder tanaman bunga matahari.



Penggunaan tanaman sebagai bahan baku obat mengalami kendala yang disebabkan bervariasinya senyawa pada tanaman. Penyebab munculnya variasi ini disebabkan oleh 2 faktor yaitu faktor internal seperti genetik, ontogenik, morfogenik dan faktor eksternal (lingkungan) yang dibedakan menjadi 2 yaitu faktor biotik seperti *stress* akibat bakteri, virus, fungi, parasit dan faktor abiotik seperti perbedaan geografi, ketinggian tempat tumbuh, perubahan iklim, jenis tanah, kondisi tanah, ketersediaan air, kandungan mineral dan *stress* akibat temperatur, radiasi dan senyawa kimia (Verma & Shukla, 2015).

Perubahan metabolit pada tanaman merupakan konsekuensi dari perubahan aktivitas enzim akibat perubahan ekspresi gen, baik pada tahap transkripsi maupun translasi. Perubahan ini merupakan bagian dari sistem pertahanan biologi terhadap lingkungan sekitar yang menyebabkan bervariasinya metabolit yang dihasilkan oleh suatu tanaman (Cseke, *et al*, 2006). Selain itu, perbedaan organ pada tanaman juga menyebabkan adanya perbedaan biosintesis metabolit sehingga senyawa kimia pada setiap organ juga berbeda.

Kandungan senyawa dari *H. annuus* dapat diketahui melalui *metabolite profiling*. *Metabolite profiling* adalah metode identifikasi dan penentuan kuantitatif dari metabolit yang umumnya berhubungan dengan jalur metabolit spesifik (Ellis, *et al*, 2007). Evaluasi metabolit berdasarkan penelitian yang telah dilakukan menyimpulkan adanya penemuan biomarker kemotaksonomikal dari variasi genus dan spesies tanaman yang berdekatan (Frag, *et al*, 2013). Profil metabolit dari suatu tanaman dapat diketahui dengan bantuan instrumen UPLC-MS (*Ultra Performance Liquid Chromatography-Mass Spectrophotometry*). UPLC-

MS adalah suatu metode dari kromatografi cair dengan kelebihan kecepatan resolusi yang lebih baik dan analisis yang lebih cepat dari kromatografi cair biasa (Churchwell, *et al*, 2005).

Berdasarkan uraian diatas, peneliti ingin mengetahui profil metabolit dari bagian akar, batang, daun dan biji *H. annuus* menggunakan instrumen UPLC-MS sehingga dapat diketahui profil metabolit senyawa kimia yang terkandung di dalam setiap bagian tanaman tersebut, sehingga dapat digunakan sebagai acuan dasar untuk penelitian selanjutnya terkait dengan tanaman matahari.

## 1.2 Rumusan Masalah

Rumusan masalah berdasarkan latar belakang tersebut adalah sebagai berikut:

1. Bagaimana profil metabolit dari bagian akar, batang, daun, dan biji *H. annus* menggunakan insrumen UPLC-MS?
2. Senyawa apa sajakah yang menjadi senyawa penciri bagian akar, batang, daun, dan biji *H. annus*?
3. Senyawa apa sajakah yang menjadi senyawa mayor pada bagian akar, batang, daun, dan biji *H. annuus* dan berapa kadar masing-masing senyawa mayor tersebut?

### 1.3 Tujuan

Tujuan dilakukannya penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Memperoleh data profil metabolit bagian akar, batang, daun, dan biji *H. annuus*.
2. Mengetahui senyawa penciri pada bagian akar, batang, daun, dan biji *H. annuus*.
3. Mengetahui kadar senyawa mayor pada bagian akar, batang, daun, dan biji *H. annuus* serta kadar senyawa mayor tersebut.

### 1.4 Manfaat Penelitian

#### 1.4.1 Manfaat Teoritis

Diharapkan penelitian ini mampu memberikan informasi ilmiah tentang profil metabolit sekunder yang terkandung pada *H. annuus*, dan senyawa penciri pada tanaman tersebut, serta dapat memberikan informasi mengenai senyawa mayor pada bagian akar, batang, daun, dan biji *H. annuus*.

#### 1.4.2 Manfaat Terapan

1. Penelitian ini dapat memberikan informasi kepada masyarakat mengenai kandungan senyawa metabolit sekunder dari *H. annuus* sehingga dapat digunakan sebagai pengobatan alternatif.
2. Metode *metabolite profiling* dapat mencegah terjadinya pemalsuan produk ekstrak etanol tanaman bunga matahari dalam pengembangannya menuju obat tradisional yang terstandar.

### 1.5 Batasan Masalah

Batasan masalah dari penelitian ini adalah sebagai berikut.

1. Metode ekstraksi yang digunakan adalah metode *Ultrasonic Assisted Extraction* (UAE) dengan menggunakan pelarut etanol 96% (1:20).
2. *H. annuus* yang digunakan diperoleh dari kebun perumahan “Plaosan Permai” Blok D, no.2, Jl.Teluk Grajakan, Pandanwangi, Kota Malang dan Desa Pujon, Kabupaten Malang.
3. Analisis profil metabolit *H.annus* dilakukan menggunakan instrumen *Ultra Performance Liquid Chromatography - Mass Spectrometry* (UPLC-MS).

## BAB II

### TINJAUAN PUSTAKA

#### 2.1 Pemanfaatan Tanaman Sebagai Obat Dalam Perspektif al-Quran

Sesungguhnya Allah telah memberikan nikmat yang berlimpah kepada manusia, nikmat yang tidak terbatas jumlahnya dan juga tidak terhitung. Allah telah mengingatkan manusia akan begitu banyak nikmat yang telah diberi-Nya dalam banyak ulasan ayat al-Quran dengan tujuan agar manusia mampu menganalisis sumbernya dan mampu lebih giat dalam beribadah (Jazuli, 2006).

Allah berfirman dalam surah Al-An'am ayat 141 sebagaimana berikut.

﴿وَهُوَ الَّذِي أَنْشَأَ جَنَّاتٍ مَعْرُوشَاتٍ وَغَيْرَ مَعْرُوشَاتٍ وَالنَّخْلَ وَالزَّرْعَ مُخْتَلِفًا أُكْلُهُ  
وَالزَّيْتُونَ وَالرُّمَانَ مُتَشَابِهًا وَغَيْرَ مُتَشَابِهٍ ۚ كُلُوا مِنْ ثَمَرِهِ إِذَا أَثْمَرَ وَآتُوا حَقَّهُ يَوْمَ حَصَادِهِ ۚ وَلَا  
تُسْرِفُوا ۚ إِنَّهُ لَا يُحِبُّ الْمُسْرِفِينَ﴾

Artinya: “Dan Dialah yang menjadikan kebun-kebon yang berjunjung dan yang tidak berjunjung, pohon kurma, tanam-tanaman yang bermacam-macam buahnya, zaitun dan delima yang serupa (bentuk dan warnanya) dan tidak sama (rasanya). Makanlah dari buahnya (yang bermacam-macam itu) bila dia berbuah, dan tunaikanlah haknya di hari memetik hasilnya (dengan disedekahkan pada fakir miskin); dan janganlah kamu berlebih-lebihan. Sesungguhnya Allah tidak menyukai orang yang berlebih-lebihan.”

Pada ayat tersebut terdapat kata *كُلُوا مِنْ ثَمَرِهِ إِذَا أَثْمَرَ* yang bermakna bahwasanya kita dianjurkan untuk mengonsumsi buah-buahan yang bermacam-macam yang telah diciptakan oleh Allah SWT dimana pada buah-buahan tersebut mempunyai banyak khasiat. Buah disini diartikan sebagai hasil dari perkembangan tanaman. Al-Quran menjelaskan sifat-sifat tumbuhan dengan sangat rinci mulai dari keadaan biji-bijian dalam tanah, lalu tanah disirami dengan



air hujan dari langit, tanah membelah mengeluarkan tunas-tunas halus, kemudian menjadi hijau diterpa sinar matahari dan mengeluarkan bunga, berbuah, menguning, lalu kering terberai-berai diterpa angin (al-Fatah, 2011).

Tumbuh-tumbuhan yang telah diciptakan Allah SWT selanjutnya akan dimanfaatkan oleh manusia dalam bidang pangan, sandang, papan, bahkan menjadi pilihan alternatif pengobatan penyakit. Tumbuhan yang mempunyai khasiat atau kandungan tertentu dan dapat dimanfaatkan untuk mengobati atau menyembuhkan penyakit tertentu disebut dengan tumbuhan obat. Dalam ilmu kedokteran, tumbuhan ini disebut juga dengan nama fitofarmaka. Tumbuhan obat disebut juga obat tradisional atau ramuan tradisional dan biasanya merupakan gabungan dari berbagai tumbuhan obat (*multi compound*) (A. Gunawan, 2000).

Sumber pengobatan di Indonesia mencakup tiga sektor yang saling berhubungan, yaitu pengobatan rumah tangga atau pengobatan sendiri, pengobatan medis profesional, dan pengobatan tradisional. Upaya pencarian pengobatan umumnya dimulai dari pengobatan sendiri, kemudian apabila tidak sembuh dilanjutkan kepada pengobatan medis atau pengobatan tradisional. Demikian juga dari pengobatan medis dapat dilanjutkan ke pengobatan tradisional atau sebaliknya. Pengobatan sendiri dalam pengertian umum adalah upaya yang dilakukan orang awam untuk menanggulangi sendiri keluhan sakitnya menggunakan obat, obat tradisional, atau cara lain tanpa petunjuk tenaga kesehatan. Tujuan pengobatan sendiri adalah untuk peningkatan kesehatan, pengobatan sakit ringan, dan pengobatan rutin penyakit kronis setelah perawatan dokter. Alasan pengobatan sendiri adalah kepraktisan waktu, kepercayaan pada



obat tradisional, masalah privasi, biaya, jarak, dan kepuasan terhadap pelayanan kesehatan (Supardi, 2009).

Dalam Undang Undang Republik Indonesia Nomor 36 Tahun 2009 tentang kesehatan pada Pasal 1 antara lain dinyatakan “Obat tradisional adalah bahan atau ramuan bahan yang berupa bahan tumbuhan, bahan hewan, bahan mineral, sediaan sarian (galenik), atau campuran dari bahan tersebut yang secara turun temurun telah digunakan untuk pengobatan, dan dapat ditetapkan sesuai dengan norma yang berlaku di masyarakat”. Dalam keputusan Menteri Kesehatan Nomor 131/Menkes/SK/II/2004 tentang Sistem Kesehatan Nasional (SKN) disebutkan bahwa pengembangan dan peningkatan obat tradisional ditujukan agar diperoleh obat tradisional yang bermutu tinggi, aman, memiliki khasiat nyata yang teruji secara ilmiah dan dimanfaatkan secara luas baik untuk pengobatan sendiri oleh masyarakat atau digunakan dalam pelayanan kesehatan formal (Menkes, 2004).

Salah satu tanaman obat yang dimanfaatkan oleh masyarakat Indonesia untuk mengobati penyakit adalah tanaman bunga matahari (*Helianthus annuus* L.).

## 2.2 Tanaman Bunga Matahari (*Helianthus annuus* L.)



Gambar 2.1 *Helianthus annuus* L. (Anonim, 2018)

*H. annus* merupakan salah satu tanaman yang dapat dimanfaatkan sebagai obat. *H. annus* termasuk dalam famili Asteraceae yang berasal dari Meksiko dan Peru. Sejak tahun 1970 *H.annus* sudah diteliti di Indonesia (Atjung, 1981). *H. annus* merupakan jenis tanaman tahunan yang tegak, kokoh, dan kasar, dengan tinggi 1-3 meter. *H. annus* dapat tumbuh pada suhu sekitar 6-28°C dan dapat tumbuh pada suhu minimum mencapai -2°C. Namun, bibit *H. annus* kurang sensitif terhadap suhu beku dibandingkan dengan tanaman dewasa (Halvorson, 2003).

Taksonomi dari *H.annus* adalah sebagai berikut (Dwivedi & Sharma, 2014).

Kingdom	: Plantae
Divisi	: Angiospermae
Subdivisi	: Eudicots
Ordo	: Asterales
Famili	: Asteraceae
Genus	: Helianthus
Spesies	: <i>Helianthus annus</i> L.

### 2.2.1 Morfologi *Helianthus annus* L.

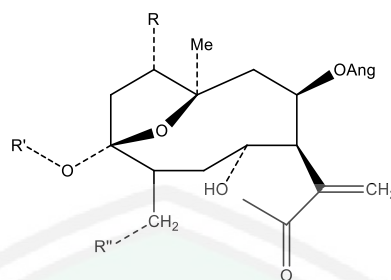
*H. annus* merupakan jenis tanaman tahunan yang berbulu dan tegak dengan tinggi mencapai 1-3 meter. Awalnya, tumbuh bibit akar yang kecil dan tipis yang selanjutnya akan tumbuh dan berkembang menjadi lebih besar dengan sirkulasi lateral. Batang *herbaceous*, biasanya tidak bercabang dengan tinggi mencapai 30-200 cm dan bulat. Percabangan sederhana dengan setiap ujung

percabangan terdapat *capitulum* (Dwivedi & Sharma, 2014). Tipe daun *alternatus* dengan permukaan atas dan bawah yang kasar, tepi daun bergerigi dengan panjang 5-25 cm dan lebar 2-3 cm. Jenis daun tunggal berwarna hijau dan tumbuh berselang-seling berhadapan dengan batang (Simpson & Ogarzaly, 1986).

Setiap batang memiliki bunga yang terletak pada ujung batang. Kelopak bunga berwarna kuning terang dengan bagian tengah berwarna hitam kecoklatan, berbentuk mangkok, diameter 10-50 cm dan jumlah mahkota bunga sekitar 40-80. Biji berwarna kelabu sampai hitam dengan garis putih dan bentuk biji setengah bulat dengan ujung meruncing (Simpson & Ogarzaly, 1986).

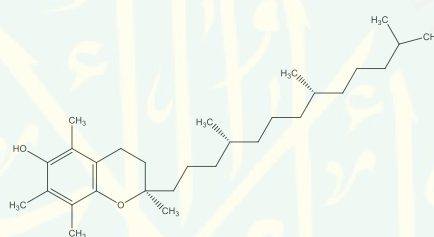
### **2.2.2 Kandungan Senyawa *Helianthus annus* L.**

Ekstrak metanol dari biji *H. annus* menunjukkan adanya kandungan karbohidrat, (amilum) pati, glikosid, protein, flavonoid, tannin, alkaloid, saponin, fitosterol, steroids dan minyak murni (Subashini & Rakshita, 2012). Bagian daun *H. annus* mengandung senyawa seskuiterpen lakton, monoterpen, diterpen, alkaloid dan fenol (Ceccarini, 2004). Batang *H. annus* mengandung senyawa hemiselulosa yang dapat digunakan sebagai antitumor (Barlow, *et al*, 2012) serta mengandung senyawa alkaloid, fenol dan flavonoid (Kamal, 2011). Bagian bunga dari *H. annus* mengandung senyawa saponin dan triterpen (Spring, *et al*, 1982). Pada ekstrak etanol germacranolide baru dengan bagian  $\alpha$ -methylene- $\gamma$ -lactone, senyawa heliangolide niveusin B dan turunan turunan etoks dapat diisolasi dan strukturnya dapat dielusidasi menggunakan metode spektroskopi. Selain itu, juga dapat diisolasi senyawa seskuiterpen dari organ daun dan batang (Spring, *et al*, 1982).



Gambar 2.2 Senyawa turunan Heliangolides (Spring, *et al*, 1982).

Minyak biji *H. annus* mengandung senyawa tinggi antioksidan yaitu vitamin E (tokoferol) yang dapat dimanfaatkan sebagai obat pencegahan kanker (Velasco & Dobarganes, 2002).



Gambar 2.3 Struktur Tokoferol (Vitamin E) (Velasco & Dobarganes, 2002).

### 2.2.3 Manfaat *H. annus*

*H. annus* banyak dimanfaatkan sebagai sumber makanan dan pengobatan berbagai macam penyakit. Minyak bijinya dapat digunakan sebagai penyembuh luka. Hal ini dikarenakan pada bagian biji *H. annus* terdapat kandungan senyawa aktif  $\beta$ -sitosterol, flavonoid, dan asam linoleate yang dapat mengurangi luka.  $\beta$ -sitosterol merupakan steroid alami yang bersifat estrogenik mampu menjaga kelembapan area luka sehingga memungkinkan pertumbuhan sel (Marques, *et al*, 2004).  $\beta$ -sitosterol pada biji *H. annus* berfungsi sebagai penghambat pada beberapa jenis sel tumor spesifik secara *in vitro* serta dapat menurunkan ukuran dan tingkat metastasis tumor yang dilakukan secara *in vivo* (Awad, *et al*, 2007).

Batang *H. annuus* mengandung senyawa hemiselulosa yang berperan sebagai antitumor kolon (Barlow, *et al*, 2012). Akar dan daun dari *H. annuus* dapat dimanfaatkan sebagai pencegah malaria (Ceccarini, 2004)

## 2.3 Metabolisme

Suatu organisme tumbuhan walaupun memiliki perbedaan bentuk, organisasi, dan adaptasi lingkungan menggunakan sejumlah zat melalui suatu proses biokimia. Tumbuhan sering dapat mensintesis banyak variasi senyawa organik. Biosintesis dari komponen tersebut melalui rangkaian proses yang disebut metabolisme (Supriyatna, 2015).

Metabolisme adalah suatu proses yang terjadi dalam sel tubuh melalui reaksi-reaksi kimia yang dilakukan oleh makhluk hidup dengan tujuan untuk menghasilkan energi, hasil dari proses ini disebut dengan metabolit. Metabolit dibagi menjadi 2 kelompok berdasarkan fungsinya terhadap makhluk hidup, yaitu metabolit primer dan metabolit sekunder.

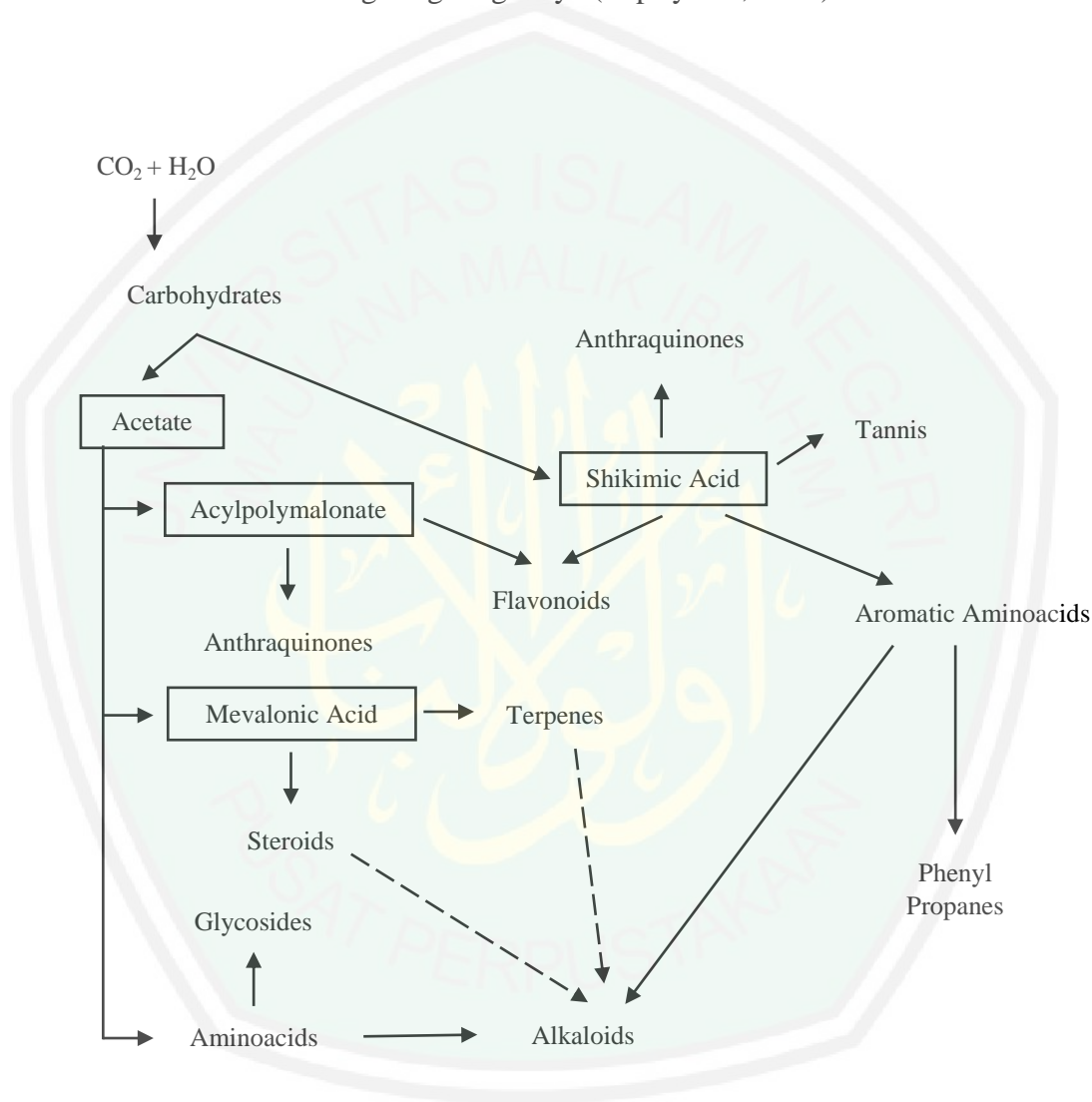
### 2.3.1 Metabolit Primer

Metabolit primer merupakan hasil dari proses metabolisme yang sangat penting bagi tubuh makhluk hidup. Senyawa ini digunakan untuk pertumbuhan normal, perkembangan dan reproduksi. Mempunyai berat >1500 Dalton, contohnya glukosa, asam organik sederhana, asam lemak, protein, hormon dan enzim-enzim (Saifudin, 2014).

Metabolit primer dihasilkan melalui tiga macam alur biosintesis (alur asetil koenzim A, asam mefalonat dan asam sikimat) dan sifat genetika masing-



masing dengan bantuan enzim dapat menghasilkan ratusan hingga ribuan macam senyawa kimia alami yang disebut dengan metabolit sekunder yang berguna bagi tumbuhan sendiri dan bagi lingkungannya (Supriyatna, 2015).



Gambar 2.4 Alur utama biosintesis (Supriyatna, 2015).

### 2.3.2 Metabolit Sekunder

Metabolit sekunder adalah senyawa yang disintesis oleh makhluk tumbuhan, mikrobia, atau hewan melewati proses biosintesis yang digunakan untuk menunjang kehidupan namun tidak vital. Di bidang farmasi secara khusus,



metabolit sekunder digunakan dan dipelajari sebagai kandidat obat atau senyawa penuntun untuk melakukan optimasi agar diperoleh senyawa yang lebih poten dengan toksisitas minimal (Saifudin, 2014).

Ciri dari metabolit sekunder adalah senyawa ini tidak terlibat dalam metabolisme atau kehidupan dasar seperti pertumbuhan, perkembangan dan reproduksi; Tidak esensial, ketiadaan jangka pendek tidak berakibat kematian sementara ketiadaan jangka panjang mengakibatkan kelemahan dalam pertahanan diri, survival, estetika dan menarik serangga; seringkali berperan di dalam pertahanan terhadap musuh (Saifudin, 2014).

Sifat-sifat kimiawi metabolit sekunder tersebut umumnya memiliki berat molekul yang kecil antara 50-1500 Dalton. Umumnya tidak larut air karena bersifat semi polar, dan struktur kimianya sangat beragam (Saifudin, 2014).

Pada umumnya, senyawa metabolit sekunder yang ditemukan pada tanaman adalah alkaloid, flavonoid, triterpenoid, steroid, saponin dan tanin. Senyawa-senyawa tersebut berperan sebagai bioaktif yang digunakan dalam dunia pengobatan (Harborne, 1987). Informasi kandungan senyawa metabolit sekunder diperlukan karena senyawa aktif yang terdapat dalam tanaman dapat bersifat toksik. Pengujian toksisitas merupakan pengujian awal untuk mengetahui apakah suatu bahan bersifat toksik atau tidak (Meyer, *et al*, 1982).

Tidak semua metabolit sekunder dapat berguna sebagai obat herbal apabila fungsi atau takarannya tidak memadai. Beberapa contoh golongan senyawa kimia aktif yang berperan sebagai obat pada sistem organ manusia adalah sebagai berikut: minyak atsiri, flavonoid dan hiperforin pada sistem saraf

dapat digunakan untuk mengobati kegelisahan dan susah tidur; minyak atsiri dan flavonoid pada saluran nafas atas dapat digunakan untuk mengobati pilek, flu, dan rinitis; mucilago, tannin, dan flavonoid pada rongga mulut dapat digunakan untuk luka pada mulut; tannin dan flavonoid pada saluran darah perifer juga dapat digunakan untuk hipotensi, hipertensi, dan keluhan vena (Supriyatna, 2015).

#### **2.4 Ekstraksi Metode *Ultrasonic Assisted Extraction* (UAE)**

Teknik yang paling sering digunakan untuk isolasi zat aktif antioksidan pada tanaman adalah ekstraksi pelarut yaitu metode pemisahan komponen dari suatu campuran menggunakan suatu pelarut yang bertujuan untuk menarik zat aktif dalam sampel. Pelarut yang digunakan didasarkan pada kemampuan melarutkan zat aktif dalam jumlah yang maksimum sehingga terbentuklah ekstrak. Prinsip metode ini didasarkan pada distribusi zat terlarut dengan perbandingan tertentu antara dua pelarut yang tidak saling bercampur (Susanti & Bachmid, 2016)

Salah satu metode ekstraksi yang dapat digunakan adalah metode gelombang ultrasonik. Ultrasonik merupakan metode ekstraksi non termal yang efektif dan efisien. Efek mekanik dari gelombang ultrasonik yang ditimbulkan akan meningkatkan penetrasi dari cairan menuju dinding membran sel, mendukung pelepasan komponen sel dan meningkatkan transfer massa (Keil, 2007). Keuntungan dari metode ekstraksi ini adalah proses ekstraksi tidak membutuhkan waktu yang lama dan hasil yang diperoleh lebih banyak

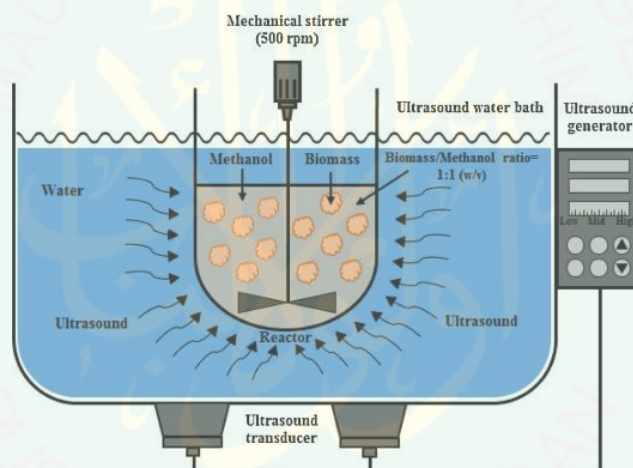
mengandung senyawa metabolit sekunder daripada menggunakan metode yang lainya (Haniah, *et al*, 2012).

Metode ekstraksi *Ultra Assisted Extraction* (UAE) adalah metode ekstraksi menggunakan bantuan gelombang ultrasonik yaitu gelombang akustik dengan frekuensi lebih besar dari 16-20 kHz (Suslick, 1988). Dengan penggunaan ultrasonik proses ekstraksi senyawa organik pada tanaman dan biji-bijian dengan menggunakan pelarut organik dapat berlangsung lebih cepat. Dinding sel dari bahan dipecah dengan getaran ultrasonik sehingga kandungan yang ada di dalamnya dapat keluar dengan mudah (Mason, 1990).

Cara kerja metode ultrasonik dalam mengesktraksi adalah sebagai berikut: gelombang ultrasonik terbentuk dari pembangkitkan ultrason secara lokal dan kavitasi mikro pada sekeliling bahan yang diekstraksi sehingga terjadi pemanasan pada bahan tersebut, sehingga melepaskan senyawa ekstrak. Terdapat efek ganda yang dihasilkan, yaitu pengacauan dinding sel sehingga membebaskan kandungan senyawa yang ada di dalamnya dan pemanasan lokal pada cairan dan meningkatkan difusi ekstrak. Energi kinetik dilewatkan ke seluruh bagian cairan, diikuti dengan munculnya gelembung kavitasi pada dinding atau permukaan sehingga meningkatkan transfer massa antara permukaan padat-cair. Efek mekanik yang ditimbulkan adalah meningkatkan penetrasi dari cairan menuju dinding membran sel, mendukung pelepasan komponen sel, dan meningkatkan transfer massa (Keil, 2007).

Untuk mendapatkan ekstraksi yang menyeluruh dan mendapatkan senyawa-senyawa yang mempunyai aktivitas farmakologi maka pemilihan pelarut yang

digunakan untuk mengeskraksi merupakan faktor yang penting. Pelarut ideal yang sering digunakan adalah alkohol atau campurannya dengan air karena merupakan pelarut pengestraksi yang terbaik untuk hampir semua senyawa dengan berat molekul rendah seperti saponin dan flavonoid (Wijesekera, 1991). Jenis pelarut pengestraksi juga mempengaruhi jumlah senyawa aktif yang terkandung dalam ekstrak, sesuai konsep *like dissolve like*, dimana senyawa yang bersifat polar akan larut dalam pelarut polar dan senyawa yang bersifat non polar akan larut dalam senyawa non polar (Arifianti, *et al*, 2014).



Gambar 2.5 Ekstraksi metode UAE (Ha & Kim, 2016)

## 2.5 Metabolite Profiling

Dalam menganalisa metabolit, terdapat beberapa pendekatan yang dapat digunakan, yaitu *metabolite fingerprinting*, *metabolite profiling* dan *metabolite target analysis* (Wolfender, *et al*, 2015).

*Metabolite fingerprinting* merupakan teknik analisa untuk mengklasifikasikan metabolit secara cepat. Teknik ini tidak bertujuan untuk

mengidentifikasi ataupun kuantifikasi dari suatu metabolit, tetapi mengklasifikasi metabolit sesuai dengan perbedaan pola *fingerprinting* metabolit yang berubah dalam sistem biologi dengan menggunakan analisis *multivariate* (Wolfender, *et al*, 2015).

*Metabolite target analysis* merupakan teknik analisa yang fokus kepada identifikasi dan kuantifikasi suatu metabolit terpilih ataupun modifikasi suatu metabolit yang berhubungan dengan jalur metabolisme spesifik (Wolfender, *et al*, 2015).

*Metabolite profiling* adalah suatu metode identifikasi dan penentuan kuantitatif dari sejumlah besar metabolit, yang umumnya berhubungan dengan jalur metabolit spesifik (Ellis, *et al*, 2007). Penggunaan profil metabolit dapat memberikan tampilan komparatif fungsi gen. Profil metabolit memiliki potensi tidak hanya dapat memberikan wawasan lebih dalam proses regulasi yang kompleks, tetapi juga dapat menentukan fenotipe secara langsung (Fiehn, *et al*, 2000).

*Metabolite profiling* adalah pengukuran data sistem biologi pelengkap metabolit dengan berat molekul rendah dan intermedietnya yang mencerminkan respon dinamis terhadap modifikasi genetik dan rangsangan fisiologis, patofisiologis dan/atau perkembangan stimulan. Pengukuran dan interpretasi profil metabolit endogen dari sampel biologis (biasanya urin, serum atau ekstrak jaringan biologis) telah memberi banyak kesempatan untuk menyelidiki perubahan yang diinduksi oleh stimulus eksternal (misalnya pengobatan obat)



atau meningkatkan pengetahuan kita tentang variasi biologis yang melekat dalam subpopulasi (Clarke & Haselden, 2008).

Profil metabolit dapat membantu menjelaskan mekanistik perubahan toksikologi dan patologis serta memberikan sarana untuk mengidentifikasi dan menentukan penanda biokimia potensial toksisitas baik secara spesifik entitas kimia atau sebagai pola dalam profil (Robertson, *et al*, 2000). *Metabolite profiling* merupakan suatu teknik analisis semua analit yang terdeteksi dari sampel dan mengidentifikasi metabolit yang diekspresikan secara berbeda serta jelas klasifikasinya (Dettner, *et al*, 2007).

*Metabolite profiling* merupakan analisis yang dapat menggunakan beberapa teknik analisis seperti *Gas Chromatography-Mass Spectrometry* (GC-MS), *Liquid Chromatography-Mass Spectrometry* (LC-MS), atau *Capillary Electrophoresis-Mass Spectrometry* (CE-MS). Beberapa teknik tersebut dapat memberikan profil kromatografi yang detail dan pengukuran jumlah absolut serta relatif dari senyawa yang dideteksi (O'Gorman, 2010).

*Ultra Performance Liquid Chromatography-Mass Spectrometry* (UPLC-MS) merupakan salah satu teknik analisis perkembangan dari teknik LC-MS yang dapat digunakan untuk menganalisis profil metabolit dari suatu sampel. Teknik analisis ini memberikan beberapa kelebihan yaitu hasil kromatogram dengan resolusi tinggi, kuat, dapat diandalkan, pengukuran massa dan informasi structural yang akurat, serta memungkinkan deteksi metabolit yang luas dari sampel tanaman (Zhao & Lin, 2014).



## 2.6 UPLC-QTOF-MS/MS

*Ultra Performance Liquid Chromatography-Quadrupole Time of Flight-Mass Spectrometry* (UPLC-QToF-MS/MS) atau dikenal dengan nama UPLC-MS merupakan instrumen analisis yang terdiri dari dua instrumen, yaitu UPLC yang ditandemkan dengan QToF-MS/MS. Instrumen ini digunakan pada penelitian ini karena memiliki beberapa keunggulan, yaitu selektif dan sensitif dengan performa resolusi yang tinggi dan cepat sehingga waktu analisis lebih cepat (Chawla & Ranjan, 2016).

UPLC merupakan salah satu teknik perkembangan kromatografi cair yang digunakan untuk segresi komponen yang berbeda pada suatu campuran dengan tingkat molekuler mencapai dua mikron partikel analit. Metode analisis menggunakan instrumen UPLC dapat mereduksi konsumsi fase gerak sampai dengan 80% dalam waktu yang relatif lebih singkat sekitar 1,5 menit daripada menggunakan instrumen HPLC (Chawla & Ranjan, 2016).

Prinsip kerja UPLC didasarkan pada teori van Deemter yang menjelaskan korelasi antara laju alir dan tinggi plat. Persamaan van Deemter menunjukkan bahwa partikel yang lebih kecil menghasilkan jarak alir yang lebih besar dibandingkan dengan partikel yang besar dengan persamaan sebagai berikut (Chawla & Ranjan, 2016).

$$H = A + \frac{B}{v} + Cv$$

H = Ekuivalensi tinggi dari *theoretical plate* (HETP)

A = Konstanta faktor difusi pusaran yang merupakan aliran yang tidak diinginkan di dalam kolom

B = Nilai terdensi dari difusi partikel, dimana pada laju alir yang tinggi efeknya kecil sehingga dibagi dengan nilai  $v$

C = Suhu resistensi kinetik untuk keseimbangan selama proses pemisahan

$v$  = Laju alir dari gas pembawa

Tabel 2.1 Perbandingan instrumen HPLC dengan UPLC

Karakteristik	HPLC	UPLC
Ukuran partikel	3-5 $\mu\text{m}$	Kurang dari 2 $\mu\text{m}$
<i>Maximum backpressure</i>	300-400 bars	1000 bars
Kolom analitik	C18	UPLC BEH C18
Ukuran kolom	150 x 3,2 mm	50 x 2,1 mm
Volume injeksi	5 $\mu\text{L}$	2 $\mu\text{L}$
Suhu kolom	30°C	65°C
<i>Total run time</i>	10 menit	1,5 menit
<i>USP resolution</i>	3,2	3,4
<i>Plate count</i>	2000	7500
Laju Alir	3,0 ml/menit	0,6 ml/menit

Instrumen UPLC terdiri dari tiga bagian, yaitu tempat injeksi sampel, kolom UPLC, dan detektor. Sistem penghantaran pelarut memiliki performa pompa tekanan tinggi yang reproduibel dengan laju pelarut yang konstan. Sistem UPLC secara umum dioperasikan dengan tekanan 8000-15000 psi. Sistem elusi yang digunakan dapat secara isokratik, linier dan non linier elusi gradien. UPLC memiliki dua modul penghantaran pelarut yang beroperasi secara paralel dengan tekanan tinggi (Chawla & Ranjan, 2016). Pada penelitian ini digunakan eluen berupa  $\text{H}_2\text{O}$  + 0,1% asam formiat, dan asetronitril + 0,1% asam format.

Detektor yang digunakan pada instrumen ini adalah detektor *Mass Spectrometry* (MS). Spektroskopi massa adalah suatu metode analisis instrumental yang dipakai untuk identifikasi dan penentuan stuktur dari komponen sampel dengan cara menunjukkan massa relatif dari molekul komponen dan massa relatif hasil pecahannya (Mulja & Suharman, 1995). Spektroskopi massa bekerja dengan prinsip pengionan molekul yang disusul dengan penyortiran dan pengidentifikasian ion berdasarkan perbandingan massa terhadap muatan ( $m/z$ ). Terdapat dua kunci utama pada proses tersebut, yaitu sumber ion dan penganalisa massa. Sumber ion spektroskopi massa yang digunakan adalah *Electrospray Ionization* (ESI) yang menghasilkan ion analit pada larutan sebelum mencapai spektroskopi massa. Sampel yang mengandung analit telah dilarutkan ke dalam pelarut akan disemprot dengan laju kecepatan tertentu ke dalam sebuah ruang pada tekanan atmosfer dan dengan adanya medan elektrostatis yang kuat dan pemanas gas. Sampel yang disemprot akan berubah menjadi butiran tetesan (*droplets*) yang memiliki energi permukaan tinggi. Muatan energi yang tinggi pada permukaan tetesan ditentukan oleh muatan yang diatur pada *electric field*, sehingga terdapat ESI (+)  $[M+H]^+$  dan ESI (-)  $[M-H]^+$  (Doig, 2000).

Analisisator MS yang digunakan pada penelitian ini adalah *quadrupole-time of flight* (Q-ToF). Q-ToF merupakan jenis analisisator perpaduan antara analisisator *quadrupole* (saringan kuadropol) dan analisisator *time of flight*. Analisisator berfungsi sebagai penganalisa massa, sehingga perbandingan massa ion dengan muatan yang sama akan sampai ke detektor secara teratur (Mulja &

Suharman, 1995). Pada umumnya, analisator digunakan untuk memisahkan ion-ion yang terbentuk dan pengionan oleh sumber ion (Doig, 2000).



Gambar 2.6 Instrumen UPLC-MS (Waters, 2018)

## 2.7 Teknik Analisis Principal Component Analysis (PCA).

*Principal Component Analysis* (PCA) adalah suatu teknik statistik yang secara linier mengubah bentuk sekumpulan variabel asli menjadi kumpulan variabel yang lebih kecil yang tidak berkorelasi yang dapat mewakili informasi dari kumpulan variabel asli (Dunteman & George, 1989).

Pendapat lain menyebutkan PCA dan *Factor Analysis* (FA) adalah teknik statistik yang diaplikasikan untuk satu kumpulan variabel ketika peneliti tertarik untuk menemukan variabel mana dalam kumpulan tersebut yang berhubungan dengan lainnya. Variabel berkorelasi satu dengan yang lainnya tetapi independen dengan subset lain yang merupakan kombinasi variabel-variabel di

dalam faktor. Faktor adalah yang mencerminkan proses yang mendasari yang mempunyai korelasi antar variabel (Tabachnick, 2001).

Analisis komponen utama (*principal component analysis*, disingkat PCA) pada dasarnya adalah teknik reduksi data multivariat, ketika antar variabel terjadi korelasi. Objek (sampel) dengan komponen utama yang hampir sama mempunyai sifat fisika-kimia yang hampir sama, sehingga PCA dapat digunakan untuk pengelompokkan. Oleh karena itu, PCA sering juga disebut sebagai variabel tersembunyi (*latent variables*) karena kemampuannya sebagai teknik untuk melakukan pengelompokkan (Rohman, 2014). Salah satu masalah dengan data multivariat adalah adanya kesulitan untuk melihat pola dan hubungannya data-data ini. Tujuan beberapa metode analisis multivariat adalah untuk mengurangi data. Yang sering muncul adalah adanya korelasi antar variabel, yang mana beberapa informasi bersifat redundan. PCA merupakan suatu teknik untuk mengurangi banyaknya data, ketika terdapat suatu korelasi antar data (Rohman, 2014).

Tujuan PCA adalah untuk menjelaskan bagian dari variasi dalam kumpulan variabel yang diamati atas dasar beberapa dimensi. Dari variabel yang banyak dirubah menjadi sedikit variabel. Tujuan khusus PCA yaitu untuk meringkas pola korelasi antar variabel yang diobservasi, mereduksi sejumlah besar variabel menjadi sejumlah kecil faktor, memberikan sebuah definisi operasional (sebuah persamaan regresi) dimensi pokok penggunaan variabel yang diobservasi serta menguji teori yang mendasarinya (Tabachnick, 2001).



Teknik PCA berdarakan pada dekomposisi matriks data  $X$  menjadi dua, yaitu atriiks  $T$  dan matriks  $P$  yang saling tegak lurus, sebagai berikut (Brenton & Godfrey, 2010).

$$X = T.P^T + E$$

$T$  = Matriks skor yang menggambarkan varians dalam objek.

$P$  = Matriks loading, yaitu pengaruh penuh terhadap komponen utama yang terdiri atas data asli dalam sistem koordinat baru.

$E$  = Galat dari model yang terbentuk

$A$  = Jumlah *Principle Component* (PC) yang digunakan untuk membuat model

Hasil analisis menggunakan PCA berupa keragaman (*variance*), plot skor (*score plot*), dan plot loading (*loading plot*), yang mana antar ketiga atribut tersebut saling melengkapi. Keragaman memberikan banyak informasi yang dapat digunakan pada PC. Plot loading menyatakan korelasi antara variabel-variabel dalam setiap PC, sedangkan plot skor menggambarkan sifat-sifat sampel. Hasil analisis PCA dikatakan baik apabila dengan jumlah komponen utama yang sedikit mampu menggambarkan total variasi yang besar (Septiani, 2012). Dalam penelitian pemrofilan metabolit, plot skor PCA digunakan untuk melihat efek pengelompokan, sedangkan plot loading dapat digunakan untuk menemukan senyawa penciri (Tabachnick, 2001).

Salah satu kriteria yang dimiliki oleh senyawa penciri adalah sebagai berikut:

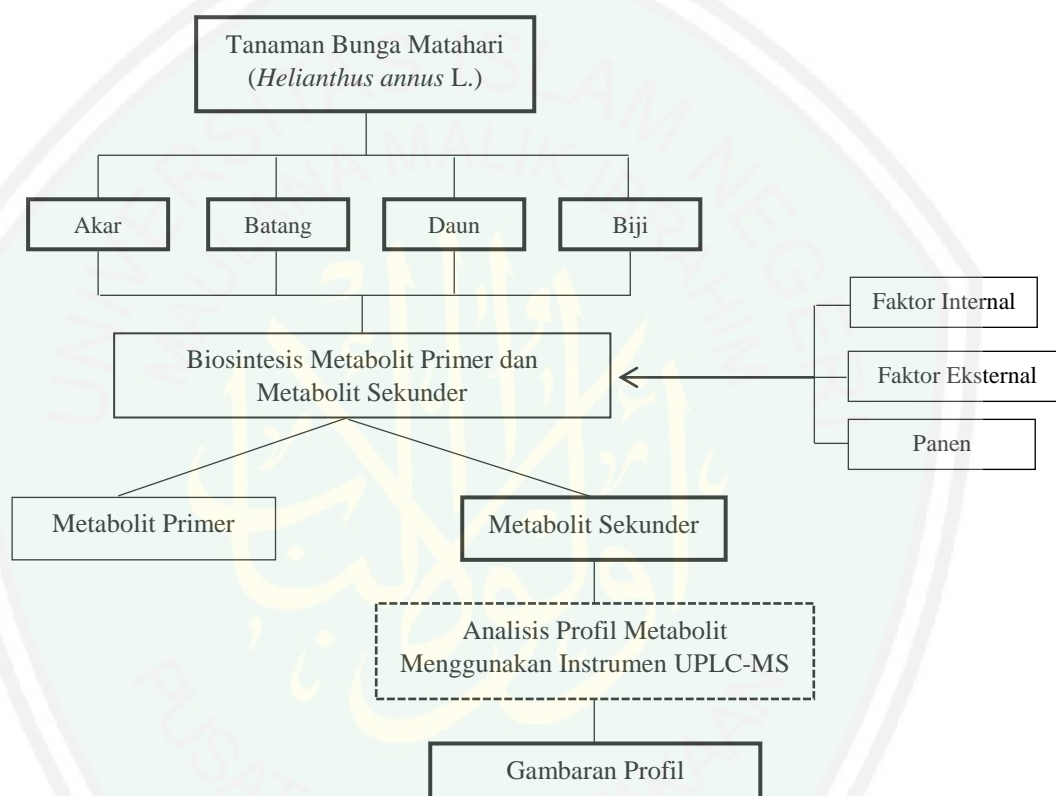


1. Senyawa aktif, yaitu senyawa yang langsung bertanggung jawab terhadap aktivitas misalnya saponin ginsenosida pada tanaman ginseng (*Panax ginseng*).
2. Senyawa utama atau juga disebut senyawa mayor atau senyawa dominan merupakan senyawa yang secara kuantitatif dominan di dalam suatu tanaman obat. Contohnya kurkuminoid di dalam rimpang kunyit (*Curcuma longa*), meskipun senyawa tersebut belum tentu bertanggung jawab langsung terhadap aktivitas farmakologi.
3. Senyawa identitas, yaitu senyawa yang khas, unik, eksklusif, dan hanya terdapat pada suatu tanaman tanaman obat, misalnya lunamarin, lunakrin, lunasin yang terdapat pada daun santeho (*Lunasia amara* Blanco).
4. Senyawa aktual, yaitu senyawa apapun asalkan terdapat didalam tanaman yang dianalisis.

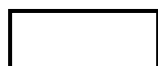
### BAB III

#### KERANGKA KONSEPTUAL

##### 3.1 Bagan Kerangka Konseptual



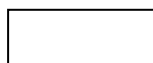
Keterangan:



Diteliti



: Memicu



Tidak diteliti



Metode

### 3.2 Uraian Kerangka Konseptual

*Helianthus annus* L. merupakan salah satu tanaman dengan organ penyusun yang lengkap mulai dari akar sampai dengan biji. Pada masing-masing bagian tersebut tentunya terjadi proses biosintesis sehingga adanya kemungkinan perbedaan biosintesis dan perbedaan metabolit yang dihasilkan.

Biosintesis metabolit merupakan salah satu proses kimiawi vital dasar untuk melakukan aktivitas hidup, tak terkecuali *H. annus*. Proses biosintesis pada *H. annus*. dibedakan menjadi dua, yaitu biosintesis primer dan biosintesis sekunder. Biosintesis primer adalah proses kimiawi yang dilakukan untuk menghasilkan senyawa-senyawa esensial dan dasar reaksi-reaksi kehidupan misalnya karbohidrat sebagai penghasil energi, asam amino dimanfaatkan untuk membangun jaringan dan biokatalis dan asam lemak sebagai cadangan energi.

Sementara itu, biosintesis sekunder adalah suatu aktivitas kimiawi untuk menghasilkan senyawa metabolit sekunder. Metabolit sekunder merupakan senyawa yang dihasilkan atau disintesa pada sel dan grup taksonomi tertentu pada tingkat pertumbuhan atau stress tertentu. Senyawa ini diproduksi hanya dalam jumlah sedikit tidak terus-menerus untuk mempertahankan diri dan habitatnya dan tidak berperan penting dalam proses metabolisme primer. Contoh senyawa metabolit sekunder adalah alkaloid yang berfungsi sebagai senyawa pertahanan dari musuh dan hama, flavonoid sebagai senyawa penghias (perwarna), terpenoid sebagai senyawa penarik serangga guna membantu penyerbukan dan polifenol yaitu senyawa yang bertugas menetralkan senyawa beracun.

Terdapat tiga faktor yang mempengaruhi biosintesis metabolit sekunder yaitu faktor luar (iklim, suhu, jenis tanah, lingkungan, mikroorganisme patogen, sinar matahari), faktor dalam (genetis) dan faktor selama proses panen atau pasca panen.

Komponen metabolit sekunder merupakan senyawa aktif dari tanaman dan hewan, serta memegang peranan penting pada biosintesis dan biodegradasi. Senyawa metabolit sekunder tersebut terakumulasi pada berbagai tahap pertumbuhan, dan tingkat akumulasi yang berbeda pada berbagai tahap pertumbuhan. Senyawa yang terakumulasi pada bagian organ di dalam tanah akan berbeda jumlahnya dengan yang terakumulasi pada bagian organ yang tumbuh di atas tanah. Bagian dari tanaman yang berbeda mengandung senyawa kimia yang berbeda pula.

Perbedaan kandungan metabolit sekunder pada setiap organ tanaman dapat dianalisis dengan mengetahui profil metabolit dari setiap organ tersebut menggunakan metode UPLC-MS.

## **BAB IV**

### **METODE PENELITIAN**

#### **4.1 Jenis dan Rancangan Penelitian**

Penelitian dengan judul “*Metabolite Profiling* bagian akar, batang, daun dan biji *Helianthus annuus* L. menggunakan instrumen UPLC-MS” merupakan penelitian deskriptif untuk menjelaskan profil metabolit ekstrak etanol 96% bagian akar, batang, daun, dan biji *H. annuus* menggunakan instrumen UPLC-MS serta untuk mengetahui perbedaan senyawa penciri dan senyawa mayornya menggunakan analisis data multivariat PCA.

#### **4.2 Waktu dan Tempat Penelitian**

Penelitian ini dilaksanakan di Laboratorium Fitokimia Jurusan Farmasi, Fakultas Kedokteran dan Ilmu-Ilmu Kesehatan, Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang dan Laboratorium Forensik, Badan Reserse dan Kriminal Kepolisian Republik Indonesia, Jakarta Timur. Waktu penelitian bulan Februari sampai dengan April 2018.

#### **4.3 Variabel Penelitian dan Definisi Operasional**

##### **4.3.1 Varibel Penelitian**

- a. Variabel bebas dalam penelitian ini adalah ekstrak etanol 96% bagian akar, batang, daun dan biji *H. annuus*.

- b. Variabel tergantung dalam penelitian ini adalah profil metabolit dan senyawa penciri dan senyawa mayor ekstrak etanol 96% bagian akar, batang, daun dan biji *H. annuus*.
- c. Variabel kontrol pada penelitian ini adalah kain hitam, waktu pengeringan bagian organ *H. annuus*, suhu oven 40°C, pelarut etanol 96% (1:20), dan proses ekstraksi metode UAE selama 2 menit.

#### 4.3.2 Definisi Operasional

- a. *Helianthus annuus* L. diperoleh dari kebun perumahan “Plaosan Permai” Blok D no.2, Jl. Teluk Grajakan, Pandanwangi, Kota Malang dan dari Desa Pujon, Kabupaten Malang. Dipanen ketika sudah tumbuh bunga dan kelopak bunga mulai berguguran (sudah mulai tua).
- b. Bagian akar yang digunakan pada penelitian ini adalah bagian yang berwarna putih pada tanaman *H. annuus*. Bagian batang yang digunakan adalah batang yang berwarna hijau dan terdapat rambut-rambut halus mulai dari pangkal akar sampai ujung tanaman. Bagian daun yang digunakan adalah daun yang berwarna hijau, mulai ukuran yang kecil sampai besar, mulai dari daun muda sampai tua. Bagian biji yang digunakan adalah biji yang sudah kering berwarna hitam dengan garis putih dan mempunyai tekstur yang keras.
- c. Proses pengeringan bagian organ *H. annuus* dengan cara ditutup kain hitam dengan bantuan sinar matahari pada pukul 07.00-11.00 dan dibantu oven dengan suhu 40°C dengan lama pengeringan disesuaikan sampai kadar air simplisia tidak lebih dari 10%.



- d. Ekstraksi bagian akar, batang, daun dan biji tanaman matahari dilakukan dengan cara *Ultrasonic Assisted Extraction* (UAE) yaitu ekstraksi dengan bantuan gelombang ultrasonik selama 2 menit dengan 3 kali pengulangan menggunakan pelarut etanol 96% (1:20) dan dipekatkan dengan bantuan instrumen *rotary evaporator*. Ekstrak disimpan di dalam oven dengan suhu 40°C untuk menghilangkan kandungan pelarut dalam ekstrak.
- e. *Metabolite profiling* adalah suatu metode identifikasi dan penentuan kuantitatif dari sejumlah besar metabolit, yang umumnya berhubungan dengan jalur metabolit spesifik. Pada penelitian ini *metabolite profiling* bagian akar, batang, dan, dan biji *H. annuus* dianalisis menggunakan instrumen *Ultra Performance Liquid Chromatography- Mass Spectrophotometry* UPLC-MS.
- f. Profil metabolit adalah hasil dari identifikasi *metabolite profiling* dimana pada penelitian ini profil metabolit hasil analisis UPLC-MS berupa kromatogram yang kemudian dapat diketahui spektra dengan bantuan aplikasi *Masslink*.
- g. Analisis senyawa penciri bagian akar, batang, daun dan biji *H. annuus* L. menggunakan metode analisis multivariat *Principal Component Analysis* (PCA).

## 4.4 Alat dan Bahan Penelitian

### 4.4.1 Alat

Alat yang dibutuhkan pada penelitian ini adalah timbangan analitik, gelas *Erlenmeyer*, kertas saring, corong gelas, batang pengaduk, instrumen ekstraksi ultrasonik (UAE), gelas ukur, pipet tetes, *rotary evaporator*, gelas ukur 100 ml, oven, cawan porselen, gelas arloji, spatula, sendok tanduk, instrumen *Moisture Content*, instrumen UPLC-MS, tabung *appendorf*, dan *microsyringe*.

### 4.4.2 Bahan

Bahan yang digunakan pada penelitian ini adalah simplisia akar, batang, daun dan biji *H. annus*, pelarut etanol 96%, akuades, metanol, air, asam format, dan asetronitril.

## 4.5 Prosedur Penelitian

### 4.5.1 Pembuatan Simplisia Akar, Batang, Daun dan Biji *H. annus*.

Pembuatan simplisia dari bagian akar, batang, daun dan biji *H. annus* dimulai dari pemanenan *H. annus* yang diperoleh dari kebun perumahan “Plaosan Permai” Blok.D no.2, Jl. Teluk Grajakan, Pandanwangi, Kota Malang dan Desa Pujon, Kabupaten Malang. Dipanen ketika sudah tumbuh bunga dengan kelopak yang mulai berguguran (sudah mulai tua). Selanjutnya bagian akar, batang, daun dan biji tanaman dipisahkan dan dibersihkan dari kotoran dengan air mengalir. Setelah bersih, bagian batang dipotong kecil-kecil  $\pm 5$  cm, bagian daun dipisahkan dari tangkai daun dan dikeringkan menggunakan kain hitam dan dipanaskan dengan bantuan sinar matahari. Lamanya pengeringan tergantung dari bagian

tanaman sampai diperoleh kadar air pada simplisia tidak lebih dari 10% dengan durasi pengeringan 4 jam/hari (pukul 07.00-11.00 WIB) dan dibantu pengeringan menggunakan oven dengan suhu 40°C. Setelah kering, bagian organ *H. annus* memasuki proses *grinding* yaitu merubah ukuran menjadi sebuk halus atau disebut simplisia.

#### 4.5.2 Pengujian Kadar Air Simplisia

Pengujian kadar air dari simplisia dilakukan dengan tujuan untuk memperoleh mutu simplisia yang bagus, karena banyaknya kandungan air menyebabkan mudahnya simplisia ditumbuhi oleh jamur atau bakteri. Pengujian kadar air dilakukan menggunakan instrumen *Moisture Content*. Langkah pertama yang dilakukan adalah ditimbang simplisia sebanyak 0,5 gram kemudian dianalisis menggunakan instrumen *Moisture Content*. Kadar air dari simplisia tidak boleh lebih dari 10%.

#### 4.5.3 Pembuatan Ekstrak Etanol Akar, Batang, Daun dan Biji *H. annus*.

Proses pembuatan ekstrak bagian akar, batang, daun dan biji *H. annus* dilakukan dengan menggunakan bantuan pelarut etanol 96% dengan perbandingan simplisia : pelarut (1:20). Langkah pertama yang dilakukan adalah ditimbang simplisia sebanyak 25 mg kemudian dimasukkan ke dalam gelas *Erlenmeyer* ukuran 500ml. Ditambahkan pelarut etanol 96% sebanyak 500 ml diaduk perlahan kemudian dimasukkan dalam instrumen *Ultrasound Assisted Extraction* (UAE), ekstraksi dilakukan selama 2 menit dengan 3x pengulangan. Selanjutnya, filtrat dipisahkan dengan residu menggunakan kertas saring.

Filtrat yang telah terpisah selanjutnya memasuki tahap evaporasi. Tujuan dari proses ini adalah menghilangkan pelarut sehingga terbentuk ekstrak yang lebih murni. Proses ini dibantu oleh instrument *rotary evaporator*. Proses evaporasi dihentikan saat terbentuk suatu cairan sedikit kental pada labu alas bulat. Kemudian, ekstrak dipindah ke cawan porselen untuk selanjutnya dimasukkan dalam oven dengan suhu 40°C untuk menguapkan pelarut yang dimungkinkan masih terkandung setelah proses evaporasi.

#### 4.5.4 Metabolite Profiling Menggunakan UPLC-MS

Penentuan jenis metabolit dari ekstrak etanol akar, batang, daun dan biji *H. annus* menggunakan instrument UPLC-MS. Pertama-tama ditimbang dengan seksama 10,00 mg ekstrak etanol akar, batang, daun dan biji *H. annus* kemudian dilarutkan dengan metanol ke dalam labu ukur 10 ml dan dimasukkan *microsyringe* sebanyak 5µl.

Kromatogram hasil pemisahan oleh UPLC-MS diolah menggunakan aplikasi *Masslynx* versi 4.1 sehingga data berupa luas puncak dan spektra m/z dari tiap-tiap puncak yang terdeteksi, sehingga senyawa yang diprediksi dapat diinterpretasikan dengan bantuan website *Chemspider* ([www.chemspider.com](http://www.chemspider.com)).

Sistem pada UPLC-MS yang digunakan memiliki spesifikasi yang ditunjukkan dalam table 4.1 sebagai berikut.

Tabel 4.1 Klasifikasi instrumen UPLC-MS

Sistem UPLC	
Alat	UPLC with MS <i>detector</i>
Kolom	Aquity C18' 1,8 $\mu$ m; 2,1 x 150 mm
Eluen	a. Air (HPLC <i>grade</i> ) : Asam Formiat = 99,9 : 0,1 (v/v) b. Asetronitritil : Asam Formiat = 99,9 : 0,1 (v/v)
<i>Flow Rate</i>	0,2 mL/menit dengan volume injeksi 5 $\mu$ L
Metode Eluasi	Sistem eluasi gradient
Sistem MS	
Sumber Ion	ESI (+)
Analisa	XEVO G2-S QtoF MS
<i>Source Temperature</i>	100°C
<i>Desolvation Temperature</i>	350°C
<i>Desolvation Gas Flow</i>	796°C

#### 4.6 Analisis Data

Data hasil analisis menggunakan UPLC-MS kemudian dianalisis menggunakan PCA untuk mengetahui senyawa penciri yang jauh dari kuadran. Teknik analisis PCA menggunakan perangkat lunak *Minitab* versi 17 untuk pengenalan pola dari data yang diperoleh dan memperoleh gambaran perbedaan metabolit akibat perbedaan organ serta untuk menentukan senyawa penciri berdasarkan perbedaan organ tumbuhan. Data yang digunakan adalah nama senyawa dan persentase kadar hasil interpretasi data kromatogram.



## BAB V

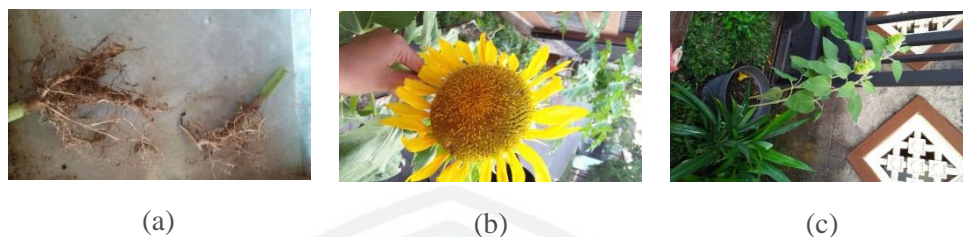
### HASIL DAN PEMBAHASAN

Penelitian dengan judul “*Metabolite Profiling* Bagian Akar, Batang, Daun, dan Biji *Helianthus annuus* L. Menggunakan Instrumen UPLC-MS/MS” bertujuan untuk memperoleh data profil metabolit dan mengetahui senyawa penciri *Helianthus annuus* L. serta mengetahui senyawa mayor dan kadarnya pada bagian akar, batang, daun, dan biji *Helianthus annuus* L.

#### 5.1 Determinasi Tanaman *Helianthus annuus* L.

Determinasi tanaman *H. annuus* dilakukan di UPT Materia Medica dengan menggunakan tumbuhan utuh dari bagian akar sampai biji. Determinasi tumbuhan ini bertujuan untuk memastikan bahwa sampel yang digunakan adalah tumbuhan asli *H. annuus*.

Berdasarkan surat keterangan determinasi nomor 074/406/102.7/2017 diketahui bahwa sampel yang digunakan merupakan sampel asli tumbuhan *H. annuus* dengan karakteristik batang yang ditumbuhi oleh rambut kasar dan tegak, bunga berwarna kuning cerah, akar tunggang berwarna putih dan daun lebar, tunggal, berwarna hijau.

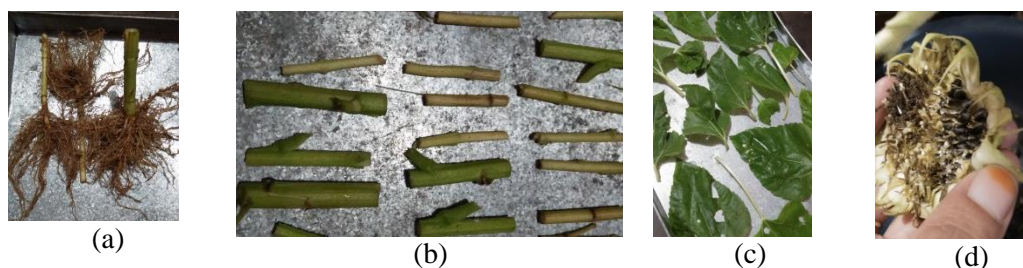


Gambar 5.1 Tanaman *Helianthus annuus* L. yang dideterminasi bagian akar (a), bunga (b), batang dan daun (c)

## 5.2 Preparasi Sampel

Sampel yang digunakan pada penelitian ini adalah semua bagian akar, batang, daun, dan biji *H. annuus* yang diperoleh dari daerah Kota Malang dan Kota Batu. Sebagian sampel dibersihkan dengan air mengalir, dipisahkan dari segala jenis kotoran yang dapat mengganggu proses ekstraksi, dan dipotong-potong untuk selanjutnya dikeringkan. Sebagian lagi dibiarkan utuh untuk dilakukan determinasi yang dibantu oleh UPT Materia Medica.

Proses pengeringan dilakukan dengan dua cara yaitu, menjemur dibawah sinar matahari secara tidak langsung dan menggunakan oven dengan suhu 40°C. Pengeringan dilakukan dengan tujuan untuk mengurangi kadar air, menghentungkan reaksi enzimatis, dan mencegah timbulnya jamur sehingga dapat disimpan lebih lama, tidak mudah rusak, dan komposisi senyawa metabolit sekunder juga tidak mengalami perubahan (Pramono, 2006).



Gambar 5.2 Proses pengeringan bagian akar (a), batang (b), daun (c), dan biji (d) *Helianthus annuus* L.

Proses pengeringan dilakukan tidak terlalu lama untuk menghindari rusaknya jaringan maupun kandungan senyawa akibat paparan panas sinar matahari maupun oven. Apabila sampel ketika dipegang sudah bertekstur seperti kayu maka proses pengeringan dihentikan.

Tahap selanjutnya yaitu sampel dirubah menjadi bentuk simplisia (serbuk) yang mana proses ini dilakukan di UPT Materia Medica dengan bantuan mesin penggiling (*grinding*). Sampel digiling sampai diperoleh ukuran yang sangat halus sehingga luas permukaan semakin luas untuk memudahkan pelarut masuk ke dalam sel dan menyari kandungan-kandungan penting didalamnya. Semakin kecil ukuran partikel menyebabkan semakin besar luas permukaan sehingga interaksi partikel dan pelarut juga akan semakin besar (Brady, 1999). Simplisia akar berwarna coklat muda sebanyak 15 gram, simplisia batang berwarna coklat sedikit gelap sebanyak 78 gram, simplisia daun berwarna hijau pucat sebanyak 60 gram dan simplisia biji berwarna coklat kehitaman dengan bau khas biji bunga matahari sebanyak 70 gram. Simplisia disimpan didalam ruang kedap udara yang sudah diberi penyerap air agar tidak rusak selama penyimpanan.



Gambar 5.3 Simplisia bagian akar (a), batang (b), daun (c), dan biji (d) *Helianthus annuus* L.

### 5.3 Analisis Kadar Air

Simplisia yang telah siap digunakan terlebih dahulu dicek kadar air menggunakan instrumen *Moisture Content Analyzer*. Kadar air merupakan banyaknya kandungan air di dalam simplisia yang dinyatakan dalam persen. Prinsip instrumen *Moisture Content Analyzer* adalah proses pengeringan sampai didapat bobot konstan sehingga kadar air dalam persen (%) langsung terbaca oleh monitor (Sugiarti & Setyawati, 2017).

Kadar air merupakan salah satu faktor yang mempengaruhi daya tahan bahan olahan. Semakin rendah kadar air, maka akan semakin lambat pertumbuhan organisme sehingga daya tahan bahan pangan akan semakin lama. Sebaliknya, semakin tinggi kadar air maka akan semakin cepat organisme berkembang biak sehingga proses pembusukan berlangsung semakin cepat (Sari, 2011). Kadar air simplisia akar, batang, daun, dan biji *H.annuus* disajikan dalam tabel 5.1 sebagai berikut.

Tabel 5.1 Hasil Uji Kadar Air Simplisia Bagian Akar, Batang, Daun, dan Biji *Helianthus annuus* L.

Simplisia	Rata-rata Kadar Air (%)	Syarat Mutu	Kesimpulan
Akar	9,84%	Maksimal 10%	Hasil pengujian simplisia batang, daun, dan biji <i>Helianthus annuus</i> L. sesuai dengan syarat mutu MM II Tahun 1978
Batang	9,54%		
Daun	7,98%		
Biji	5,91%		

Sumber: *Materia Medica Indonesia*, 1978

Berdasarkan tabel tersebut dapat diketahui bahwa kadar air simplisia akar, batang, daun, dan biji *Helianthus annuus* L. telah memenuhi persyaratan yaitu

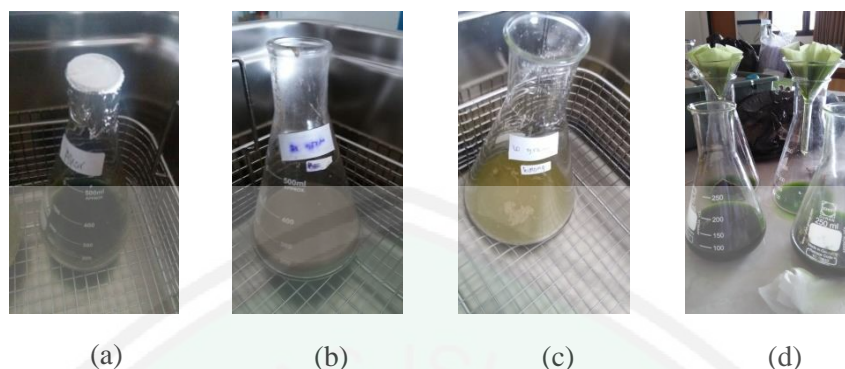


tidak lebih dari 10%. Tingginya kadar air dalam sel dapat menyebabkan kemungkinan enzim melakukan aktivitasnya yaitu mengubah kandungan kimia dalam sel menjadi produk lain yang berbeda dengan senyawa aslinya sehingga menyebabkan timbulnya efek farmakologi yang juga berbeda (Pramono, 2006). Oleh sebab itu, kadar air dalam suatu simplisia tidak boleh lebih dari 10% untuk menghindari tumbuhnya organisme yang dapat merusak atau mengubah senyawa kimia dalam sampel.

#### **5.4 Ekstraksi Menggunakan Metode *Ultrasonic Assisted Extraction* (UAE)**

Proses ekstraksi pada penelitian ini menggunakan pelarut etanol 96% karena etanol 96% lebih optimal menarik kandungan senyawa di dalam sel daripada etanol 70%. Selain itu, campuran etanol dan air merupakan pelarut yang sangat pas digunakan untuk menghasilkan hasil ekstrak yang baik karena dapat menarik senyawa non polar dan senyawa polar. Proses ekstraksi dilakukan selama 2 menit dengan tiga kali pengulangan, agar senyawa yang tertarik lebih maksimal daripada hanya satu kali ekstraksi. Selain itu, selama proses ekstraksi penggunaan pelarut dibagi menjadi tiga bagian. Ketika satu bagian pelarut sudah jenuh selanjutnya difiltrasi untuk memisahkan residu dengan filtrat, residu ditambah pelarut bagian kedua kemudian di ekstraksi kembali. Hal ini bertujuan ketika pelarut sudah jenuh kemudian diganti dengan pelarut baru maka kandungan senyawa yang tertarik lebih optimal daripada tidak ada penggantian pelarut.





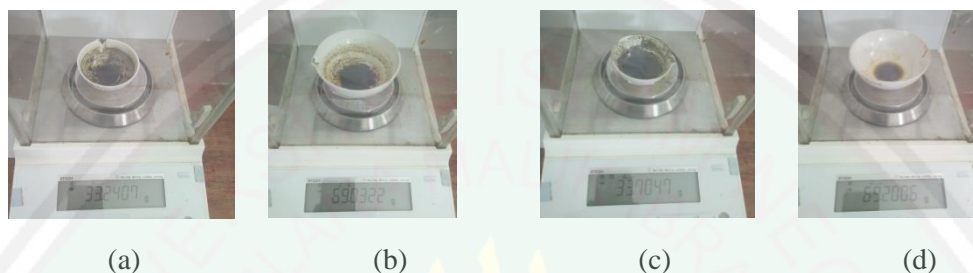
Gambar 5.4 Proses ekstraksi metode *Ultra Assisted Extraction* menggunakan pelarut etanol 96% (1:20) b/v bagian akar (a), biji (b), batang (c), daun (d)

Proses ekstraksi menggunakan metode UAE menghasilkan filtrat berwarna hijau muda pada bagian akar, warna coklat pada bagian biji, warna kuning pada bagian batang, dan hijau tua pada bagian daun. Selanjutnya, filtrat yang telah dipisahkan dengan residu dipekatkan menggunakan instrumen *rotary evaporator* untuk menghilangkan pelarut yang masih terkandung di dalam sampel. Prinsip kerja dari *rotary evaporator* adalah untuk menguapkan pelarut ekstraksi dan hanya meninggalkan senyawa hasil diekstraksi yang disebut dengan ekstrak (Reo, *et al*, 2017).

Evaporasi secara umum dapat didefinisikan dalam dua kondisi, yaitu: (1) evaporasi yang berarti proses penguapan yang terjadi secara alami, dan (2) evaporasi yang dimaknai dengan proses penguapan yang timbul akibat diberikan uap panas (*steam*) dalam suatu peralatan. Evaporasi dapat diartikan sebagai proses penguapan daripada cairan dengan penambahan panas (Long, 1995). Tujuan dari evaporasi adalah memperoleh larutan pekat dari larutan encer dengan jalan pendidihan dan penguapan.

Filtrat yang telah terbentuk dari proses evaporasi selanjutnya di masukkan dalam cawan dan dioven dengan suhu 40°C sampai didapat ekstrak kental

menyerupai pasta. Ekstrak bagian akar dan daun berwarna hijau sedangkan ekstrak bagian batang dan biji berwarna kuning kecoklatan, namun ekstrak bagian biji terlihat memisah menjadi dua fase yaitu minyak yang berwarna kuning jernih dan ekstrak yang berwarna kecoklatan keruh.



Gambar 5.5 Ekstrak *Helianthus annuus* L. bagian akar (a), batang (b), daun (c), dan biji (d)

Selanjutnya, ekstrak yang telah diperoleh dihitung randemen. Randemen adalah perbandingan jumlah (kuantitas) ekstrak yang dihasilkan dari ekstraksi tanaman, randemen ekstrak dapat digunakan sebagai parameter mutu ekstrak yang telah dibuat.

Tabel 5.2 Randemen ekstrak *Helianthus annuus* L.

No.	Bagian Organ	Berat Serbuk (g)	Berat Ekstrak (g)	Randemen (%)
1.	Akar	15,0051	1,5850	10,563
2.	Batang	77,6125	4,3180	5,5630
3.	Daun	58,2447	6,8776	11,808
4.	Biji	70,0309	2,9310	4,1860

Berdasarkan tabel di atas, nilai randemen ekstrak *Helianthus annuus* L. sangat bervariasi. Nilai randemen tertinggi adalah ekstrak bagian daun, sedangkan randemen terendah terdapat pada ekstrak bagian biji. Keberagaman nilai randemen dapat dipengaruhi oleh beberapa faktor antara lain, varietas tanaman,

umur tanaman, proses pemeliharaan tanaman, faktor lingkungan tempat tumbuh tanaman, proses panen, dan proses pengolahan tanaman (Distantina, *et al*, 2009).

Perbedaan organ pada *Helianthus annuus* L. dapat mempengaruhi perbedaan randemen ekstrak yang diperoleh dan adanya kemungkinan metabolit sekunder pada tiap organ berbeda. Komponen metabolit sekunder merupakan senyawa aktif dari tanaman dan hewan, serta memegang peranan penting pada biosintesis dan biodegradasi (Waller, 1987). Senyawa metabolit sekunder tersebut terakumulasi pada berbagai tahap pertumbuhan, dan tingkat akumulasi yang berbeda pada berbagai tahap pertumbuhan. Senyawa yang terakumulasi pada bagian organ di dalam tanah akan berbeda jumlahnya dengan yang terakumulasi pada bagian organ yang tumbuh di atas tanah. Bagian dari tanaman yang berbeda mengandung senyawa kimia yang berbeda pula (Rice, 1974).

Ekstrak kental yang telah terbentuk timbang sebanyak 10 gram dan dimasukkan ke dalam vial untuk selanjutnya di kirim ke Pusat Laboratorium Forensik, Jl. Kav. Agraria no.79 Jakarta Timur. Adapun randemen dari masing-masing ekstrak *Helianthus annuus* L. disajikan dalam tabel 5.2 sebagai berikut.

### 5.5 Analisis Profil Metabolit Menggunakan UPLC-MS

Analisis profil metabolit *Helianthus annuus* L. pada penelitian ini menggunakan instrumen *Ultra Performance Liquid Chromatography-Mass Spectrometry* (UPLC-MS). UPLC merupakan salah satu teknik perkembangan kromatografi cair yang digunakan untuk segresi komponen yang berbeda pada suatu campuran dengan tingkat molekuler mencapai dua mikron partikel analit.

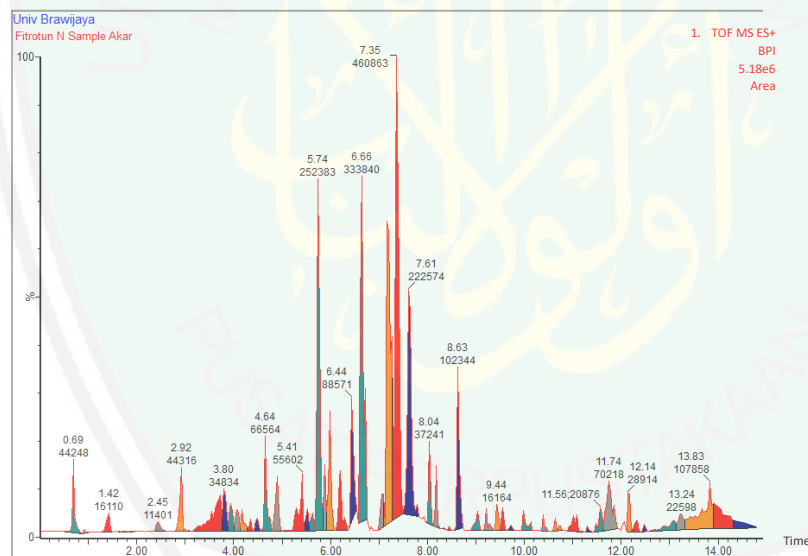
Metode analisis menggunakan instrumen UPLC dapat mereduksi konsumsi fase gerak sampai dengan 80% dalam waktu yang relatif lebih singkat sekitar 1,5 menit daripada menggunakan instrumen HPLC (Chawla G. d., 2016).

UPLC-MS yang digunakan pada penelitian ini menggunakan detektor MS dengan sumber ion ESI (+) dan analisator MS berupa Q-ToF. Instrumen tersebut memiliki beberapa keunggulan, yaitu selektif dan sensitif dengan performa resolusi yang tinggi dan cepat sehingga waktu analisis lebih cepat (Chawla G. d., 2016).

Analisis profil metabolit *Helianthus annuus* L. diawali dengan menginjeksi sampel ke dalam lubang suntik yang kemudian memasuki kolom sehingga terjadi proses pemisahan komponen senyawa metabolit pada ekstrak yang diinjeksi. Pada penelitian ini fase diam yang digunakan adalah kolom C18 atau oktadesil silika. Kelebihan oktadesil silika sebagai fase diam adalah fase ini mampu memisahkan senyawa-senyawa mulai dari kepolaran yang rendah, sedang, sampai tinggi (Rohman, 2010). Eluen yang digunakan adalah campuran air:asam format (99,9:0,1) (v:v) dan asetonitril:sam format (99,9:0,1) (v:v) dengan sistem elusi gradien, yaitu sistem elusi dimana eluen yang digunakan berubah-ubah volumenya setiap waktunya. Campuran air dan asam format dengan asetonitril dan asam format merupakan campuran eluen yang memudahkan proses pemisahan di dalam kolom dalam kurun waktu yang cepat yaitu kurang dari 10-15 menit (Farag, *et al*, 2016). Kromatogram dengan senyawa polar akan muncul terlebih dahulu kemudian dilanjutkan oleh senyawa yang kepolarannya lebih

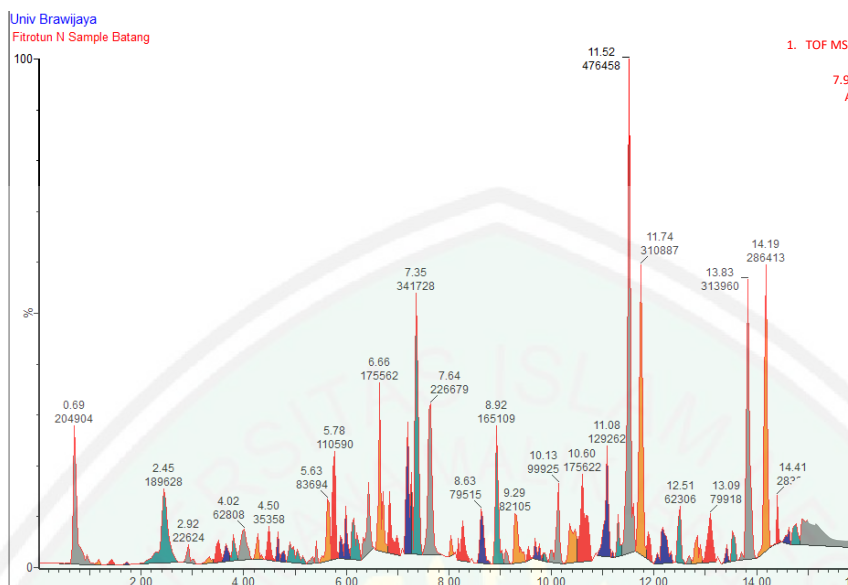
rendah. Selanjutnya, hasil eluasi dalam kolom menuju ke detektor MS sehingga hasil dapat dibaca dengan mudah.

Sampel yang berupa cairan akan dirubah menjadi butiran tetesan melewati *needle* yang telah diberi muatan ESI (+). Ion-ion yang telah dihasilkan oleh detektor MS selanjutnya akan dipisahkan oleh analisator Q-ToF. Hasil pemisahan akan muncul sebagai kromatogram yang kemudian diolah menggunakan aplikasi *Masslynx 4.1* sehingga dapat diketahui spektra dari tiap puncak kromatogram (Anissa, 2012). Berikut merupakan kromatogram hasil analisis profil metabolit *Helianthus annuus* L.

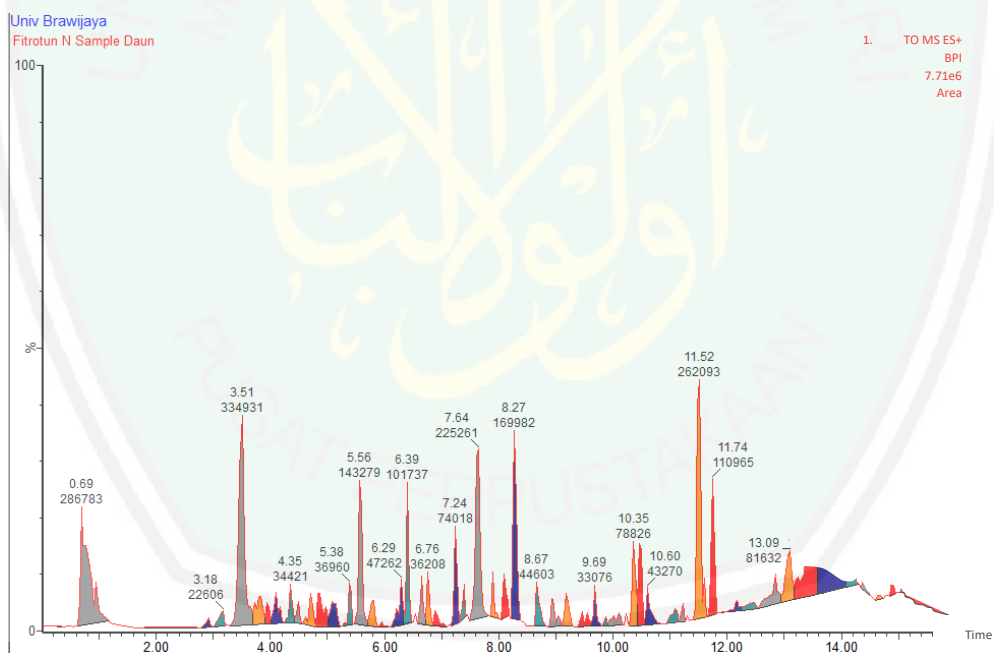


(a)



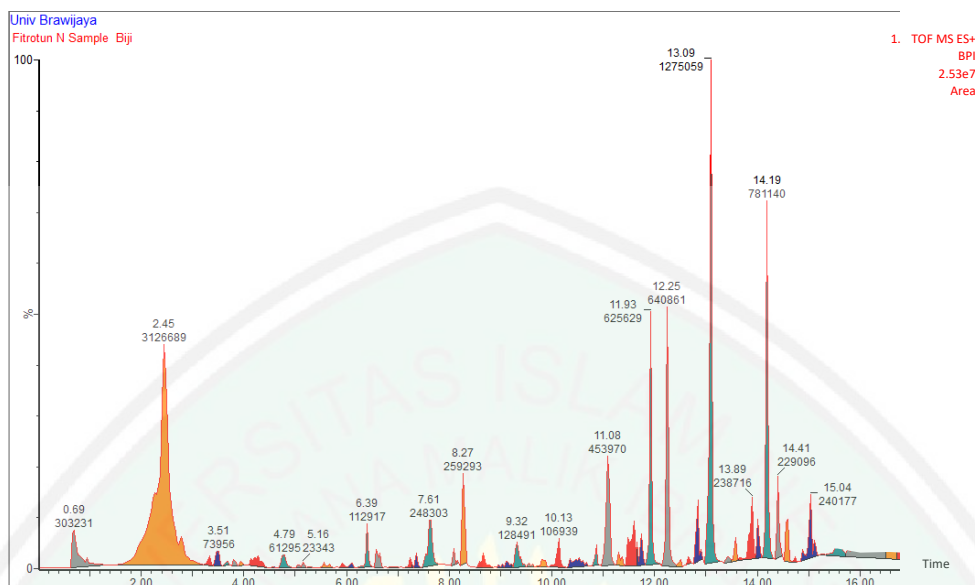


(b)



(c)





(d)

Gambar 5.6 Kromatogram Analisis Profil Metabolit Menggunakan UPLC-MS *Helianthus annuus* L. bagian akar (a). Batang (b), daun (c), dan biji (d)

Kromatogram tersebut kemudian diolah menggunakan aplikasi *Masslynx* 4.1 sehingga dapat diketahui dan dapat diprediksi rumus molekul senyawa tersebut. Setiap satu puncak kromatogram mengidentifikasi satu senyawa. Berdasarkan nilai *measured mass* dan *calculated mass* pada spektra maka dapat diketahui prediksi rumus molekul dari spektra tersebut. Nilai dari *measured mass* dan *calculated mass* juga harus dikurangi massa 1 atom H yaitu 1,0078 disebabkan karena pada saat pemisahan menggunakan kolom terjadi penambahan atom H yang berasal dari penembakan ion ESI (+). Prediksi rumus molekul yang muncul pada data kemudian dipilih yang selisih antara *measured mass* dan *calculated mass*  $\pm 0,0005$ . Prediksi rumus molekul yang sudah dipilih selanjutnya di cari dengan bantuan *website* [www.chemspider.com](http://www.chemspider.com), rumus molekul yang ditulis pada *website* ini harus dikurangi 1 atom H terlebih dahulu disebabkan karena pada proses pemisahan terjadi penambahan 1 atom H yang berasal dari penembakan

ion ESI (+). Setelah pencarian selesai maka dipilih nomer ID senyawa berdasarkan banyaknya publikasi, kemudian dipilih nama ADC/IUPAC untuk selanjutnya di *convert* menggunakan aplikasi *Chemdraw Ultra 12.0* sehingga dapat diketahui struktur dari senyawa yang diinginkan. Hasil dari interpretasi data kromatogram disajikan dalam tabel 5.3 sebagai berikut.

Tabel 5.3 Data Senyawa Hasil Interpretasi Data Kromatogram Bagian Akar, Batang, Daun, dan Biji *Helianthus annuus* L.

Ekstrak Akar <i>Helianthus annuus</i> L.					
No	Rt	Measured Mass	Calculated Mass	Formula	Nama Senyawa
1.	0,1528	-	-	-	Unknown
2.	0,4785	-	-	-	Unknown
3.	0,6292	380,0716	380,0712	C13H20N2O7S2	[(3-Methyl-4-nitrosophenyl)imino]di-2,1-ethanediyl dimethanesulfonate
4.	1,1350	120,0324	120,0324	C6H4N2O	2-hydroxynicotinonitrile
5.	1,4200	444,1251	444,1256	C24H20N4O3S	4-[[[3-(4-Methylphenyl)-4-oxo-3,4-dihydro-2-quinazolinyl]sulfanyl]acetyl]amino]benzamide
6.	1,7520	120,0322	120,0324	C6H4N2O	2-hydroxynicotinonitrile
7.	1,8660	120,0322	120,0324	C6H4N2O	2-hydroxynicotinonitrile
8.	2,4490	265,1308	265,1306	C9H21N5O2Cl	Unknown
9.	2,9180	472,1190	472,1186	C20H31O6Cl3	4-Heptylphenyl hexopyranoside - chloroform (1:1)
10.	3,7300	431,2729	431,2731	C18H41NO10	Unknown
11.	3,7990	475,2986	475,2988	C33H37N3	4-{Bis[4-(1-pyrrolidinyl)phenyl]methyl}-N,N-dimethyl-1-naphthalenamine
12.	3,9470	519,3243	519,3243	C27H45N5O3S	4-Amino-N <sup>3</sup> ,N <sup>5</sup> -dicyclohexyl-N <sup>2</sup> -(1-[(3-methylbutyl)amino]-1-oxo-2-pentanyl)-1,2-thiazole-3,5-dicarboxamide
13.	4,0610	557,1741	557,1737	C24H36N3O7Br	2-{4-[4-(Allyloxy)-3-bromo-5-ethoxybenzyl]-1-piperazinyl}-N-(2-methyl-2-propanyl)acetamide ethanedioate (1:1)
14.	4,1640	448,1014	448,1011	C22H21N6Br	3-Bromo-5-phenyl-N-[[6-(1-pyrrolidinyl)-3-pyridinyl]methyl]pyrazolo[1,5-a]pyrimidin-7-amine
15.	4,3470	602,1987	602,1983		Unknown
16.	4,4960	548,1491	548,1495	C28H26N6O2Cl2	1-(3,4-Dichlorophenyl)-3-[[4,6-dimethyl-2-pyrimidinyl]amino][4-(2-phenylethoxy)phenyl]amino]methyleneurea
17.	4,6450	542,1992	542,1987	C30H30N4O4S	Unknown
18.	4,8960	532,1568	532,1568	C23H20N10O6	3,5-Bis{[4-amino-6-(2-furylmethyl)-5-oxo-4,5-dihydro-1,2,4-triazin-3-yl]amino}benzoic acid
19.	5,1590	120,0322	120,0324	C4H4N2O	2-hydroxynicotinonitrile
20.	5,4110	526,2081	526,2077	C27H26N8O4	3,5-Bis{[4-(4,5-dihydro-1H-imidazol-2-yl)phenyl]carbamoyl}amino}benzoic acid
21.	5,5250	576,1481	576,1479	C37H28O14	2-(3,4-Dihydroxyphenyl)-8-hydroxy-4-oxo-3,4-dihydro-2H-chromen-7-yl 2,4,6-tri-O-acetyl-β-D-glucopyranoside
22.	5,7420	510,1749	510,1751	C25H26N4O8	2-[(6-Amino-1-benzyl-2,4-dioxo-1,2,3,4-tetrahydro-5-pyrimidinyl)(2-methoxyethyl)amino]-2-oxoethyl 2,3-dihydro-1,4-benzodioxine-6-carboxylate
23.	5,8910	552,1846	552,1843	C26H32O13	Methyl (1S,4aS,5R,7S,7aS)-1-(β-D-glucopyranosyloxy)-7-hydroxy-5-[(2E)-3-(4-hydroxyphenyl)-2-propenoyl]oxy-7-methyl-1,4a,5,6,7,7a-hexahydrocyclopenta[c]pyran-4-carboxylate
24.	5,9940	536,1888	536,1892	C25H35N6OSCl2	Unknown
25.	6,2110	594,1967	594,1962	C29H30N4O10	2-Methoxy-4-[(E)-(4-[(3-

					nitrobenzoyl)amino]butanoyl}hydrazono)methyl]p henyl 3,4,5-trimethoxybenzoate
26.	6,4400	536,1905	536,1907	C27H28N4O8	Ethyl (2Z)-1-(2-methoxyethyl)-5-oxo-2-[(3,4,5- trimethoxybenzoyl)imino]-1,5-dihydro-2H- diprido[1,2-a:2',3'-d]pyrimidine-3-carboxylate
27.	6,6570	536,1886	536,1882	C31H28N4O3S	2-[(1-Benzyl-1H-benzimidazol-2-yl)sulfanyl]-N'- {(E)-[4-(benzyloxy)-3- methoxyphenyl]methylene}acetohydrazide
28.	7,0570	639,2172	639,2167	-	Unknown
29.	7,1710	595,2271	595,2267	C34H29N9S	9-Phenyl-8-[4-({4-[3-(2-pyridinyl)-1H-1,2,4- triazol-5-yl]-1- piperidinyl}methyl)phenyl][1,2,4]triazolo[3,4- f][1,6]naphthyridine-3(2H)-thione
30.	7,3540	595,2289	595,2292	C30H29N9O5	Methyl N-({1-[(2,4-diamino-6-pteridinyl)methyl]- 2,3-dihydro-1H-indol-5-yl}carbonyl)-5-(1,3-dioxo- 1,3-dihydro-2H-isoindol-2-yl)norvalinate
31.	7,6060	258,1480	258,1476	C14H26S2	1,4-Dithiaspiro[4.11]hexadecane
32.	8,0400	675,2202	675,2205	-	Unknown
33.	8,1890	631,2284	631,2279	C32H33N5O9	N-(4-{{(6S)-2-Methyl-4-oxo-4,6,7,8-tetrahydro- 1H-cyclopenta[g]quinazolin-6-yl}(2-propyn-1- yl)amino}benzoyl)-L-γ-glutamyl-D-glutamic acid
34.	8,3370	244,0734	244,0736	C14H12O4	1,4-Naphthalenediyl diacetate
35.	8,4520	637,2946	637,2946	C34H39N9O2S	2-({3-[4-(4-Benzyl-1-piperazinyl)phenyl]-3H- [1,2,3]triazolo[4,5-d]pyrimidin-5-yl}amino)-N- cyclohexyl-N-methylbenzenesulfonamide
36.	8,6350	687,2530	687,2527	C34H41NO14	3-Acetyl-3,5,12-trihydroxy-10-methoxy-6,11- dioxo-1,2,3,4,6,11-hexahydro-1-tetracenyl 3- amino-4-O-[1-(1-carboxyethoxy)-3-hydroxybutyl]- 2,3,6-trideoxyhexopyranoside
37.	9,0350	723,3300	723,3297	C37H57NO7S3	Unknown
38.	9,2180	272,1403	272,1404	C12H21N4Ocl	1-[1-(6-Ethoxy-4-pyrimidinyl)-4- piperidinyl]methanamine hydrochloride (1:1)
39.	9,4350	241,2772	241,2770	C16H35N	1-Hexadecanamine
40.	9,5490	809,3684	809,3684	C36H59NO19	Unknown
41.	9,7320	287,2827	287,2825	C17H37NO2	2-Amino-2-tetradecyl-1,3-propanediol
42.	9,9840	895,4058	895,4059	C62H57NO3S	Unknown
43.	10,3840	981,4466	981,4466	C63H59N5O6	Unknown
44.	10,6470	218,1673	218,1671	C15H22O	(4R,4aS,6R)-6-Isopropenyl-4,4a-dimethyl- 4,4a,5,6,7,8-hexahydro-2(3H)-naphthalenone
45.	11,0810	519,3319	519,3322	C29H41N7O2	3-[(4-Cyclohexyl-1-piperazinyl)(1-cyclohexyl-1H- tetrazol-5-yl)methyl]-6-ethoxy-2(1H)-quinolinone
46.	11,2990	294,2191	294,2195	C18H3O3	(10E,12E)-9-Oxo-10,12-octadecadienoic acid
47.	11,5620	495,3334	495,3329	C20H41N13S	UNKNOWN
48.	11,7450	300,1349	319,2148	C19H29NO3	N-[2-(2,2-Dimethyltetrahydro-2H-pyran-4- yl)ethyl]-N-(4-methoxybenzyl)acetamide
49.	12,1450	319,2149	319,2148	C19H29NO3	N-[2-(2,2-Dimethyltetrahydro-2H-pyran-4- yl)ethyl]-N-(4-methoxybenzyl)acetamide
50.	12,3280	401,3511	-	-	UNKNOWN
51.	12,4760	283,3241	283,3239	C19H41N	N-Methyl-1-octadecanamine
52.	13,0590	607,5553	607,5548	C4H4N4OS2Cl3Br4	UNKNOWN
53.	13,2420	607,5538	607,5540	C38H73NO4	(2R)-N-[(2S,3R,4E,13Z)-1,3-Dihydroxy-4,13- docosadien-2-yl]-2-hydroxyhexadecanamide
54.	13,8250	281,2712	-	-	Unknown
55.	14,1910	592,2692	592,2687	-	Unknown
56.	14,8090	875,7937	875,7938	C35N8O0S3Cl3	Unknown
57.	15,7690	662,4464	662,4468	C36H71N2S3Cl	Unknown
58.	16,3860	549,6213	549,6218	CN6O4S4Cl3Br2	Unknown
59.	16,6040	521,5902	521,5900	C36H75N	N,N-Didodecyl-1-dodecanamine
60.	17,3350	875,7953	875,7953	-	Unknown
61.	18,9480	166,0051	166,0046	-	2-Chloropteridine
Ekstrak Batang <i>Helianthus annuus</i> L.					
No	Rt	Measured Mass	Calculated Mass	Formula	Senyawa
1.	0,1528	-	-	-	Unknown
2.	0,2479	-	-	-	Unknown
3.	0,4785	-	-	-	Unknown
4.	1,1690	267,0957	267,0954	C9H17NO8	(6R)-5-Amino-3,5-dideoxy-6-[(1R,2R)-1,2,3-

					trihydroxypropyl]- $\alpha$ -L-threo-hex-2-ulopyranosonic acid
5.	1,4200	444,1258	444,1253	C17H30N2O5SCl2	Methyl (5R)-5-[(1S,2S)-2-chloro-1-({[(2S,4R)-1-chloro-4-ethyl-2-piperidinyl]carbonyl}amino)propyl]-1-thio- $\beta$ -L-arabinopyranoside
6.	1,7180	368,1085	368,1081	C13H16N6O7	2,4,6-Trinitrophenol - 4,4,6-trimethyl-1,4-dihydro-2-pyrimidinamine (1:1)
7.	2,4490	265,1315	265,1314	C14H19O4	N-(4-Methoxybenzoyl)leucine
8.	2,9180	472,1168	472,1163	C23H17N8O2Cl	3-(5-Chloro-1-methyl-1H-indol-3-yl)-4-{1-[2-(2H-tetrazol-5-yl)ethyl]-1H-indazol-3-yl}-1H-pyrrole-2,5-dione
9.	3,3300	341,1621	341,1624	H20N17O3Cl	Unknown
10.	3,5130	452,2015	452,2020	C19H28N6O7	Arginyltyrosylaspartic acid
11.	3,6500	431,2716	431,2713	C15H41N7O3S2	Unknown
12.	3,7980	475,3006	475,3006	C21H41N5O7	(1S,2S,3R,4S,6R)-4-Amino-3-[(2S,3R)-3-amino-6-(aminomethyl)-3,4-dihydro-2H-pyran-2-yl]oxy)-6-(ethylamino)-2-hydroxycyclohexyl 3-deoxy-4-C-methyl-3-(methylamino)- $\beta$ -L-arabinopyranoside
13.	4,0160	539,2373	539,2376	C27H41NO6S2	Unknown
14.	4,2790	537,2223	537,2219	C27H39NO6S2	{3-[(4R,5R)-3,3-Dibutyl-7-(dimethylamino)-4-hydroxy-1,1-dioxido-2,3,4,5-tetrahydro-1-benzothiepin-5-yl]phenyl}methanesulfonic acid
15.	4,4960	428,1453	428,1458	C20H16N10O2	N-{2-[(3-Phenyl[1,2,4]triazolo[4,3-b]pyridazin-6-yl)oxy]ethyl}-6-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)-3-pyridazinecarboxamide
16.	4,6790	542,2000	542,2000	C25H34O13	4,4'-[1,2-Ethanediy]bis(1H-benzimidazole-1,2-diyl)bis(1,2,5-oxadiazol-3-amine)
17.	4,8960	510,1730	510,1726	C29H26N4O3S	5-Cyano-6-({2-[(4-methoxyphenyl)amino]-2-oxoethyl}sulfanyl)-2-methyl-N,4-diphenyl-1,4-dihydro-3-pyridinecarboxamide
18.	5,4110	526,2063	526,2064	C26H30N4O8	Methyl 4-({4-hydroxy-1-[3-(4-morpholinyl)propyl]-2-(3-nitrophenyl)-5-oxo-2,5-dihydro-1H-pyrrol-3-yl]carbonyl)-3,5-dimethyl-1H-pyrrole-2-carboxylate
19.	5,6280	606,2064	606,2061	C28H34N2O13	(4S,4aS,5aS,6S,12aS)-4-(Dimethylamino)-10-( $\beta$ -D-galactopyranosyloxy)-3,6,12,12a-tetrahydroxy-6-methyl-1,11-dioxo-1,4,4a,5,5a,6,11,12a-octahydro-2-tetracenecarboxamide
20.	5,7760	510,1738	510,1738	C24H30O12	2-Methoxy-4-propionylphenyl 2,3,4,6-tetra-O-acetyl- $\beta$ -D-glucopyranoside
21.	5,9940	536,1907	536,1907	C27H28N4O8	Ethyl (2Z)-1-(2-methoxyethyl)-5-oxo-2-[(3,4,5-trimethoxybenzoyl)imino]-1,5-dihydro-2H-dipyrido[1,2-a:2',3'-d]pyrimidine-3-carboxylate
22.	6,1420	604,1929	604,1925	C22H28N12O7S	2-[6-amino-9-[(2R,3S,5R)-5-(aminomethyl)-3,4-dihydroxy-tetrahydrofuran-2-yl]purin-8-yl]sulfanyl-N-[(2R,4S,5R)-5-(6-aminopurin-9-yl)-3,4-dihydroxy-tetrahydrofuran-2-yl]methyl]acetamide
23.	6,4400	606,2084	606,2080	C14H26N18O10	Unknown
24.	6,6570	536,1904	536,1907	C27H28N4O8	Ethyl (2Z)-1-(2-methoxyethyl)-5-oxo-2-[(3,4,5-trimethoxybenzoyl)imino]-1,5-dihydro-2H-dipyrido[1,2-a:2',3'-d]pyrimidine-3-carboxylate
25.	6,8400	832,2913	832,2912	C61H40N2S	Unknown
26.	7,2060	595,2243	595,2238	C24H33N7O11	L-Asparaginy-L-tyrosyl-L-asparaginy-L-alanyl-L-aspartic acid
27.	7,3540	595,2263	595,2265	C28H37NO13	(5R)-1,2,3,4,5-Penta-O-acetyl-5-C-[(1S)-2-acetyl-6,7-dimethoxy-1,2,3,4-tetrahydro-1-isoquinolinyl]-D-xylitol
28.	7,6400	258,1470	258,1467	C13H22O5	2-Methyl-2-propanyl 3,5-dideoxy-2,4-O-isopropylidene-L-erythro-hexuronate
29.	8,0400	675,2154	675,2152	C37H33N5O6S	3-[(4Z)-1,3-Dioxo-4-[(2-{4-[(8-quinolinyl)oxy)methyl]benzoyl}hydrazino)methylen e]-3,4-dihydro-2(1H)-isoquinolinyl]-N,N-diethylbenzenesulfonamide
30.	8,2690	344,0892	344,0896	C18H16O7	2-Methoxyethyl 5-(2-furoyloxy)-2-methyl-1-benzofuran-3-carboxylate
31.	8,6350	687,2545	687,2541	C35H37N5O10	Unknown



32.	8,9210	202,0986	202,0985	C8H15N4Cl	4-(4-Methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)piperidine hydrochloride (1:1)
33.	9,1040	366,1430	366,1427	C17H22N2O7	Ethyl 1-(4,5-dimethoxy-2-nitrobenzoyl)-4-piperidinecarboxylate
34.	9,2860	396,1539	396,1542	C19H28N2O3S2	Ethyl 2-[[2,6-dimethyl-4-morpholinyl]carbonothioyl]amino]-5,6,7,8-tetrahydro-4H-cyclohepta[b]thiophene-3-carboxylate
35.	9,5490	809,3701	809,3702	C28H43N25O3S	Unknown
36.	9,6870	391,2358	391,2359	C22H33NO5	(1aR,2S,5aR,6aR,9aR,9bS)-9-(1,4-Dioxo-8-azaspiro[4.5]dec-8-ylmethyl)-2,5a-dimethyloctahydro-2H-oxireno[4,4a]naphtho[2,3-b]furan-8(9H)-one
37.	9,8350	492,2722	492,2723	C27H41O8	(3a,5b,7a,12a)-3,7,12-Tris(formyloxy)cholan-24-oic acid
38.	10,1320	410,1714	410,1716	C21H18N10	1-(1H-Benzotriazol-1-yl)-N,N-bis(1H-benzotriazol-1-ylmethyl)methanamine
39.	10,3500	276,2089	276,2089	C18H28O2	12-Phenyldodecanoic acid
40.	10,6010	298,1927	298,1924	C15H27N4Cl	1-[(5-Chloro-3-ethyl-1-methyl-1H-pyrazol-4-yl)methyl]-N,N-dimethyl-4-azepanamine
41.	11,0810	519,3334	519,3329	C7H37N25OS	Unknown
42.	11,2990	276,2106	-	-	Unknown
43.	11,5160	431,2668	431,2672	C25H37NO5	N-[(3-{2-[(1S,5S,8aR)-5-(Methoxycarbonyl)-5,8a-dimethyl-2-methylenedecahydro-1-naphthalenyl]ethyl}-2-furyl)methyl]alanine
44.	11,7450	433,2827	433,2828	C25H39NO5	2-[3-(2,2-Dimethyltetrahydro-2H-pyran-4-yl)-6-methylheptyl]isindoline ethanedioate (1:1)
45.	11,8820	521,3471	521,3470	C24H44N11Cl	Unknown
46.	12,1790	319,2149	319,2148	C19H29NO3	N-[2-(2,2-Dimethyltetrahydro-2H-pyran-4-yl)ethyl]-N-(4-methoxybenzyl)acetamide
47.	12,5110	323,2834	323,2831	C13H37N7S	Unknown
48.	12,6940	292,2403	292,2403	C19H32O2	(3a,5a,9c,14c,17a)-Androstane-3,17-diol
49.	12,8420	341,3287	-	-	Unknown
50.	13,0940	300,2095	300,2090	C20H28O2	(5c)-Abieta-8,11,13-trien-18-oic acid
51.	13,5280	255,2565	255,2562	C16H33NO	Palmitamide
52.	13,8250	281,2719	281,2719	C18H35NO	1-Dodecyl-2-azepanone
53.	14,1910	592,2695	592,2699	C36H32N8O	1-(1-{4-[6-(1-Methyl-1H-tetrazol-5-yl)-3-phenyl-2-quinolinyl]benzyl}-4-piperidinyl)-1,3-dihydro-2H-benzimidazol-2-one
54.	14,4090	592,2713	592,2708	C7H38N24O2CS12	Unknown
55.	14,6260	875,7958	875,7958	C24H14N4O27S2Cl	Unknown
Ekstrak Daun <i>Helianthus annuus</i> L.					
No	Rt	Measured Mass	Calculated Mass	Formula	Nama Senyawa
1.	2,0840	120,0317	-	-	Unknown
2.	2,4150	120,0323	120,0324	C6H4N2O	2-hydroxynicotinonitrile
3.	2,9180	468,1938	468,1937	C30H28O5	3-(3,4-Dihydro-2H-1,5-benzodioxepin-7-yl)-6-ethyl-2-methyl-7-[(4-vinylbenzyl)oxy]-4H-chromen-4-one
4.	3,1810	396,1405	396,1407	C16H16N10O3	1-(4-Amino-1,2,5-oxadiazol-3-yl)-5-[(dimethylamino)methyl]-N'-(2-oxo-2H-indol-3-yl)-1H-1,2,3-triazole-4-carbohydrazide
5.	3,5130	447,2474	447,2469	C21H37NO9	(2S)-2-Hydroxy-2-[(2R,5R,6R)-2-methoxy-5,6-dimethyl-4-methylenetetrahydro-2H-pyran-2-yl]-N-[(2R,3R,4S,5R,6R)-3,4,5-trimethoxy-6-(methoxymethyl)tetrahydro-2H-pyran-2-yl]acetamide
6.	3,8330	475,2990	475,2993	C20H45NO11	Unknown
7.	3,9470	519,3250	519,3252	C22H49NO12	Unknown
8.	4,0960	367,2344	367,2359	C20H33NO5	(1aR,2S,5aR,6aR,9aR,9bS)-9-[[2,2-Dimethoxyethyl](methyl)amino]methyl]-2,5a-dimethyloctahydro-2H-oxireno[4,4a]naphtho[2,3-b]furan-8(9H)-one
9.	4,3470	196,1094	196,1091	C6H17N4OCl	1-[2-(Dimethylamino)ethyl]-2-hydroxy-3-methylguanidine hydrochloride (1:1)
10.	4,4960	456,2335	456,2333	C19H32N6O7	Isoleucylthreonylserylhistidine

11.	4,7130	219,1623	219,1625	C14H21NO	2,6-Dimethyl-4-(1-piperidinylmethyl)phenol
12.	4,8270	194,0936	194,0935	C6H15N4OCl	(2E)-2-(2-Methoxybutylidene)hydrazinecarboximidamide hydrochloride (1:1)
13.	5,0790	396,1776	196,1778	C10H20N16S	Unknown
14.	5,3760	525,2583	525,2588	C27H35N5O6	Methyl N-{{[(2R)-1-(isopropylcarbamoyl)-4-(phenylcarbamoyl)-2-piperazinyl]carbonyl}-O-methyl-L-tyrosinate
15.	5,5590	365,2200	365,2202	C20H31NO5	3-Cyclohexyl-3-(4-isopropoxyphenyl)-1-propanaminium hydrogen oxalate
16.	5,8110	438,2215	438,2216	C22H43S3Cl	Unknown
17.	5,9590	248,1018	248,1022	C10H12N6O2	3,4,9-Trimethyl-1,4-dihydro[1,2,4]triazino[3,4-f]purine-6,8(7H,9H)-dione
18.	6,2910	300,0636	300,0634	C16H12O6	5,7-Dihydroxy-2-(3-hydroxy-4-methoxyphenyl)-4H-chromen-4-one
19.	6,3940	330,0729	330,0731	C12H15N4O5Cl	4-Chloro-N-[3-(dimethylamino)propyl]-3,5-dinitrobenzamide
20.	6,6570	360,0820	360,0823	C10H9N14Cl	Unknown
21.	6,7600	477,2323	477,2325	C24H44NS3Cl	Unknown
22.	6,8740	350,2077	350,2073	C9H26N12OS	Unknown
23.	7,2400	228,1167	-	-	Unknown
24.	7,3890	360,1572	360,1573	C20H24O6	[(4-Butyl-8,8-dimethyl-2-oxo-9,10-dihydro-2H,8H-pyrano[2,3-f]chromen-5-yl)oxy]acetic acid
25.	7,6400	258,1464	258,1467	C13H22O5	Bis(2-methyl-2-propanyl) 3-oxopentanedioate
26.	7,9030	402,2377	402,2380	C20H30N6O3	3-Isobutyl-1,7-dimethyl-8-[3-(4-morpholinyl)propyl]-1H-imidazo[2,1-f]purine-2,4(3H,8H)-dione
27.	8,0860	344,0912	344,0912	C12H20N6S3	5-[(1-(2-Methyl-2-propanyl)-3-[2-(methylsulfanyl)ethyl]-1H-1,2,4-triazol-5-yl)methylsulfanyl]-1,3,4-thiadiazol-2-amine
28.	8,2690	344,0896	344,0896	C18H16O7	2-Methoxyethyl 5-(2-furoyloxy)-2-methyl-1-benzofuran-3-carboxylate
29.	8,6690	342,2883	342,2883	C19H38N2O3	{[3-(Dodecanoylamino)propyl](dimethyl)ammonio}acetate
30.	8,9210	202,0987	202,0985	C8H15N4Cl	4-(4-Methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)piperidine hydrochloride (1:1)
31.	9,1840	538,2915	538,2917	C29H34N10O	1-[6-(3,5-Dimethyl-1H-pyrazol-1-yl)-3-pyridazinyl]-N-[6-(4-phenyl-1-piperazinyl)-4-pyrimidinyl]-4-piperidinecarboxamide [
32.	9,4690	241,2772	241,2770	C16H35N	1-Hexadecanamine
33.	9,6870	391,2371	391,2372	C23H29N5O	2-Methyl-N-[3-(4-morpholinyl)propyl]-3-phenyl-6,7-dihydro-5H-cyclopenta[d]pyrazolo[1,5-a]pyrimidin-8-amine
34.	9,8700	390,2372	390,2375	C19H38N2O2S2	2,2'-(1,3-Propanediyl)disulfanediylbis(N,N-dipropylacetamide)
35.	10,0980	895,4011	895,4011	C14H51N39OClBr	Unknown
36.	10,3500	276,2092	276,2090	C18H28O2	12-Phenyldodecanoic acid
37.	10,4640	276,2083	276,2081	C13H29N4Cl	N-[3-(3,4,5,6-Tetrahydro-2H-azepin-7-ylamino)propyl]-1,4-butanediamine hydrochloride (1:1)
38.	10,6010	298,1922	298,1924	C15H27N4Cl	1-[(5-Chloro-3-ethyl-1-methyl-1H-pyrazol-4-yl)methyl]-N,N-dimethyl-4-azepanamine
39.	11,0810	536,2739	536,2734	C27H40N2O9	[4-(Allyloxy)-3,5-dipropylphenyl](4-methyl-1-piperazinyl)methanone 2-hydroxy-1,2,3-propanetricarboxylate (1:1)
40.	11,2300	789,5006	798,5005	C23H51N33	Unknown
41.	11,5160	431,2688	431,2685	C26H33N5O	N-(4-{4-[(1-Methyl-1H-benzimidazol-2-yl)methyl]-1-piperazinyl}phenyl)cyclohexanecarboxamide
42.	11,7450	433,2836	433,2835	C18H39N7O3S	Unknown
43.	12,1790	781,5626	781,5625	781,5625	Unknown
44.	12,3960	781,5628	781,5627	C17H63N31O5	Unknown
45.	12,8420	341,3294	341,3294	C21H43NO2	2-(Trimethylammonio)octadecanoate
46.	13,0940	781,5637	781,5636	C11H2N8O5Cl4Br4	Unknown
47.	13,3910	781,5623	781,5624	C32H67N19O4	Unknown
48.	13,8940	781,5608	781,5609	C6H59N43OS	Unknown



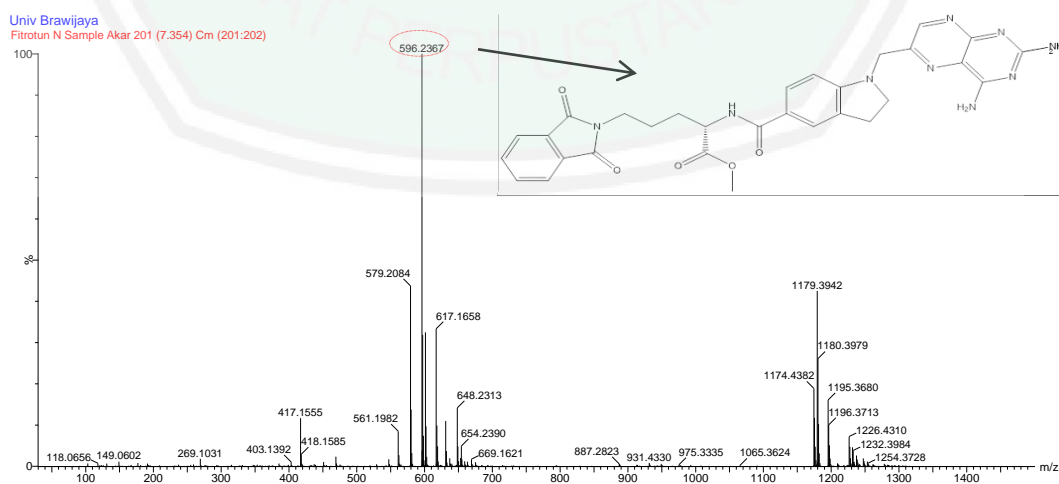
49.	14,1910	592,2686	592,2686	C35H36N4O5	N-{2-[(11aS)-5-(4-Isopropylphenyl)-1,3-dioxo-5,6,11,11a-tetrahydro-1H-imidazo[1',5':1,6]pyrido[3,4-b]indol-2(3H)-yl]benzoyl}-L-leucine
50.	14,4090	592,2697	592,2699	C36H32N8O	1-(1-{4-[6-(1-Methyl-1H-tetrazol-5-yl)-3-phenyl-2-quinolinyl]benzyl}-4-piperidinyl)-1,3-dihydro-2H-benzimidazol-2-one
51.	14,6260	781,5621	781,5622	C6H3N6O1S2ClBr4	Unknown
52.	14,8890	622,2783	622,2778	C35H42O10	(1R,2S,3E,5S,7S,8S,10R,13S)-7,10,13-Triacetoxo-2-hydroxy-8,12,15,15-tetramethyl-9-oxotricyclo[9.3.1.1 <sup>4,8</sup> ]hexadeca-3,11-dien-5-yl (2E)-3-phenylacrylate
53.	15,2550	606,2875	606,2874	C25H38N10O8	7,7'-(1,3-Propandiyl)bis{8-[bis(2-hydroxyethyl)amino]-1,3-dimethyl-3,7-dihydro-1H-purin-2,6-dione]}
54.	15,5400	662,4482	662,4480	C33H58N8O6	N-(1-Oxidoisonicotinoyl)-L-isoleucyl-N-[(2S)-1-[(2S)-3-amino-1-[(2S)-1-(ethylamino)-3-methyl-1-oxo-2-butanyl]amino]-1-oxo-2-propanyl]amino]-4-methyl-2-pentanyl]-L-norvalinamide
55.	15,9060	562,4984	562,4980	C22H58N16O	Unknown
56.	16,1350	783,5796	783,5895	C43H81N3O7S	Unknown
57.	16,6040	521,5905	521,5900	C36H75N	N,N-Didodecyl-1-dodecanamine
58.	17,1530	875,7944	875,7944	C26H8N2O21S6	Unknown
59.	18,9820	166,0047	166,0046	C6H3N4Cl	2-Chloropteridine
60.	19,9310	120,0316	-	-	Unknown
61.	21,6910	120,0315	-	-	Unknown
Ekstrak Biji <i>Helianthus annuus</i> L.					
No	Rt	Measured Mass	Calculated Mass	Formula	Senyawa
1.	0,1528	-	-	-	Unknown
2.	0,3514	-	-	-	Unknown
3.	0,4785	-	-	-	Unknown
4.	2,4490	265,1307	265,1306	-	Unknown
5.	3,3300	341,1621	341,1619	C15H24N5O2Cl	7-[2-(Cyclohexylamino)ethyl]-1,3-dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione hydrochloride (1:1)
6.	3,5130	452,2017	452,2020	C19H28N6O7	Arginyltyrosylaspartic acid
7.	3,6960	431,2717	431,2719	C23H37N5OS	Unknown
8.	3,7990	475,2980	475,2979	C17H37N11O5	Unknown
9.	3,9470	519,3239	519,3235	C22H46N9O5Cl	Unknown
10.	4,2790	521,2053	521,2050	C29H31NO8	4-Benzyl 1-(6-oxo-7,8,9,10-tetrahydro-6H-benzo[c]chromen-3-yl) N-[(2-methyl-2-propanyl)oxy]carbonyl]-L-aspartate
11.	4,5650	430,1608	430,1603	C27H26O3S	6-Hydroxy-2-phenyl-2-(2-phenylethyl)-5-[(2-phenylethyl)sulfanyl]-2,3-dihydro-4H-pyran-4-one
12.	4,7930	337,1320	337,1315	C5H23N9O4S2	Unknown
13.	5,1590	313,1314	313,1314	C18H19NO4	Ethyl 11-oxo-2,3,6,7-tetrahydro-1H,5H,11H-pyrano[2,3-f]pyrido[3,2,1-ij]quinoline-10-carboxylate
14.	5,5590	365,2200	265,2202	C20H31NO5	3-Cyclohexyl-3-(4-isopropoxyphenyl)-1-propanaminium hydrogen oxalate
15.	5,9250	264,0893	264,0893	C8H16N4O4S	Glycyl-N-[(2S)-2-amino-2-carboxyethyl]-L-cysteinamide
16.	6,1080	605,2499	605,2499	C32H31N9O4	N <sup>2</sup> -{2-[(2-Aminoethyl)carbonyl]-1H-indol-5-yl}-N <sup>2</sup> -{2-[(2-aminoethyl)carbonyl]-3H-indol-5-yl}-3H-indole-2,5-dicarboxamide
17.	6,3940	330,0725	330,0720	C6H10N12O3S	Unknown
18.	6,5770	307,2153	301,2148	C18H29NO3	(1Z)-N-(4-Hydroxy-3-methoxybenzyl)-8-methylnonanimidic acid
19.	6,8740	350,2057	350,2058	C15H30N2O7	Methyl (2R,3S,4S,5S)-6-[(8-aminoctyl)amino]-2,3,4,5-tetrahydroxy-6-oxohexanoate
20.	7,2400	228,1157	228,1157	C8H16N6S	3-[Ethyl(1-methyl-1H-tetrazol-5-yl)amino]-2-methylpropanethioamide
21.	7,3540	353,2231	352,2228	CH24N18O4	Unknown
22.	7,6060	258,1461	258,1459	C8H23N4O3Cl	Unknown
23.	8,0860	344,0899	344,0896	C18H16O7	2-Methoxyethyl 5-(2-furoylloxy)-2-methyl-1-

					benzofuran-3-carboxylate
24.	8,2690	-	-	-	Unknown
25.	8,6690	342,2894	-	-	Unknown
26.	9,1040	366,1433	366,1436	C18H26N2O2S2	Ethyl 2-[(cyclohexylcarbamothioyl)amino]-4,5,6,7-tetrahydro-1-benzothiophene-3-carboxylate
27.	9,3210	444,2041	444,2041	C22H29N6O2Cl	7-Butyl-8-[[4-(3-chlorophenyl)-1-piperazinyl]methyl]-1,3-dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione
28.	9,5490	809,3707	809,3708	C38H51N9O11	1-( $\alpha$ -D-Allopyranosyl)-N-(2-[[3-(dimethylamino)propyl]carbamoyl]-1-methyl-1H-imidazol-4-yl)-4-[[4-[[1,1aR)-7-methoxy-5-oxo-2,3,5,11a-tetrahydro-1H-pyrrolo[2,1-c][1,4]benzodiazepin-8-yl]oxy]butanoyl]amino]-1H-pyrrole-2-carboxamide
29.	9,8010	336,2287	336,2292	C15H33N4O2Cl	Unknown
30.	10,1330	410,1693	410,1689	C19H26N2O8	4-(2-Methyl-2-propanyl) 1-(4-nitrophenyl) N-[(2-methyl-2-propanyl)oxy]carbonyl]-L-aspartate
31.	10,5330	506,2226	506,2221	C11H32N16O3Cl2	Unknown
32.	10,8640	519,3322	519,3322	C29H41N7O2	3-[(4-Cyclohexyl-1-piperazinyl)(1-cyclohexyl-1H-tetrazol-5-yl)methyl]-6-ethoxy-2(1H)-quinolinone
33.	11,0810	519,3329	519,3327	C14H37N19O3	Unknown
34.	11,2990	276,2089	276,2090	C18H28O2	12-Phenyldodecanoic acid
35.	11,5960	495,3313	495,3309	C26H45N3O6	N <sup>2</sup> -[(Allyloxy)carbonyl]-N <sup>5</sup> -{[(2-methyl-2-propanyl)oxy]carbonyl}-D-ornithine - N-cyclohexylcyclohexanamine (1:1)
36.	11,7450	461,3053	461,3048	C14H35N15O3	Unknown
37.	11,9280	521,3486	521,3484	C14H39N19O3	Unknown
38.	12,2480	365,3274	-	-	Unknown
39.	12,5110	323,2819	323,2816	C15H38N5Cl	4-Amino-N,N-bis(4-aminobutyl)-N-(3-aminopropyl)-1-butanaminium chloride
40.	12,6590	606,2504	606,2499	C31H42O10S	(1S,5S,6R,7S,8S,11R,12R,16R)-7-Hydroxy-7-(hydroxymethyl)-11,14,14,18,21,21-hexamethyl-19-oxo-3-phenyl-2,4,13,15-tetraoxapentacyclo[15.3.1.0 <sup>1,5</sup> .0 <sup>6,11</sup> .0 <sup>12,16</sup> ]phenicos-17-en-8-yl methanesulfonate
41.	12,8420	341,3298	341,3294	C21H43NO2	2-(Trimethylammonio)octadecanoate
42.	13,0940	367,3446	367,3451	C23H45NO2	N,N-Didecyl-2-hydroxypropanamide
43.	13,4250	781,5645	781,5645	C51H75NO5	Unknown
44.	13,5740	608,2642	608,2639	C36H48S4	Unknown
45.	13,8940	608,2648	608,2648	C36H32N8O2	N,N'-Bis[2-(9-acridinylamino)ethyl]-1-methyl-1H-pyrazole-3,5-dicarboxamide
46.	14,0080	369,3602	369,3607	C23H47NO2	N,N-Didecyl-2-hydroxypropanamide
47.	14,1910	592,2662	591,2659	C31H32N10O3	4-[[4-[3-Ethyl-7-(4-morpholinyl)-3H-[1,2,3]triazolo[4,5-d]pyrimidin-5-yl]phenyl]carbamoyl]amino]-N-[2-(2-pyridinyl)ethyl]benzamide
48.	14,4090	592,2703	592,2703	C22H42N12OSC12	3-[(Methyl{3-[(4-oxo-2-phenyl-4H-chromen-7-yl)oxy]propyl}amino)methyl]phenyl heptylcarbamate hydrochloride (1:1)
49.	14,5910	534,1650	534,2650	C21H38N6O10	N <sup>5</sup> -Acetyl-N <sup>5</sup> -hydroxy-L-ornithyl-N <sup>5</sup> -acetyl-N <sup>5</sup> -hydroxy-L-ornithyl-N <sup>5</sup> -acetyl-N <sup>5</sup> -hydroxy-L-ornithin
50.	14,7400	875,7935	875,7935	C21H9N6O19S6Cl	Unknown
51.	15,0370	389,2929	389,2930	C24H39NO3	N-(2,2-Dimethyltetrahydro-2H-pyran-4-yl)-N-[3-(4-isopropoxyphenyl)-4-methylpentyl]acetamide
52.	15,5860	662,4454	662,4449	C9H51N30O3Cl	Unknown
53.	16,3520	549,6207	549,6202	N8O2S2Cl3Br3	Unknown
54.	16,6040	521,5697	521,5699	OCH1O5S6Br3	Unknown
55.	16,9350	558,4519	558,4514	C18H54N16O4	Unknown

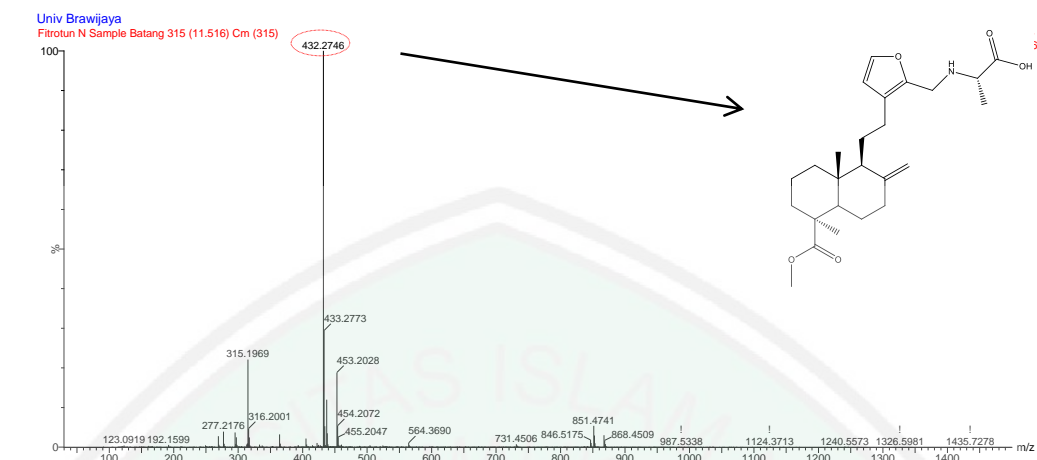
Berdasarkan tabel tersebut dapat diketahui bahwa terdapat 38 senyawa pada bagian akar, 38 senyawa pada batang, 37 senyawa pada daun, dan 29 senyawa

pada biji. Dari data tersebut diketahui terdapat perbedaan profil metabolit pada bagian akar, batang, daun, dan biji *Helianthus annuus* L. ditandai dengan adanya perbedaan jenis senyawa yang terkandung pada masing-masing bagian organ.

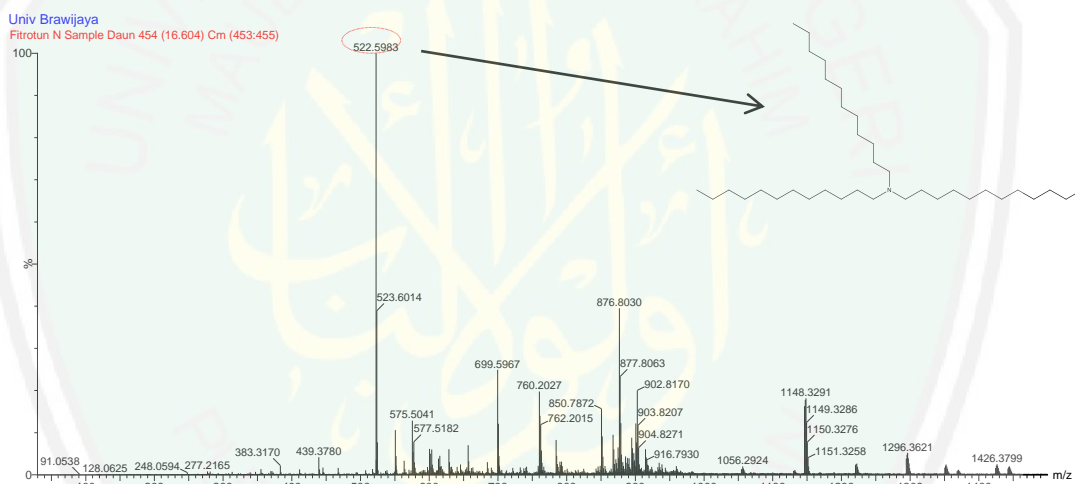
Berdasarkan data metabolit tersebut juga menunjukkan adanya beberapa senyawa mayor, yaitu senyawa yang memiliki persentase luas area lebih banyak dibandingkan dengan persentase luas area senyawa yang lain. Persentase luas area merupakan diperkirakan merupakan banyaknya kadar suatu senyawa dalam sampel. Senyawa mayor pada bagian akar adalah Methyl N-({1-[(2,4-diamino-6-pteridinyl)methyl]-2,3-dihydro-1H-indol-5-yl}carbonyl)-5-(1,3-dioxo-1,3-dihydro-2H-isoindol-2-yl)norvalinate sebesar 5,9490%. Senyawa mayor pada bagian batang adalah N-[(3-{2-[(1S,5S,8aR)-5-(Methoxycarbonyl)-5,8a-dimethyl-2-methylenedecahydro-1-naphthalenyl]ethyl}-2-furyl)methyl]alanine sebanyak 5,5558%. Senyawa mayor pada bagian daun adalah N,N-Didodecyl-1-dodecanamine sebanyak 8,6758%. Senyawa mayor pada bagian biji adalah N,N-Didecyl-2-hydroxypropanamide sebanyak 9,2157%.



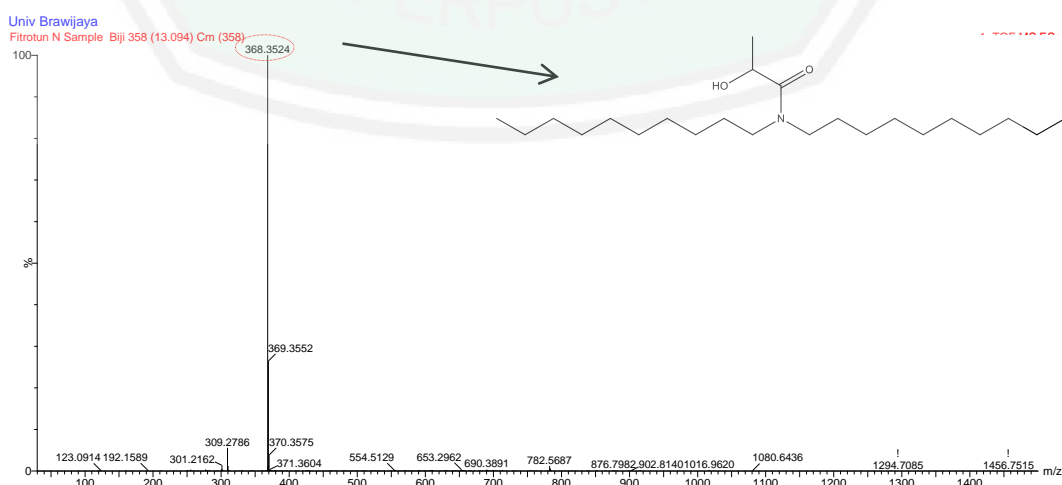
Gambar 5.7 Spektra dan struktur kimia senyawa mayor bagian akar



Gambar 5.8 Spektra dan struktur kimia senyawa mayor bagian batang



Gambar 5.9 Spektra dan struktur kimia senyawa mayor bagian daun



Gambar 5.10 Spektra dan struktur kimia senyawa mayor bagian biji

Berdasarkan data pada tabel 5.3 diketahui bahwa batang memiliki senyawa golongan hemiselulosa salah satunya adalah senyawa N-[(3-{2-[(1S,5S,8aR)-5-(Methoxycarbonyl)-5,8a-dimethyl-2-methylenedecahydro-1-naphthalenyl]ethyl}-2-furyl)methyl]alanine. Senyawa hemiselulosa mampu menghambat *sarcoma* dan *ehrlich asitic carcinoma* pada tikus sehingga senyawa ini sangat baik dimanfaatkan sebagai pengobatan alternatif kanker (al-Fatah, 2011).

Selain itu, ditemukan juga senyawa golongan seskuiterpen pada daun *H. annuus* yaitu senyawa (1R,2S,3E,5S,7S,8S,10R,13S)-7,10,13-Triacetoxoy-2-hydroxy-8,12,15,15-tetramethyl-9-oxotricyclo[9.3.1.1<sup>4,8</sup>]hexadeca-3,11-dien-5-yl (2E)-3-phenylacrylate. Pada biji *H. annuus* megandung senyawa golongan steroid yaitu senyawa 4-Benzyl 1-(6-oxo-7,8,9,10-tetrahydro-6H-benzo[c]chromen-3-yl) N-[[ (2-methyl-2-propanyl)oxy]carbonyl]-L-aspartate. Senyawa ini merupakan senyawa golongan fitosterol yang dapat menghambat pertumbuhan pada beberapa jenis sel tumor spesifik yang dilakukan secara *in vitro*, kemudian juga dapat menurunkan ukuran dan tingkat metastasis tumor yang dilakukan secara *in vivo* (Awad, *et al*, 2007).

## 5.6 Analisis Multivariat *Principal Component Analysis* (PCA)

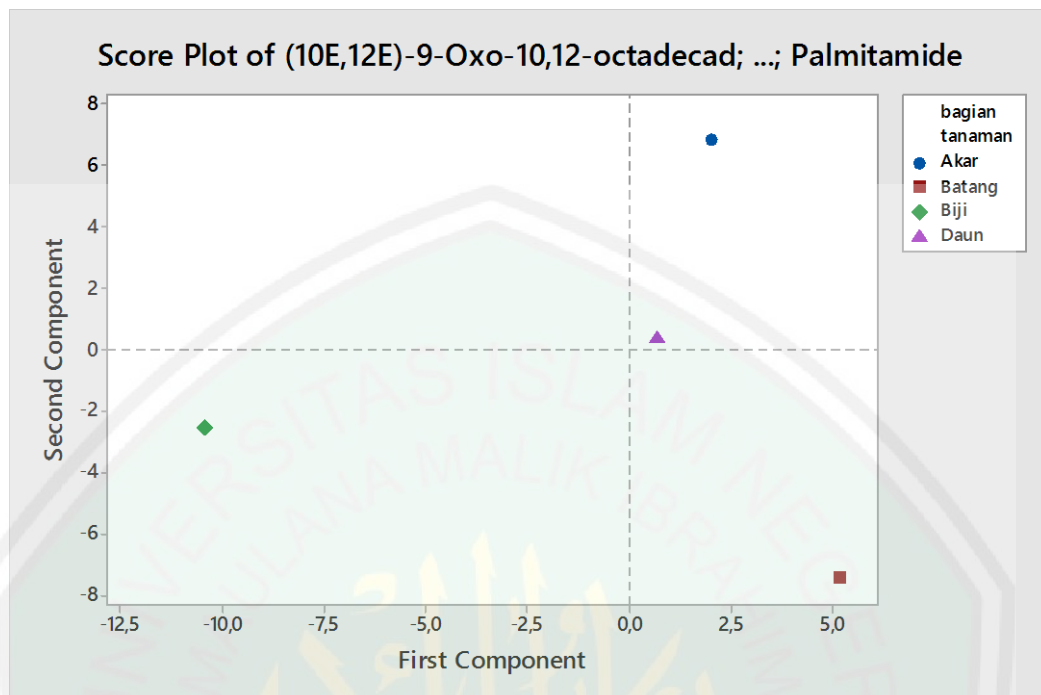
*Principal Component Analysis* (PCA) adalah suatu teknik statistik yang secara linear mengubah bentuk sekumpulan variabel asli menjadi kumpulan variabel yang lebih kecil yang tidak berkorelasi yang dapat mewakili informasi dari kumpulan variabel asli (Dunteman & George, 1989).



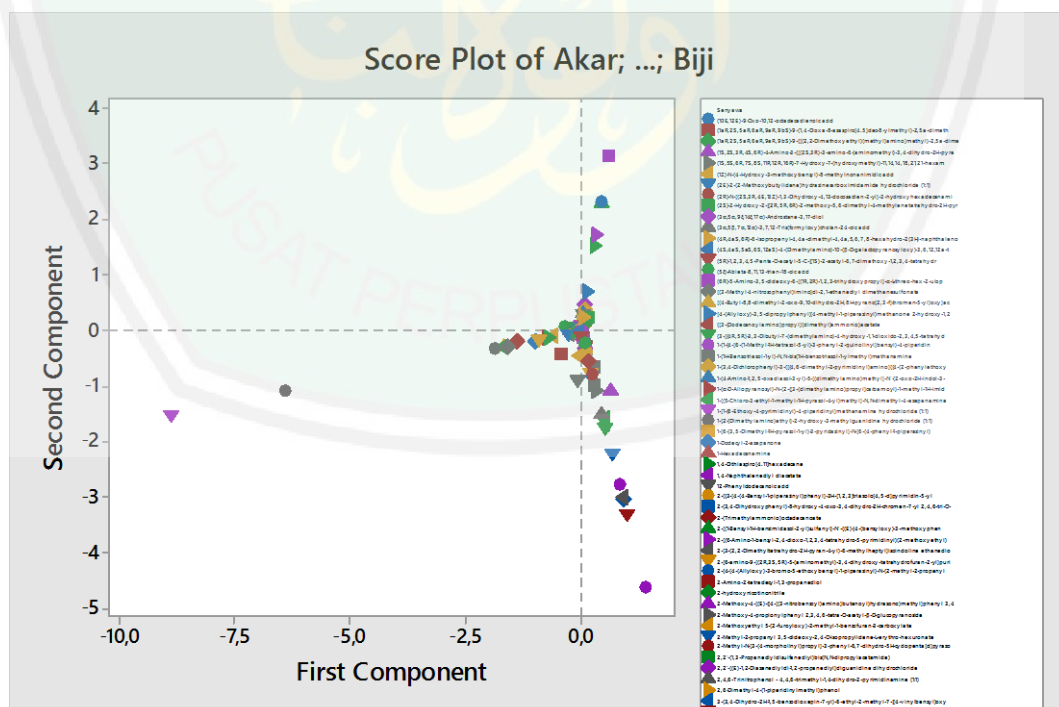
Tujuan PCA adalah untuk menjelaskan bagian dari variasi dalam kumpulan variabel yang diamati atas dasar beberapa dimensi. Dari variabel yang banyak dirubah menjadi sedikit variabel. Tujuan khusus PCA yaitu untuk meringkas pola korelasi antar variabel yang diobservasi, mereduksi sejumlah besar variabel menjadi sejumlah kecil faktor, memberikan sebuah definisi operasional (sebuah persamaan regresi) dimensi pokok penggunaan variabel yang diobservasi serta menguji teori yang mendasarinya (Tabachnick, 2001).

Hasil analisis menggunakan PCA berupa keragaman (*variance*), plot skor (*score plot*), dan plot loading (*loading plot*), yang mana antar ketiga atribut tersebut saling melengkapi. Keragaman memberikan banyak informasi yang dapat digunakan pada PC. Plot loading menyatakan korelasi antara variabel-variabel dalam setiap PC, sedangkan plot skor menggambarkan sifat-sifat sampel. Hasil analisis PCA dikatakan baik apabila dengan jumlah komponen utama yang sedikit mampu menggambarkan total variasi yang besar (Septiani, 2012). Dalam penelitian pemprofilan metabolit, plot skor PCA digunakan untuk melihat efek pengelompokan, sedangkan plot loading dapat digunakan untuk menemukan senyawa penciri (Tabachnick, 2001).

Data yang digunakan pada penelitian adalah nama senyawa dan luas area dalam persen (%) dari keempat bagian organ *H. anuus* L. Hasil analisis PCA berupa *score plot* dan *loading plot* sebagaimana berikut.



Gambar 5.11 *Score Plot* Pengelompokan Senyawa Kimia Bagian Akar, Batang, Daun, dan Biji *H. annuus* L.

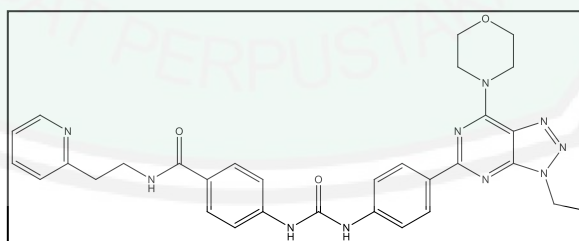


Gambar 5.12 *Score Plot* Pengelompokan Senyawa Kimia Bagian Akar, Batang, Daun, dan Biji *H. annuus* L.



((4-[3-(2-pyridinyl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]-1-piperidinyl)methyl)phenyl][1,2,4]triazolo[3,4-f][1,6]naphthyridine-3(2H)-thione pada bagian akar; senyawa 2-[(1-Benzyl-1H-benzimidazol-2-yl)sulfanyl]-N'-{(E)-[4-(benzyloxy)-3-methoxyphenyl]methylene}acetohydrazide pada bagian akar; senyawa 4-[(4-[3-Ethyl-7-(4-morpholinyl)-3H-[1,2,3]triazolo[4,5-d]pyrimidin-5-yl]phenyl}carbamoyl)amino]-N-[2-(2-pyridinyl)ethyl]benzamide pada bagian biji; senyawa N,N-Didecyl-2-hydroxypropanamide pada bagian biji ; dan senyawa N-[(3-{2-[(1S,5S,8aR)-5-(Methoxycarbonyl)-5,8a-dimethyl-2-methylenedecahydro-1-naphthalenyl]ethyl}-2-furyl)methyl]alanine pada bagian akar. Keenam senyawa ini merupakan senyawa penciri yang membedakan bagian organ yang satu dengan bagian organ yang lainnya pada *H. annuus*.

Salah satu senyawa penciri yang telah disebutkan terdapat senyawa 4-[(4-[3-Ethyl-7-(4-morpholinyl)-3H-[1,2,3]triazolo[4,5-d]pyrimidin-5-yl]phenyl}carbamoyl)amino]-N-[2-(2-pyridinyl)ethyl]benzamide yang merupakan senyawa golongan alkaloid.



Gambar 5.14 Struktur kimia senyawa 4-[(4-[3-Ethyl-7-(4-morpholinyl)-3H-[1,2,3]triazolo[4,5-d]pyrimidin-5-yl]phenyl}carbamoyl)amino]-N-[2-(2-pyridinyl)ethyl]benzamide

## 5.7 Pemanfaatan Tanaman Bunga Matahari (*Helianthus annuus* L.) Sebagai Obat dalam Perspektif Al-Quran

Allah telah memberikan banyak nikmat kepada manusia dimana kenikmatan tersebut dapat dimanfaatkan dalam segala bidang, salah satunya adalah dalam bidang kesehatan. Dewasa ini, banyak masyarakat yang memanfaatkan keanekaragaman flora sebagai pengobatan. Salah satu flora yang dimanfaatkan di bidang pengobatan adalah tanaman bunga matahari (*Helianthus annuus* L.). Penelitian-penelitian yang telah dilakukan sebelumnya diketahui bahwa senyawa kimia dari *H.annuus* mempunyai banyak manfaat di bidang kesehatan yang disajikan pada tabel 5.4 sebagai berikut.

Tabel 5.4 Aktivitas Farmakologi Senyawa pada *Helianthus annuus* L.

No.	Rumus Formula	Nama Senyawa	Aktivitas	Pustaka
1.	C <sub>24</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub> S	4-[(3-(4-Methylphenyl)-4-oxo-3,4-dihydro-2-quinazolinyl)sulfanyl]amino]benzamide	anti-inflamasi, CDPPB antipsikotik, obat anti-obesitas rimonabant, difenamizole, analgesik, betazole, agonis reseptor H <sub>2</sub> dan agen antidepresan fezolamide telah membuktikan potensi farmakologis dari bagian pirazol.	(Karrouchi, <i>et al</i> , 2018)
2.	C <sub>27</sub> H <sub>28</sub> O <sub>14</sub>	2-(3,4-Dihydroxyphenyl)-8-hydroxy-4-oxo-3,4-dihydro-2H-chromen-7-yl 2,4,6-tri-O-acetyl-β-D-glucopyranoside	Antibakteri, antifungal	(Cacic, <i>et al</i> , 2006)
3.	C <sub>17</sub> H <sub>30</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub> SC 12	Methyl (5R)-5-[(1S,2S)-2-chloro-1-({[(2S,4R)-1-chloro-4-ethyl-2-piperidinyl]carbonyl}amino)propyl]-1-thio-β-L-arabinopyranoside	Antibakteri	(Hermawati)
4.	C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> N <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	1-(4-Amino-1,2,5-oxadiazol-3-yl)-5-[(dimethylamino)methyl]-N'-(2-oxo-2H-indol-3-yl)-1H-1,2,3-triazole-4-carbohydrazide	Antibakteri	(Harun & Wahida, 2017)
5.	C <sub>21</sub> H <sub>37</sub> NO <sub>9</sub>	(2S)-2-Hydroxy-2-[(2R,5R,6R)-2-methoxy-5,6-dimethyl-4-methylenetetrahydro-2H-pyran-	Antifungi	(Anggreinea, <i>et al</i> , 2015)



		2-yl]-N-[(2R,3R,4S,5R,6R)-3,4,5-trimethoxy-6-(methoxymethyl)tetrahydro-2H-pyran-2-yl]acetamide		
--	--	--	--	--

Allah berfirman dalam surah Al-An'am ayat 141 sebagaimana berikut.

﴿وَهُوَ الَّذِي أَنْشَأَ جَنَّاتٍ مَعْرُوشَاتٍ وَغَيْرَ مَعْرُوشَاتٍ وَالنَّخْلَ وَالزَّرْعَ مُخْتَلِفًا أَكْلُهُ  
وَالزَّيْتُونَ وَالرُّمَانَ مُتَشَابِهًا وَغَيْرَ مُتَشَابِهٍ ۚ كُلُوا مِنْ ثَمَرِهِ إِذَا أَثْمَرَ وَآتُوا حَقَّهُ يَوْمَ حَصَادِهِ ۚ وَلَا  
تُسْرِفُوا ۚ إِنَّهُ لَا يُحِبُّ الْمُسْرِفِينَ﴾

Artinya: “Dan Dialah yang menjadikan kebun-kebon yang berjunjung dan yang tidak berjunjung, pohon kurma, tanam-tanaman yang bermacam-macam buahnya, zaitun dan delima yang serupa (bentuk dan warnanya) dan tidak sama (rasanya). Makanlah dari buahnya (yang bermacam-macam itu) bila dia berbuah, dan tunaikanlah haknya di hari memetik hasilnya (dengan disedekahkan pada fakir miskin); dan janganlah kamu berlebih-lebihan. Sesungguhnya Allah tidak menyukai orang yang berlebih-lebihan.”

Menurut tafsir Quraish Shihab ayat tersebut menjelaskan bahwa hanya Allahlah yang menciptakan berbagai kebun. Ada yang ditanam dan disangghatiang, ada pula yang tidak. Allah menciptakan pula pohon korma dan tanaman-tanaman lain yang menghasilkan buah-buahan dengan berbagai warna, rasa, bentuk dan aroma yang berbeda-beda. Juga, Allah menciptakan buah zaitun dan delima yang serupa dalam beberapa segi, tetapi berbeda dari beberapa segi lain. Padahal, itu semua tumbuh di atas tanah yang sama dan disiram dengan air yang sama pula. Makanlah buahnya yang baik dan keluarkan zakatnya saat buah-buah itu masak. Namun, janganlah kalian berlebih-lebihan dalam memakan buah-buahan itu, sebab hal itu akan membahayakan diri sendiri dan akan mengurangi hak orang miskin. Allah tidak akan memberi perkenan atas perbuatan orang-orang yang berlebih-lebihan (Shihab, 2010).

Pada ayat tersebut terdapat kata *كُلُوا مِنْ ثَمَرِهِ إِذَا أَثْمَرَ* yang bermakna bahwasanya kita dianjurkan untuk mengonsumsi buah-buahan yang bermacam-macam yang telah diciptakan oleh Allah SWT dimana pada buah-buahan tersebut mempunyai banyak khasiat (al-Fatah, 2011). Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan sebelumnya maka dapat diketahui bahwasanya tanaman bunga matahari (*Helianthus annuus* L.) merupakan salah satu tanaman yang sangat bermanfaat yang dapat dikonsumsi untuk mengatasi beberapa gangguan karena senyawa kimia yang terkandung di dalamnya mempunyai efek farmakologis pada beberapa gangguan tersebut.

## BAB VI

### PENUTUP

#### 6.1 Simpulan

1. Terdapat perbedaan profil metabolit bagian akar, batang, daun, dan biji *Helianthus annuus* L. dimana ditemukan 38 senyawa pada bagian akar; 38 senyawa pada batang; 37 senyawa pada daun; dan 29 senyawa pada biji.
2. Terdapat 6 senyawa penciri pada *H. annuus*. yaitu senyawa Methyl N-({1-[(2,4-diamino-6-pteridinyl)methyl]-2,3-dihydro-1H-indol-5-yl}carbonyl)-5-(1,3-dioxo-1,3-dihydro-2H-isoindol-2-yl) norvalinate pada bagian akar; senyawa 9-Phenyl-8-[4-({4-[3-(2-pyridinyl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]-1-piperidinyl)methyl}phenyl)[1,2,4]triazolo[3,4-f][1,6]naphthyridine-3(2H)-thione pada bagian akar; senyawa 2-[(1-Benzyl-1H-benzimidazol-2-yl)sulfanyl]-N'-{(E)-[4-(benzyloxy)-3-methoxyphenyl]methylene}acetohydrazide pada bagian akar; senyawa 4-[(4-[3-Ethyl-7-(4-morpholinyl)-3H-[1,2,3]triazolo[4,5-d]pyrimidin-5-yl]phenyl}carbonyl)amino]-N-[2-(2-pyridinyl)ethyl]benzamide pada bagian biji; senyawa N,N-Didecyl-2-hydroxypropanamide pada bagian biji ; dan senyawa N-[(3-{2-[(1S,5S,8aR)-5-(Methoxycarbonyl)-5,8a-dimethyl-2-methylenedecahydro-1-naphthalenyl]ethyl}-2-furyl)methyl]alanine pada bagian akar.
3. Senyawa mayor pada bagian akar adalah Methyl N-({1-[(2,4-diamino-6-pteridinyl)methyl]-2,3-dihydro-1H-indol-5-yl}carbonyl)-5-(1,3-dioxo-1,3-

dihydro-2H-isoindol-2-yl)norvalinate sebesar 5,9490%. Senyawa mayor pada bagian batang adalah N-[(3-{2-[(1S,5S,8aR)-5-(Methoxycarbonyl)-5,8a-dimethyl-2-methylenedecahydro-1-naphthalenyl]ethyl}-2-furyl)methyl]alanine sebanyak 5,5558%. Senyawa mayor pada bagian daun adalah N,N-Didodecyl-1-dodecanamine sebanyak 8,6758%. Senyawa mayor pada bagian biji adalah N,N-Didecyl-2-hydroxypropanamide sebanyak 9,2157%.

## 6.2 Saran

1. Pelarut yang digunakan dapat diganti dari etanol 96% teknis menjadi etanol 96% p.a (pro analisis) sehingga hasil lebih maksimal karena pengotor yang dapat merusak sampel lebih sedikit daripada menggunakan etanol 96% teknis.
2. Sampel yang diperoleh kurang banyak sehingga pengukuran kadar air (*Moisture Content*) tidak dapat direplikasi.
3. Perlu dilakukan penelitian lanjutan untuk mengetahui efek farmakologis dan toksisitas dari senyawa kimia yang terdapat pada *Helianthus annuus* L. sehingga dapat dimanfaatkan sebagai alternatif pengobatan dalam dunia medis.

## DAFTAR PUSTAKA

- A. Gunawan, A. 2000. *Tata Surya dan Alam Semesta*. Yogyakarta: Kanisius.
- al-Fatah, M. H. 2011. *Mukjizat Pengobatan Herbal dalam Quran*. Jakarta: Mirqat.
- Anggreinea, H., Heryanib, H., & Susic. 2015. Potensi Buah Tanaman Lengkuas Putih Sebagai Bahan Obat Topikal Terhadap Penyakit Panu. *Prosing Seminar Nasional Korum Komunikasi Perguruan Tinggi Pertanian Indonesia*.
- Anissa. 2012. *Kajian Metabolomik Rimpang Kunyit Menggunakan Kromatografi Cair-Spektroskopi Massa (Skripsi)*. Bogor: Departemen Kimia Institut Pertanian Bogor (IPB).
- Anonim. 2018, Januari 3. *bobo.grid*. Retrieved from Tanaman Bunga Pengusir Hama Alami: [bobo.grid.id/Sains/Iptek/Tanaman-Bunga-Pengusir-Hama-Alami](http://bobo.grid.id/Sains/Iptek/Tanaman-Bunga-Pengusir-Hama-Alami)
- Arifianti, L., Oktarini, R., & Kusumawati, I. 2014. Pengaruh Jenis Pelarut Pengeskraksi Terhadap Kadar Sinestesin Dalam Ekstrak Daun *Ortosiphon stamineus* Benth. *E-Journal Planta Husada*, 2, 1-4.
- Atjung. 1981. *Tanaman Yang Menghasilkan Minyak, Tepung Gula*. Jakarta: Yasaguna.
- Awad, A., Chinnam, M., Fink, C., & Bradford, P. 2007. Beta-Sitosterol Activates Fas Signaling in Human Breast Cancer Cells. *Phytomedicine*, 14(11), 747-54.
- Barlow, D., Buriani, A., Ehrman, T., Bosisio, E., Eberini., & P.J., H. 2012. In-silico Studies in Chinese Gerbaal Medicines Research: Evaluation of In-silico Methodologies and Phytochemical Data Sources, and Review of Research to Date. *Journal of Ethnopharmacology*, 256-534.
- Brady, J. 1999. *Kimia Universitas Asas dan Struktur*. Bandung: Binarupa Aksara.
- Brenton, A., & Godfrey, A. 2010. Accurate Mass Measurement Terminology and Treatment of Data. *Journal of American Society for Mass Spectrometry*, 1821-1835.
- Bustanussalam. 2016. Pemanfaatan Obat Tradisional (Herbal Sebagai Obat Alternatif. *BioTrends Vol.7*, 20-25.
- Cacic, M., Trkovnik, M., Cacic, F., & Has-Schon, E. 2006. Synthesis and Antimicrobial Activity of Some Derivates of (7-Hydroxy-2-Oxo-2H-Chromen-4-yl) acetic acid Hydrazide. *Molecules*, 134-147.



- Ceccarini. 2004. Essential Oil Composition of *Helianthus annuus* L. Leaves and Heads of Two Cultivated Hybrids "Carlos" and Florom 350". *Industrial Crops and Products*, 13-17.
- Chawla, G. d. 2016. Principle, Instrumentation and Application of UPLC. A Novel Technique of Liquid Chromatography. *Chemistry Journal*, 1-16.
- Chawla, G., & Ranjan, C. 2016. Principle, Instrumentation and Application of UPLC. A Novel Technique of Liquid Chromatography. *Chemistry Journal*, 1-16.
- Churchwell, M., Twaddle, N., Meeker, L., & Doerge, J. 2005. Improving LC-MS Sensitivity Through Increases in Chromatographic Performances: Comparisons of UPLC-ES/MS ti HPLC-ES/MS/MS. *Journal of Chromatography B* 825(2), 134-143.
- Clarke, C., & Haselden, J. 2008. Metabolic Profiling as a Tool Understanding Mechanism of Toxicity. *Toxicology Phatology*, 140-148.
- Cseke, L., Kirakosyan, A., Kaufman, P., Warber, S., Duke, J., & Brielman, H. 2006. *Natural Products from Plants*. London: CRC Press.
- Depkes. 2011, November 02. *Integrasi Pengobatan Tradisional Dalam Sistem Kesehatan Nasional*. Retrieved from Kementerian Kesehatan Republik Indonesia: [www.depkes.go.id](http://www.depkes.go.id)
- Dettner, K., Aronov, P., & Hammock, B. 2007. Mass Spectrometry-Based Metabolomics. *Mass Spectrom, NCBI*, 51-78.
- Distantina, S., Fadila, Danarto, Y., Wiratni, & Fahrurrozi, M. 2009. Pengaruh Kondisi Proses pada Pengolahan *Euchema cottonii* terhadap Randemen dan Sifat Gel Karagenan. *Ekulibrium*, 8, 35-40.
- Doig, M. 2000. Fundamental Aspect of Mass Spectrometry. In R. Venn, *Principles and Practice of Bioanalysis* (pp. 211-239). New York: Taylor & Francis Inc.
- Dunteman, & George, H. 1989. *Principal Component Analysis*. Newbury Park London (Research Triangle Institute): Sage Publication.
- Dwivedi, A., & Sharma, G. 2014. A Review on Heliotropism Plant: *Helianthus annuus* L. *The Journal of Phytopharmacological*, 149-155.
- Ellis, D., Dunn, W., Griffin, J., Allwood, J., & Goodacre, R. 2007. Metabolic Fingerprinting as A Diagnostic Tool. *Pharmacogenomic Review*, 1243-1266.
- Falleh, H., Ksouri, R., Lucchessi, M.-E., Abdelly, C., & Magne, C. 2012. Ultrasound-Assisted Extraction: Effect of Extraction Time and Solvent Power on the Levels of Polyphenols and Antioxidant Activity of

- Mesembryanthemum edule L. Aizoaceae Shoots. *Tropical Journal of Pharmaceutical Research* , 243-249.
- Farag, M., Rasheed, D., Kropf, M., & Heiss, A. 2016. Metabolite Profiling in Trigonella Seeds Via UPLC-MS and GC-MS Analyzed Using Multivariate Data Analysis. *Journal of Anal Bioanal Chem. Springer*, DOI:10.1007/s00216-016-9910-4.
- Farag, M., Weigned, M., Luebert, F., Brokamp, G., & Wassjohann, L. 2013. Phytochemical, Phylogenetic, and Anti-inflammatory evaluation of 43 Urtica accessions (stinging nettle) Based on OPLC-Q-TOF-MS Metabolomic Profiles. *Phytochemistry*, 170-183.
- Fiehn, O., Kopka, J., Dormann, P., Altmann, T., Trethewey, R., & Willmitzer, L. 2000. Metabolite Profiling for Plant Functional Genomics. *Nat. Biotech*, 1157-1161.
- Ha, G.-S., & Kim, J.-H. 2016, Oktober. Kinetic and Thermodynamic Characteristics of Ultrasound-Assisted Extraction for Recovery of Paclitaxel from Biomass. *Process Biochemistry*, 51(10), 1664-1673.
- Halvorson, W. 2003. Helianthus annus L. . *U.S. Geological Survey/Southwest Biological Science Center*, 1-26.
- Haniah, Hayati, E., Muti'ah, R., & Abtokhi, A. 2012. Identifikasi Ekstrak Metanol Daun Bunga Matahari (Helianthus annus L.). *Skripsi*.
- Harborne, J. 1987. *Metode Fitokimia, Penuntun Cara Modern Menganalisis Tumbuhan (Terjemah)*. Bandung: Institut Teknologi Bandung .
- Harun, & Wahida, F. 2017. Synthesis Characterization and Antibacterial Activity oh Schiff Bases . *Journal of Applied Chemistry*.
- Hermawati, L. (n.d.). Uji Aktivitas Antibakteri Isolat Kapang Endofit dari Daun Tanaman Paku Daun Kepala Tupai Terhadap E.coli, S. aureus, S. thyphi dan B. subtilis.
- Imani, A. 2005. *Tafsir Nurul Qur'an*. Jakarta: Penerbit Al-Huda.
- Jazuli, D. A. 2006. *Kehidupan Dalam Pandangan Al-Quran*. Jakarta: Gema Insani Press.
- Kamal, J. 2011. Quantification of Alkaloids, Phenols, and Flavonoids in Sunflower (Helianthus annuus L.). *African Journal of Biotechnology*, 10(16), 3149-3151.
- Karrouchi, K., Radi, S., Ramli, Y., & Taoufik, J. 2018. Synthesis and Pharmacological Activities of Pyrazole Derivates: Review. *Molecules*, 134.

- Keil, F. 2007. Modelling of Process Intensification . *AIDIC Conference Series* , 1-8.
- Long, R. B. 1995. *Separation Processes in Waste Minimization*. New York: Marcel Dekker Inc.
- Marques, S., Peixoto, C., Messias, J., Albuquerque, A., & Silva, V. 2004. *The Effect of Topical Application of Sunflower-seed Oil On Open Wound Healing in Lambs*. Brazil: Department of Animal Morphology and Physiology, Federal Rural University of Pernambuco.
- Mason, T. (1990, April). *Introduction, Chemistry with Ultrasound* Vol. 2. London: Elsevier Applied Science.
- Menkes. 2004. *Keputusan Menteri Kesehatan Nomor 13/Menkes/SK/II/2004 tentang Sistem Kesehatan Nasional*. Jakarta.
- Meyer, B., Ferrigni, N., Putna, J., Jacobsen, D., Nichols, & McLaughlin, J. 1982. Brine Shrimp: A Convenient General Bioassay for Active Plant Constituent. *Planta Medica*, 31-34.
- Mulja, M., & Suharman. 1995. *Analisis Instrumental*. Surabaya: Airlangga University Press.
- Mutiah, R., Hayati, E. K., & Triastutik, Y. 2013. Pemisahan dan Identifikasi Ekstrak Kasar Seskuitrpen Daun Bunga Matahari (*Helianthus annuus* L.) dengan Kromatografi Lapis Tipis. *Alchemy*, 2(3), 190-194.
- O'Gorman, A. 2010. *Metabolic Profiling and Fingerprinting for the Detection and Discrimination of Mechanical Damage in Mushroom (Agarica bisporus) during Storage [Thesis]*. Dublin, Ireland: Dublin Institute of Technology.
- Pramono, S. 2006, September 12-18. Penanganan pascapanen dan Pengaruhnya Terhadap Efek Terapi Obat Alami di Dalam Seminar Nasional Tumbuhan Obat Indonesia. *Prosiding Seminar Nasional Tumbuhan Obat Indonesia* , XXVIII, 1-6.
- Reo, A. R., Berhimon, S., & Montolalu, R. 2017, Januari. Metabolit Sekunder Gorgonia (*Paramuricea clavata*). *Jurnal Ilmiah Platax*, 5(1), 42-48.
- Rice, E. 1974. *Allelopathy*. New York: Academic Press.
- Robertson, D., Reily, M., Sigler, R., Wells, D., Paterson, A., & Braden, T. 2000. Metabonomics Evaluation of Nuclear Magnetic Resonance (NMR) and Pattern Recognition Technology for Rapid In Vivo Screening of Liver and Kidney Toxicants. *Toxicology Science*, 326-337.
- Rohman, A. 2014. *Statistika dan Kemometrika Dasar Dalam Analisis Farmasi*. Yogyakarta: Pustaka Pelajar.

- Rohman, I. G. 2010. *Kimia Farmasi Analisis Cetakan ke-7*. Yogyakarta: Pustaka Pelajar.
- Saifudin, A. 2014. *Senyawa Alam Metabolit Sekunder: Teori, Konsep, dan Teknik Pemurnian*. Yogyakarta: Deepublish.
- Sari, G. 2011. *Studi Budidaya dan Pengaruh Lama Pengeringan Terhadap Jahe Merah (Zingiber officinale Rosc.)*. Riau: Fakultas Pertanian dan Peternakan. Universitas Islam Negeri Sultan Syarif Kasim.
- Septiani, R. 2012. *Pemrofilan Metabolit Rimpang Temulawak Menggunakan Kromatografi Gas-Spektroskopi Massa [Skripsi]*. Bogor: Departemen Kimia, IPB.
- Shihab, M. Q. 2010. *Al-Quran dan Maknanya*. Tangerang: Lentera Hati.
- Simpson, B., & Ogarzaly, M. 1986. *Economic Botany: Plants in Our World International Edition*. New York: Mc Grow Hill Company.
- Spring, O., Albert, K., & Gradmann, W. 1982. Three Biologically Active Heliangolides From Helianthus annuus. *Phytochemistry*, 2551-2553.
- Subashini, R. R. 2012. Phytochemical Screening, Antimicrobial Activity and In Vitro Antioxidant Investigation of Methanolic Extract of Seeds from Helianthus annuus L. *Chemical Science Review and Letter*, 30-34.
- Subashini, R., & Rakshita, S. 2012. Phytochemical Screening, Antimicrobial Activity and In Vitro Antioxidant Investigations of Methanolic Extract of Seeds from Helianthus annuus L. *Chemical Science Review and Letters*, 30-34.
- Sugiarti, L., & Setyawati, T. 2017. Karakteristik Mutu Simplisia Rimpang Jahe di PJ. Cap Klanceng Kudus. *Jurnal Keperawatan dan Kesehatan Masyarakat*, 43-52.
- Supardi, S. 2009. The Hierarchy of Resort to Medical Care Among The Serpong Villagers in West Java. *Seminar Peranan Universitas dalam Pengembangan Ilmu Pengetahuan dan Teknologi Untuk Menunjang Sistem Kesehatan Nasional*, (p. 37(2): 92).
- Supriyatna. 2015. *Fitoterapi Sistem Organ: Pandangan Dunia Barat terhadap Obat Herbal Global*. Yogyakarta: Deepublish.
- Susanti, & Bachmid, F. 2016. Perbandingan Metode Ekstraksi Maserasi dan Refluks Terhadap Kadar Fenolik dari Ekstrak Tongkol Jagung (*Zea mays* L.). *Konversi*, 87-93.
- Suslick, K. 1988. *Ultrasounds: Its Chemical, Physical and Biological Effects*. New York: VHC Publishers.

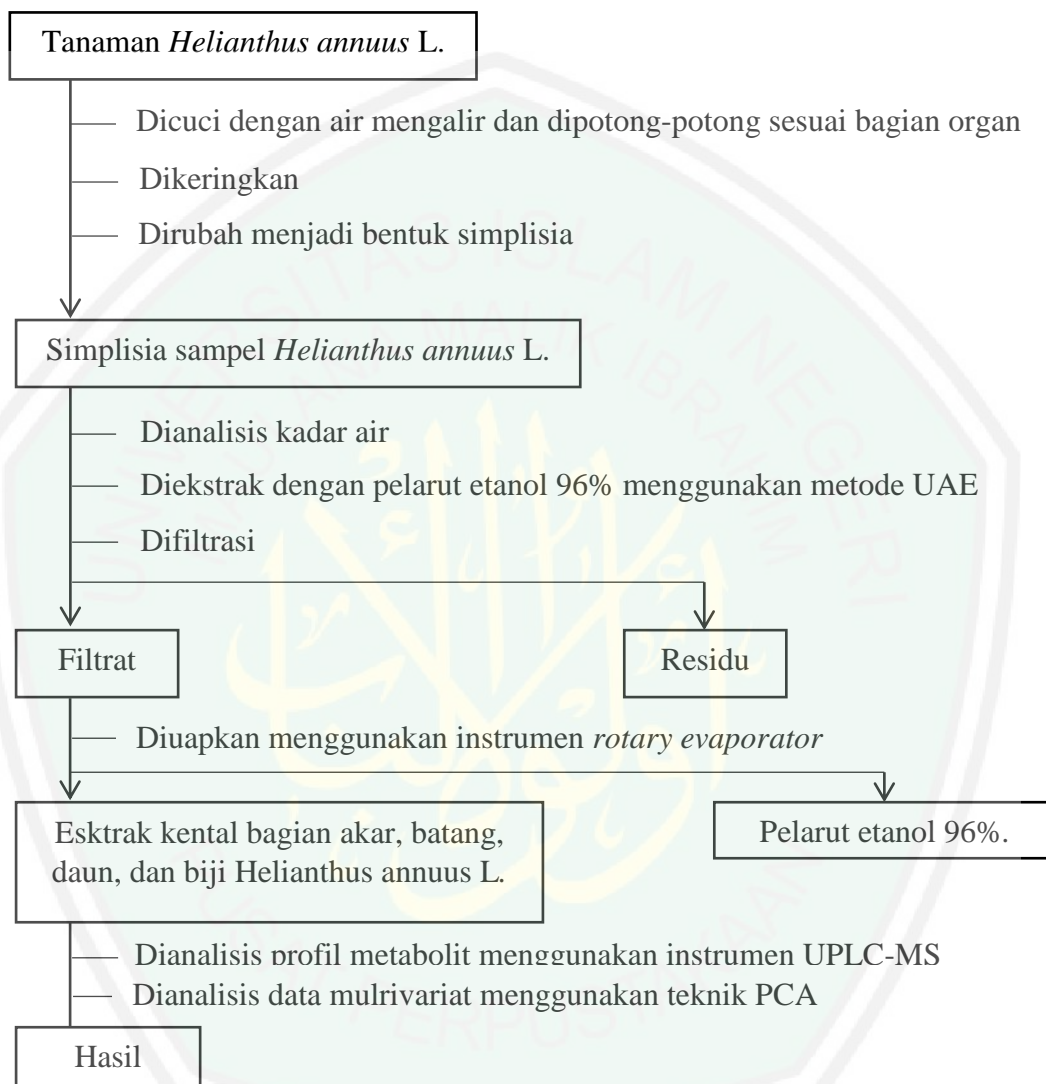


- Tabachnick. 2001. *Using Multivariate Statistics, 4th ed.* Boston: Allyn & Bacon.
- Velasco, J., & Dobarganes, C. 2002. Oxidative Stability of Virgin Olive Oil. *European Journal of Lipid Science and Technology*, 661-676.
- Verma, N., & Shukla, S. 2015. Impact of Various Factors Responsible for Fluctuations in Plant Secondary Metabolite. *J Appl Res on Med Ar Plants*, 105-113.
- Waller, G. d. 1987. *The Role of Alkaloids in Plants. In: Alkaloids Biology and Metabolism in Plants.* New York: Plenum Press.
- Waters. 2018. Waters. Retrieved Mei 23, 2018, from The Science of What's Possible : [http://www.waters.com/waters/en\\_ID/UPLC---Ultra-Performance-Liquid-Chromatography-Beginner%27s-Guide/nav.htm?cid=134803622&locale=en\\_ID](http://www.waters.com/waters/en_ID/UPLC---Ultra-Performance-Liquid-Chromatography-Beginner%27s-Guide/nav.htm?cid=134803622&locale=en_ID)
- Wijesekera, R. 1991. *The Medicinal Plant Industry.* Washington DC: CRC Press.
- Wolfender, J., Marti, G., Thomas, A., & Bertrand, S. 2015. Current Approach and Challenges for the Metabolite Profiling of Complex Natural Extract. *Journal Chromatograph*, 1-29.
- Zhao, Y., & Lin, R. 2014. UPLC-MS Application in Disease Biomarker Discovery. The Discovery in Proteomics to Metabolics. *Chemico-Biological Interactions, Elsevier*, 7-16.



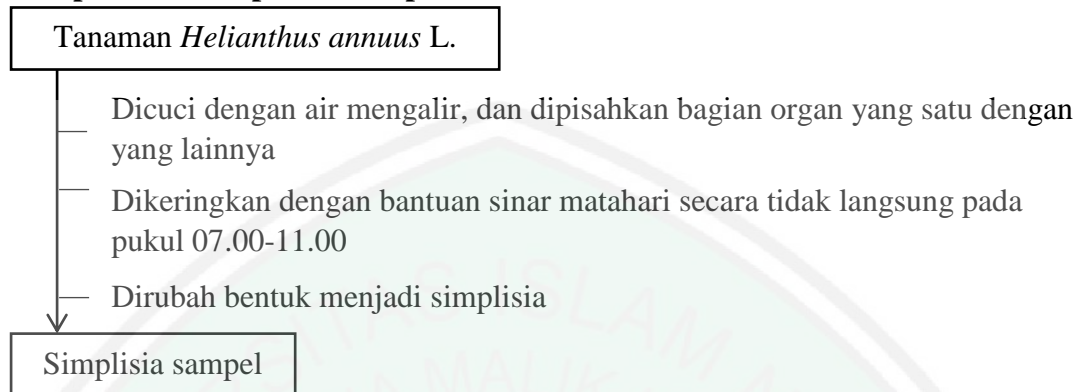
## LAMPIRAN

## Lampiran 1. Diagram Alir Penelitian

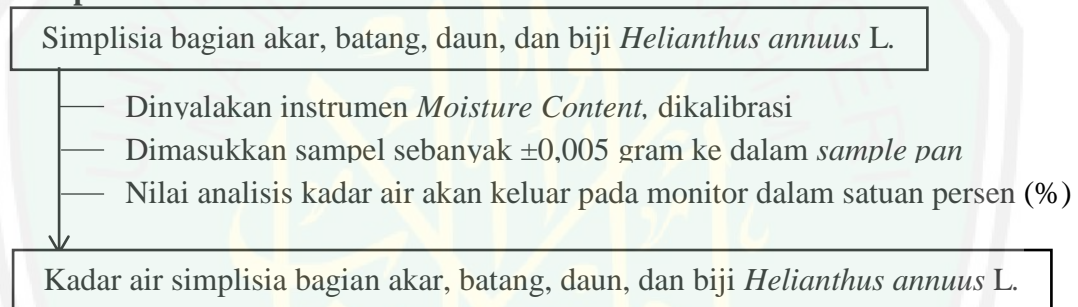


## Lampiran 2. Skema Kerja

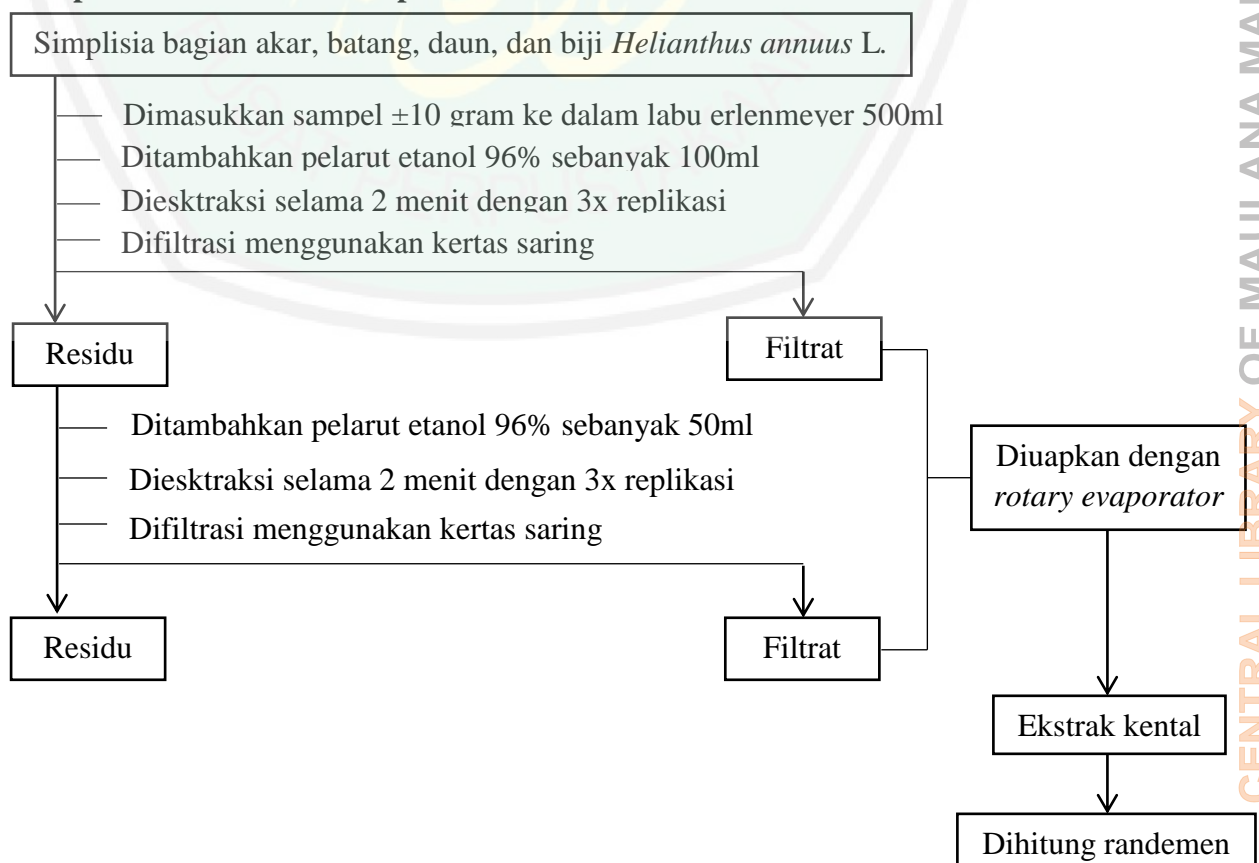
### Lampiran 2.1 Preparasi Sampel



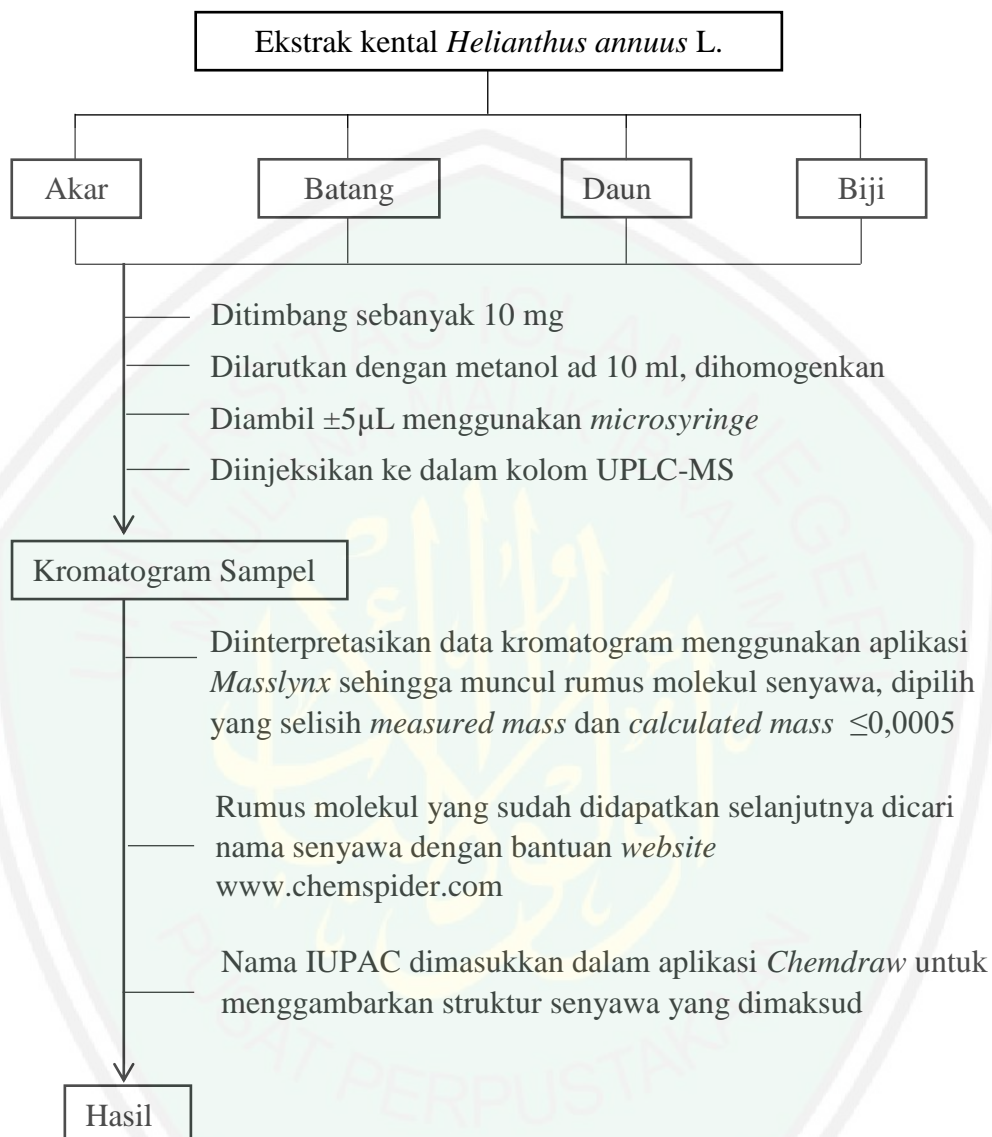
### Lampiran 2.2 Analisis Kadar Air



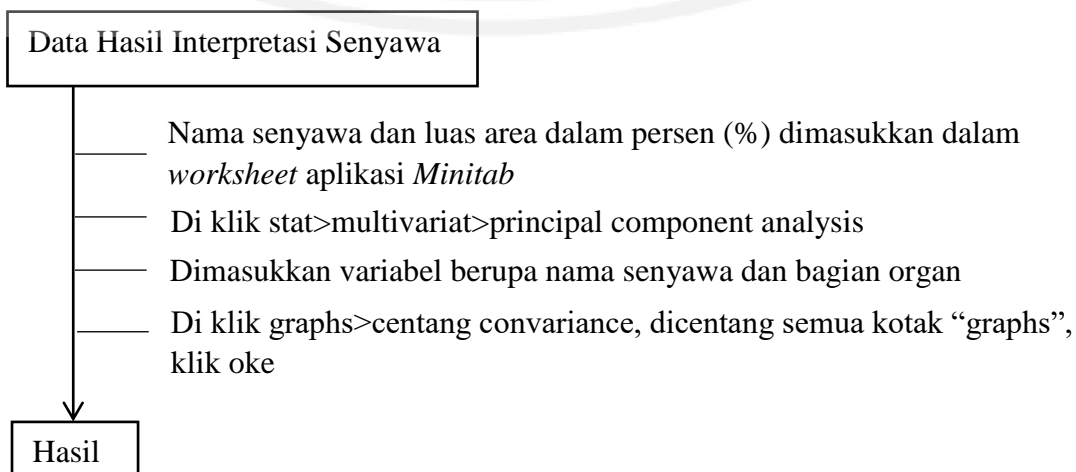
### Lampiran 2.3 Ekstraksi Simplisia *Helianthus annuus* L.



#### Lampiran 2.4 Metabolite Profiling Menggunakan UPLC-MS



#### Lampiran 2.5 Analisis Data Multivariat Teknik PCA



### Lampiran 3

#### Lampiran 3.1 Spektra Hasil Interpretasi Ekstrak Akar *Helianthus annuus* L.

No	Senyawa	Spektra
1.	[(3-Methyl-4-nitrosophenyl)imin o]di-2,1-ethanediyl dimethanesulfonate	<p>Univ Brawijaya Fitur N Sample Akar 19 (0.888) Cm (19.20)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.0365</p>
2.	2-hydroxynicotinonit rile	<p>Univ Brawijaya Fitur N Sample Akar 32 (1.169) Cm (31.32)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.1665</p>
3.	4-[(3-(4-Methylphenyl)-4-oxo-3,4-dihydro-2-quinazolinyl)sulfan yl}acetyl)amino]benzamide	<p>Univ Brawijaya Fitur N Sample Akar 39 (1.429) Cm (38.38)</p> <p>1: TOF MS ES+ 4.7265</p>
4.	2-hydroxynicotinonit rile	<p>Univ Brawijaya Fitur N Sample Akar 47 (1.718) Cm (47.48)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.2365</p>
5.	2-hydroxynicotinonit rile	<p>Univ Brawijaya Fitur N Sample Akar 52 (1.901) Cm (51.52)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.2765</p>

6.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Findon N Sample Akar 67 (2.448) Cm (66.68)</p> <p>1: TOF MS ES+ 4.37e5</p>
7.	4-Heptylphenyl hexopyranoside - chloroform (1:1)	<p>Univ Brawijaya Findon N Sample Akar 80 (2.918) Cm (79.80)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.12e6</p>
8.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Findon N Sample Akar 102 (3.730) Cm (99.102)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.25e6</p>
9.	4-{Bis[4-(1- pyrrolidinyl)phenyl ]methyl}-N,N- dimethyl-1- naphthalenamine	<p>Univ Brawijaya Findon N Sample Akar 104 (3.799) Cm (104.105)</p> <p>1: TOF MS ES+ 9.60e5</p>
10.	4-Amino-N <sup>3</sup> ,N <sup>5</sup> - dicyclohexyl-N <sup>5</sup> - {1-[(3- methylbutyl)amin o]-1-oxo-2- pentanyl}-1,2- thiazole-3,5- dicarboxamide	<p>Univ Brawijaya Findon N Sample Akar 108 (3.947) Cm (108)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.61e5</p>



11.	2-{4-[4-(Allyloxy)-3-bromo-5-ethoxybenzyl]-1-piperazinyl}-N-(2-methyl-2-propanyl)acetamide ethanedioate (1:1)	<p>Univ Brawijaya Filter: N Sample Akar 111 (4.081) Cm (111:112)</p> <p>1: TOF MS ES+ 4.87e5</p>
12.	3-Bromo-5-phenyl-N-{[6-(1-pyrrolidinyl)-3-pyridinyl]methyl}piazolo[1,5-a]pyrimidin-7-amine	<p>Univ Brawijaya Filter: N Sample Akar 114 (4.164) Cm (114)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.35e5</p>
13.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Filter: N Sample Akar 112 (4.347) Cm (119)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.35e5</p>
14.	1-(3,4-Dichlorophenyl)-3-([(4,6-dimethyl-2-pyrimidinyl)amino]{[4-(2-phenylethoxy)phenyl]amino}methylene)urea	<p>Univ Brawijaya Filter: N Sample Akar 122 (4.462) Cm (122:123)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.35e5</p>
15.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Filter: N Sample Akar 127 (4.645) Cm (127:128)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.71e5</p>



21.	Methyl (1S,4aS,5R,7S,7aS)-1-( $\beta$ -D-glucopyranosyloxy)-7-hydroxy-5-{[(2E)-3-(4-hydroxyphenyl)-2-propenoyl]oxy}-7-methyl-1,4a,5,6,7,7a-hexahydrocyclopenta[c]pyran-4-carboxylate	<p>Univ Brawijaya Fitron N Sample Akar 161 (5.891) Cm (161)</p> <p>1: TOF MS ES+ 7.89e5</p>
22.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fitron N Sample Akar 164 (5.994) Cm (164)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.36e5</p>
23.	2-Methoxy-4-[(E)-({4-[(3-nitrobenzoyl)amino]butanoyl}hydrazono)methyl]phenyl 3,4,5-trimethoxybenzoate	<p>Univ Brawijaya Fitron N Sample Akar 169 (6.177) Cm (169)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.24e5</p>
24.	Ethyl (2Z)-1-(2-methoxyethyl)-5-oxo-2-[(3,4,5-trimethoxybenzoyl)imino]-1,5-dihydro-2H-dipyrido[1,2-a:2',3'-d]pyrimidine-3-carboxylate	<p>Univ Brawijaya Fitron N Sample Akar 177 (6.474) Cm (176-177)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.35e5</p>

25.	2-[(1-Benzyl-1H-benzimidazol-2-yl)sulfanyl]-N'-{(E)-[4-(benzyloxy)-3-methoxyphenyl]methylene}acetohydrazide	<p>Univ Brawijaya Firdaus N Sample Akar 182 (6.657) Cm (181:182)</p> <p>1: TOF MS ES+ 7.22e6</p>
26.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Firdaus N Sample Akar 193 (7.057) Cm (193)</p> <p>1: TOF MS ES+ 4.86e6</p>
27.	9-Phenyl-8-[4-({4-[3-(2-pyridinyl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]-1-piperidinyl}methyl)phenyl][1,2,4]triazolo[3,4-f][1,6]naphthyridine-3(2H)-thione	<p>Univ Brawijaya Firdaus N Sample Akar 193 (7.206) Cm (193:197)</p> <p>1: TOF MS ES+ 6.71e6</p>
28.	Methyl N-({1-[(2,4-diamino-6-pteridinyl)methyl]-2,3-dihydro-1H-indol-5-yl}carbonyl)-5-(1,3-dioxo-1,3-dihydro-2H-isoindol-2-yl)norvalinate	<p>Univ Brawijaya Firdaus N Sample Akar 201 (7.354) Cm (201:202)</p> <p>1: TOF MS ES+ 8.56e6</p>
29.	1,4-Dithiaspiro[4.11]hexadecane	<p>Univ Brawijaya Firdaus N Sample Akar 208 (7.606) Cm (208:209)</p> <p>1: TOF MS ES+ 5.10e6</p>

30.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fitur N Sample Akar 220 (8.040) Cm (220)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.03e6</p>
31.	N-(4-{[(6S)-2-Methyl-4-oxo-4,6,7,8-tetrahydro-1H-cyclopenta[g]quinazolin-6-yl](2-propyn-1-yl)amino}benzoyl)-L-γ-glutamyl-D-glutamic acid	<p>Univ Brawijaya Fitur N Sample Akar 224 (8.189) Cm (224)</p> <p>1: TOF MS ES+ 7.7e6</p>
32.	1,4-Naphthalenediyl diacetate	<p>Univ Brawijaya Fitur N Sample Akar 228 (8.337) Cm (228)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.04e6</p>
33.	2-({3-[4-(4-Benzyl-1-piperazinyl)phenyl]-3H-[1,2,3]triazolo[4,5-d]pyrimidin-5-yl}amino)-N-cyclohexyl-N-methylbenzenesulfonamide	<p>Univ Brawijaya Fitur N Sample Akar 231 (8.452) Cm (231)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.24e6</p>
34.	3-Acetyl-3,5,12-trihydroxy-10-methoxy-6,11-dioxo-1,2,3,4,6,11-hexahydro-1-tetracenyl 3-amino-4-O-[1-(1-carboxyethoxy)-3-hydroxybutyl]-	<p>Univ Brawijaya Fitur N Sample Akar 236 (8.635) Cm (236)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.83e6</p>



	2,3,6-trideoxyhexopyranoside	
35.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fitran N Sample Akar 247 (9.035) Cm (247)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.79e5</p>
36.	1-[1-(6-Ethoxy-4-pyrimidinyl)-4-piperidinyl]methanamine hydrochloride (1:1)	<p>Univ Brawijaya Fitran N Sample Akar 252 (9.218) Cm (252)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.07e5</p>
37.	1-Hexadecanamine	<p>Univ Brawijaya Fitran N Sample Akar 258 (9.430) Cm (258.259)</p> <p>1: TOF MS ES+ 6.13e5</p>
38.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fitran N Sample Akar 261 (9.549) Cm (261)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.20e5</p>
39.	2-Amino-2-tetradecyl-1,3-propanediol	<p>Univ Brawijaya Fitran N Sample Akar 266 (9.732) Cm (266)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.34e5</p>

40.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Findun N Sample Akar 273 (9.984) Cm (273)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.89e5</p>
41.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Findun N Sample Akar 284 (10.384) Cm (284)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.89e5</p>
42.	(4R,4aS,6R)-6-Isopropenyl-4,4a-dimethyl-4,4a,5,6,7,8-hexahydro-2(3H)-naphthalenone	<p>Univ Brawijaya Findun N Sample Akar 291 (10.647) Cm (291)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.89e5</p>
43.	3-[(4-Cyclohexyl-1-piperazinyl)(1-cyclohexyl-1H-tetrazol-5-yl)methyl]-6-ethoxy-2(1H)-quinolinone	<p>Univ Brawijaya Findun N Sample Akar 303 (11.081) Cm (303)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.47e5</p>
44.	(10E,12E)-9-Oxo-10,12-octadecadienoic acid	<p>Univ Brawijaya Findun N Sample Akar 309 (11.290) Cm (309.310)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.72e5</p>

45.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Findrun N Sample Akar 317 (11.596) Cm (316.317)</p> <p>1: TOF MS ES+ 5.71e5</p>
46.	N-[2-(2,2-Dimethyltetrahydro-2H-pyran-4-yl)ethyl]-N-(4-methoxybenzyl)acetamide	<p>Univ Brawijaya Findrun N Sample Akar 322 (12.179) Cm (322.322)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.09e5</p>
47.	N-[2-(2,2-Dimethyltetrahydro-2H-pyran-4-yl)ethyl]-N-(4-methoxybenzyl)acetamide	<p>Univ Brawijaya Findrun N Sample Akar 323 (12.179) Cm (322.322)</p> <p>1: TOF MS ES+ 9.37e5</p>
48.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Findrun N Sample Akar 337 (12.328) Cm (336.337)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.50e5</p>
49.	N-Methyl-1-octadecanamine	<p>Univ Brawijaya Findrun N Sample Akar 341 (12.476) Cm (341)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.36e5</p>

50.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Firdaus N Sample Akar 358 (13.094) Cm (357.358)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.52e5</p>
51.	(2R)-N- [(2S,3R,4E,13Z)- 1,3-Dihydroxy- 4,13-docosadien-2- yl]-2- hydroxyhexadecan amide	<p>Univ Brawijaya Firdaus N Sample Akar 361 (13.208) Cm (361.362)</p> <p>1: TOF MS ES+ 4.85e5</p>
52.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Firdaus N Sample Akar 378 (13.820) Cm (378)</p> <p>1: TOF MS ES+ 5.85e5</p>
53.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Firdaus N Sample Akar 388 (14.191) Cm (388)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.57e6</p>
54.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Firdaus N Sample Akar 405 (14.809) Cm (405.406)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.88e5</p>

55.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Findon N Sample Akar 432 (15.803) Cm (431-432)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.44e6</p>
56.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Findon N Sample Akar 449 (16.421) Cm (447-450)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.02e7</p>
57.	N,N-Didodecyl-1-dodecanamine	<p>Univ Brawijaya Findon N Sample Akar 455 (16.638) Cm (464-455)</p> <p>1: TOF MS ES+ 7.26e6</p>
58.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Findon N Sample Akar 455 (17.118) Cm (467-489)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.36e7</p>
59.	2-Chloropteridine	<p>Univ Brawijaya Findon N Sample Akar 517 (18.913) Cm (516-523)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.27e6</p>



### Lampiran 3.2 Spektra Hasil Interpretasi Ekstrak Batang *Helianthus annuus* L.

No	Senyawa	Spektra
1.	(6R)-5-Amino-3,5-dideoxy-6-[(1R,2R)-1,2,3-trihydroxypropyl]- $\alpha$ -L-threo-hex-2-ulopyranosonic acid	<p>Univ. Brangajaya Flextion N Sample Batang 32 (1.189) Cm (32)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.28e5</p>
2.	Methyl (5R)-5-[(1S,2S)-2-chloro-1-({[(2S,4R)-1-chloro-4-ethyl-2-piperidinyl]carbonyl}amino)propyl]-1-thio- $\beta$ -L-arabinopyranoside	<p>Univ. Brangajaya Flextion N Sample Batang 39 (1.420) Cm (38.39)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.28e5</p>
3.	2,4,6-Trinitrophenol - 4,4,6-trimethyl-1,4-dihydro-2-pyrimidinamine (1:1)	<p>Univ. Brangajaya Flextion N Sample Batang 47 (1.718) Cm (47.48)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.50e5</p>
4.	N-(4-Methoxybenzoyl)lucine	<p>Univ. Brangajaya Flextion N Sample Batang 67 (2.488) Cm (66.68)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.50e5</p>

5.	3-(5-Chloro-1-methyl-1H-indol-3-yl)-4-{1-[2-(2H-tetrazol-5-yl)ethyl]-1H-indazol-3-yl}-1H-pyrrole-2,5-dione	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Batang 80 (2.918) Cm (80)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.60e5</p>
6.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Batang 92 (3.364) Cm (91.92)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.48e5</p>
7.	Arginyltyrosylaspartic acid	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Batang 96 (3.513) Cm (95.96)</p> <p>1: TOF MS ES+ 7.47e5</p>
8.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Batang 100 (3.653) Cm (100)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.73e5</p>
9.	(1S,2S,3R,4S,6R)-4-Amino-3-[[[(2S,3R)-3-amino-6-(aminomethyl)-3,4-dihydro-2H-pyran-2-yl]oxy]-6-(ethylamino)-2-hydroxycyclohexyl 3-deoxy-4-C-methyl-3-(methylamino)-β-L-arabinopyranoside	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Batang 104 (3.798) Cm (104.105)</p> <p>1: TOF MS ES+ 8.67e5</p>

10.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Frescon N Sample Batang 109 (3.981) Cm (109-110)</p> <p>1: TOP MS ES+ 1.17e5</p>
11	{3-[(4R,5R)-3,3-Dibutyl-7-(dimethylamino)-4-hydroxy-1,1-dioxido-2,3,4,5-tetrahydro-1-benzothiepin-5-yl]phenyl}methanesulfonic acid	<p>Univ Brawijaya Frescon N Sample Batang 117 (4.279) Cm (117)</p> <p>1: TOP MS ES+ 5.31e5</p>
12.	N-{2-[(3-Phenyl[1,2,4]triazolo[4,3-b]pyridazin-6-yl)oxy]ethyl}-6-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)-3-pyridazinecarboxamide	<p>Univ Brawijaya Frescon N Sample Batang 123 (4.496) Cm (123)</p> <p>1: TOP MS ES+ 6.46e5</p>
13.	4,4'-[1,2-Ethanediy]bis(1H-benzimidazole-1,2-diyl)]bis(1,2,5-oxadiazol-3-amine)	<p>Univ Brawijaya Frescon N Sample Batang 128 (4.679) Cm (128)</p> <p>1: TOP MS ES+ 5.48e5</p>
14.	5-Cyano-6-({2-[(4-methoxyphenyl)amino]-2-oxoethyl}sulfanyl)-2-methyl-N,4-diphenyl-1,4-dihydro-3-pyridinecarboxamide	<p>Univ Brawijaya Frescon N Sample Batang 134 (4.896) Cm (134)</p> <p>1: TOP MS ES+ 3.96e5</p>

15.	Methyl 4-({4-hydroxy-1-[3-(4-morpholinyl)propyl]-2-(3-nitrophenyl)-5-oxo-2,5-dihydro-1H-pyrrol-3-yl} carbonyl)-3,5-dimethyl-1H-pyrrole-2-carboxylate	<p>Univ Brawijaya Fitron N Sample Batang 148 (5.411) Cm (148)</p> <p>1: TOF MS ES+ 4.09e5</p>
16.	(4S,4aS,5aS,6S,12aS)-4-(Dimethylamino)-10-(β-D-galactopyranosyloxy)-3,6,12,12a-tetrahydroxy-6-methyl-1,11-dioxo-1,4,4a,5,5a,6,11,12a-octahydro-2-tetracenecarboxamide	<p>Univ Brawijaya Fitron N Sample Batang 154 (5.628) Cm (154.155)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.07e5</p>
17.	2-Methoxy-4-propionylphenyl 2,3,4,6-tetra-O-acetyl-β-D-glucopyranoside	<p>Univ Brawijaya Fitron N Sample Batang 158 (5.776) Cm (157.158)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.37e5</p>
18.	Ethyl (2Z)-1-(2-methoxyethyl)-5-oxo-2-[(3,4,5-trimethoxybenzoyl)imino]-1,5-dihydro-2H-dipyrido[1,2-a:2',3'-d]pyrimidine-3-carboxylate	<p>Univ Brawijaya Fitron N Sample Batang 164 (5.994) Cm (164)</p> <p>1: TOF MS ES+ 9.55e5</p>

19.	2-[6-amino-9-[(2R,3S,5R)-5-(aminomethyl)-3,4-dihydroxy-tetrahydrofuran-2-yl]purin-8-yl]sulfanyl-N-[[[(2R,4S,5R)-5-(6-aminopurin-9-yl)-3,4-dihydroxy-tetrahydrofuran-2-yl]methyl]acetamide	<p>Univ Brunei Darussalam Fission N Sample Batang 168 (6.142) Cm (167.168)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.45e6</p>
20.	Unknown	<p>Univ Brunei Darussalam Fission N Sample Batang 176 (6.440) Cm (176)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.32e6</p>
21.	Ethyl (2Z)-1-(2-methoxyethyl)-5-oxo-2-[(3,4,5-trimethoxybenzoyl)imino]-1,5-dihydro-2H-dipyrdo[1,2-a:2',3'-d]pyrimidine-3-carboxylate	<p>Univ Brunei Darussalam Fission N Sample Batang 182 (6.657) Cm (182)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.68e6</p>
22.	Unknown	



23.	L-Asparaginy-L-tyrosyl-L-asparaginy-L-alanyl-L-aspartic acid	<p>Univ Brawijaya F1000 N Sample Batang 197 (7.206) Cm (197)</p> <p>1: TOP MS ES+ 2.25e6</p>
24.	(5R)-1,2,3,4,5-Penta-O-acetyl-5-C-[(1S)-2-acetyl-6,7-dimethoxy-1,2,3,4-tetrahydro-1-isoquinolinyl]-D-xylitol	<p>Univ Brawijaya F1000 N Sample Batang 201 (7.304) Cm (201.202)</p> <p>1: TOP MS ES+ 6.50e6</p>
25.	2-Methyl-2-propanyl 3,5-dideoxy-2,4-O-isopropylidene-L-erythro-hexuronate	<p>Univ Brawijaya F1000 N Sample Batang 209 (7.640) Cm (208.209)</p> <p>1: TOP MS ES+ 4.35e6</p>
26.	3-[(4Z)-1,3-Dioxo-4-[(2-{4-[(8-quinolinylloxy)methyl]benzoyl}hydrazino)methylene]-3,4-dihydro-2(1H)-isoquinolinyl]-N,N-diethylbenzenesulfonamide	<p>Univ Brawijaya F1000 N Sample Batang 220 (8.040) Cm (220)</p> <p>1: TOP MS ES+ 5.02e5</p>
27.	2-Methoxyethyl 5-(2-furoyloxy)-2-methyl-1-benzofuran-3-carboxylate	<p>Univ Brawijaya F1000 N Sample Batang 226 (8.269) Cm (226)</p> <p>1: TOP MS ES+ 7.23e5</p>

28.	Unknown	<p>Univ Brawijaya File:run N Sample Batang 236 (8.635) Cm (236.237)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.44e6</p>
29.	4-(4-Methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)piperidine hydrochloride (1:1)	<p>Univ Brawijaya File:run N Sample Batang 240 (8.635) Cm (244.249)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.79e6</p>
30.	Ethyl 1-(4,5-dimethoxy-2-nitrobenzoyl)-4-piperidinecarboxylate	<p>Univ Brawijaya File:run N Sample Batang 249 (8.104) Cm (249.250)</p> <p>1: TOF MS ES+ 5.27e6</p>
31.	Ethyl 2-[[[(2,6-dimethyl-4-morpholinyl)carbo nothioyl]amino}-5,6,7,8-tetrahydro-4H-cyclohepta[b]thiop hene-3-carboxylate	<p>Univ Brawijaya File:run N Sample Batang 254 (8.286) Cm (254.255)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.64e6</p>
32.	Unknown	<p>Univ Brawijaya File:run N Sample Batang 261 (8.549) Cm (261)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.24e5</p>

33.	(1aR,2S,5aR,6aR,9aR,9bS)-9-(1,4-Dioxa-8-azaspiro[4.5]dec-8-ylmethyl)-2,5a-dimethyloctahydro-2H-oxireno[4,4a]naphtho[2,3-b]furan-8(9H)-one	<p>Univ Brunei Darussalam Fission N Sample Batang 265 (9.687) Cm (265)</p> <p>1: TOF MS ES+ 4.61e5</p>
34.	(3 $\alpha$ ,5 $\beta$ ,7 $\alpha$ ,12 $\alpha$ )-3,7,12-Tris(formyloxy)cholan-24-oic acid	<p>Univ Brunei Darussalam Fission N Sample Batang 270 (9.870) Cm (270)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.25e5</p>
35.	1-(1H-Benzotriazol-1-yl)-N,N-bis(1H-benzotriazol-1-ylmethyl)methanamine	<p>Univ Brunei Darussalam Fission N Sample Batang 277 (10.132) Cm (277)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.31e6</p>
36.	12-Phenyldodecanoic acid	<p>Univ Brunei Darussalam Fission N Sample Batang 284 (10.384) Cm (283.284)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.29e6</p>
37.	1-[(5-Chloro-3-ethyl-1-methyl-1H-pyrazol-4-yl)methyl]-N,N-dimethyl-4-azepanamine	<p>Univ Brunei Darussalam Fission N Sample Batang 290 (10.601) Cm (290)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.45e6</p>

38.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fitur: N Sample Batang 303 (11.081) Cm (303) 1: TOF MS ES+ 1.59e6</p>
39.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fitur: N Sample Batang 309 (11.299) Cm (309) 1: TOF MS ES+ 6.27e5</p>
40.	N-[(3-{2-[(1S,5S,8aR)-5-(Methoxycarbonyl)-5,8a-dimethyl-2-methylenedecahydro-1-naphthalenyl]ethyl}-2-furyl)methyl]alanine	<p>Univ Brawijaya Fitur: N Sample Batang 315 (11.516) Cm (315) 1: TOF MS ES+ 7.93e6</p>
41.	2-[3-(2,2-Dimethyltetrahydro-2H-pyran-4-yl)-6-methylheptyl]isoinoline ethanedioate (1:1)	<p>Univ Brawijaya Fitur: N Sample Batang 321 (11.745) Cm (321) 1: TOF MS ES+ 4.73e6</p>
42.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fitur: N Sample Batang 325 (11.882) Cm (325.306) 1: TOF MS ES+ 9.97e5</p>

43.	N-[2-(2,2-Dimethyltetrahydropyran-4-yl)ethyl]-N-(4-methoxybenzyl)acetamide	<p>Univ Brawijaya Fileton N Sample Batang 335 (12.248) Cm (332.335)</p> <p>1: TOP MS ES+ 1.29e5</p>
44.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fileton N Sample Batang 342 (12.511) Cm (341.342)</p> <p>1: TOP MS ES+ 1.79e5</p>
45.	(3 $\alpha$ ,5 $\alpha$ ,9 $\xi$ ,14 $\xi$ ,17 $\alpha$ )-Androstane-3,17-diol	<p>Univ Brawijaya Fileton N Sample Batang 347 (12.694) Cm (346.347)</p> <p>1: TOP MS ES+ 2.36e5</p>
46.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fileton N Sample Batang 351 (12.842) Cm (350.351)</p> <p>1: TOP MS ES+ 8.55e5</p>
47.	(5 $\xi$ )-Abieta-8,11,13-trien-18-oic acid	<p>Univ Brawijaya Fileton N Sample Batang 355 (13.094) Cm (358)</p> <p>1: TOP MS ES+ 8.39e5</p>



48.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Flextun N Sample Batang 367 (13.425) Cm (367)</p> <p>1: TOP MS ES+ 3.60e5</p>
49.	Palmitamide	<p>Univ Brawijaya Flextun N Sample Batang 370 (13.528) Cm (370.371)</p> <p>1: TOP MS ES+ 6.19e5</p>
50.	1-Dodecyl-2-azepanone	<p>Univ Brawijaya Flextun N Sample Batang 378 (13.820) Cm (378)</p> <p>1: TOP MS ES+ 4.47e6</p>
51.	1-(1-{4-[6-(1-Methyl-1H-tetrazol-5-yl)-3-phenyl-2-quinolinyl]benzyl}-4-piperidinyl)-1,3-dihydro-2H-benzimidazol-2-one	<p>Univ Brawijaya Flextun N Sample Batang 388 (14.191) Cm (387.388)</p> <p>1: TOP MS ES+ 7.59e6</p>
52.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Flextun N Sample Batang 394 (14.409) Cm (394)</p> <p>1: TOP MS ES+ 1.12e6</p>

53.	Unknown	
54.	Unknown	

### Lampiran 3.3 Spektra Hasil Interpretasi Ekstrak Daun *Helianthus annuus* L.

No	Senyawa	Spektra
1.	Unknown	
2.	2-hydroxynicotinonitrile	
3.	3-(3,4-Dihydro-2H-1,5-benzodioxepin-7-yl)-6-ethyl-2-methyl-7-[(4-vinylbenzyl)oxy]-4H-chromen-4-one	

4.	1-(4-Amino-1,2,5-oxadiazol-3-yl)-5-[(dimethylamino)methyl]-N'-(2-oxo-2H-indol-3-yl)-1H-1,2,3-triazole-4-carbohydrazide	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 87 (3.181) Cm (86.87)</p> <p>1: TOF MS ES+ 5.37e5</p>
5.	(2S)-2-Hydroxy-2-[(2R,5R,6R)-2-methoxy-5,6-dimethyl-4-methylenetetrahydro-2H-pyran-2-yl]-N-[(2R,3R,4S,5R,6R)-3,4,5-trimethoxy-6-(methoxymethyl)tetrahydro-2H-pyran-2-yl]acetamide	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 86 (3.513) Cm (95.96)</p> <p>1: TOF MS ES+ 5.15e5</p>
6.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 104 (3.798) Cm (104.105)</p> <p>1: TOF MS ES+ 7.75e5</p>
7.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 100 (3.981) Cm (108.109)</p> <p>1: TOF MS ES+ 6.75e5</p>
8.	(1aR,2S,5aR,6aR,9aR,9bS)-9-[[[(2,2-Dimethoxyethyl)(methyl)amino]methyl]-2,5a-dimethyloctahydro-2H-oxireno[4,4a]naphtho[2,3-b]furan-8(9H)-one	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 112 (4.096) Cm (112)</p> <p>1: TOF MS ES+ 5.22e5</p>

9.	1-[2-(Dimethylamino)ethyl]-2-hydroxy-3-methylguanidine hydrochloride (1:1)	<p>Univ Brawijaya Pleotun N Sample Daun 119 (4.347) Cm (119)</p> <p>1: TOF MS ES+ 8.3965</p>
10.	Isoleucylthreonylserylhistidine	<p>Univ Brawijaya Pleotun N Sample Daun 123 (4.496) Cm (123)</p> <p>1: TOF MS ES+ 8.0265</p>
11.	2,6-Dimethyl-4-(1-piperidinylmethyl)phenol	<p>Univ Brawijaya Pleotun N Sample Daun 129 (4.719) Cm (129)</p> <p>1: TOF MS ES+ 8.4365</p>
12.	(2E)-2-(2-Methoxybutylidene)hydrazinecarboximide hydrochloride (1:1)	<p>Univ Brawijaya Pleotun N Sample Daun 140 (3.798) Cm (104:105)</p> <p>1: TOF MS ES+ 7.3965</p>
13.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Pleotun N Sample Daun 140 (5.113) Cm (136:141)</p> <p>1: TOF MS ES+ 7.2465</p>

14.	Methyl N-{[(2R)-1-(isopropylcarbamoyl)-4-(phenylcarbamoyl)-2-piperazinyl]carbonyl}-O-methyl-L-tyrosinate	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Daun 147 (5.376) Cm (147.148)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.1766</p>
15.	3-Cyclohexyl-3-(4-isopropoxyphenyl)-1-propanaminium hydrogen oxalate	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Daun 153 (5.594) Cm (152.153)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.1766</p>
16.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Daun 153 (5.594) Cm (152.153)</p> <p>1: TOF MS ES+ 8.1766</p>
17.	3,4,9-Trimethyl-1,4-dihydro[1,2,4]triazino [3,4-f]purine-6,8(7H,9H)-dione	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Daun 162 (5.959) Cm (163)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.2565</p>
18.	5,7-Dihydroxy-2-(3-hydroxy-4-methoxyphenyl)-4H-chromen-4-one	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Daun 172 (6.291) Cm (172)</p> <p>1: TOF MS ES+ 7.2565</p>



19.	4-Chloro-N-[3-(dimethylamino)propyl]-3,5-dinitrobenzamide	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 175 (6.394) Cm (175)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.0266</p>
20.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 182 (6.657) Cm (182)</p> <p>1: TOF MS ES+ 7.4465</p>
21.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 185 (6.760) Cm (185)</p> <p>1: TOF MS ES+ 7.9965</p>
22.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 188 (6.874) Cm (188)</p> <p>1: TOF MS ES+ 5.1865</p>
23.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 198 (7.240) Cm (198)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.4265</p>

24.	[(4-Butyl-8,8-dimethyl-2-oxo-9,10-dihydro-2H,8H-pyrano[2,3-f]chromen-5-yl)oxy]acetic acid	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Daun 202 (7.389) Cm (202)</p> <p>1: TOF MS ES+ 6.3365</p>
25.	Bis(2-methyl-2-propanyl) 3-oxopentanedioate	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Daun 200 (7.640) Cm (208.209)</p> <p>1: TOF MS ES+ 4.8665</p>
26.	3-Isobutyl-1,7-dimethyl-8-[3-(4-morpholinyl)propyl]-1H-imidazo[2,1-f]purine-2,4(3H,8H)-dione	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Daun 200 (7.603) Cm (216)</p> <p>1: TOF MS ES+ 8.0865</p>
27.	5-[(1-(2-Methyl-2-propanyl)-3-[2-(methylsulfanyl)ethyl]-1H-1,2,4-triazol-5-yl)methyl)sulfanyl]-1,3,4-thiadiazol-2-amine	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Daun 222 (8.120) Cm (221.222)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.0166</p>
28.	2-Methoxyethyl 5-(2-furoyloxy)-2-methyl-1-benzofuran-3-carboxylate	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Daun 226 (8.269) Cm (228)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.1746</p>

29.	{[3-(Dodecanoylamino)propyl](dimethylammonio)acetate	<p>Univ Brawijaya Ploton N Sample Daun 237 (8.669) Cm (237)</p> <p>1: TOF MS ES+ 8.6365</p>
30.	4-(4-Methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)piperidine hydrochloride (1:1)	<p>Univ Brawijaya Ploton N Sample Daun 242 (8.950) Cm (244.245)</p> <p>1: TOF MS ES+ 8.7865</p>
31.	1-[6-(3,5-Dimethyl-1H-pyrazol-1-yl)-3-pyridazinyl]-N-[6-(4-phenyl-1-piperazinyl)-4-pyrimidinyl]-4-piperidinecarboxamide [	<p>Univ Brawijaya Ploton N Sample Daun 252 (9.218) Cm (251.252)</p> <p>1: TOF MS ES+ 8.3165</p>
32.	1-Hexadecanamine	<p>Univ Brawijaya Ploton N Sample Daun 259 (9.469) Cm (259)</p> <p>1: TOF MS ES+ 8.6265</p>
33.	2-Methyl-N-[3-(4-morpholinyl)propyl]-3-phenyl-6,7-dihydro-5H-cyclopenta[d]pyrazolo[1,5-a]pyrimidin-8-amine	<p>Univ Brawijaya Ploton N Sample Daun 265 (9.687) Cm (265)</p> <p>1: TOF MS ES+ 8.3265</p>

34.	2,2'-(1,3-Propanediyl)disulfane diyl)bis(N,N-dipropylacetamide)	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 270 (9.870) Cm (270)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.9065</p>
35.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 276 (10.088) Cm (276.277)</p> <p>1: TOF MS ES+ 4.3865</p>
36.	12-Phenyldodecanoic acid	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 284 (10.384) Cm (283.284)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.0366</p>
37.	N-[3-(3,4,5,6-Tetrahydro-2H-azepin-7-ylamino)propyl]-1,4-butanediamine hydrochloride (1:1)	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 287 (10.488) Cm (286.287)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.3066</p>
38.	1-[(5-Chloro-3-ethyl-1-methyl-1H-pyrazol-4-yl)methyl]-N,N-dimethyl-4-azepanamine	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 290 (10.601) Cm (290)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.5065</p>

39.	[4-(Allyloxy)-3,5-dipropylphenyl](4-methyl-1-piperazinyl)methanone 2-hydroxy-1,2,3-propanetricarboxylate (1:1)	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 304 (11.116) Cm (303.304)</p> <p>1: TOF MS ES+ 5.4865</p>
40.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 307 (11.230) Cm (306.307)</p> <p>1: TOF MS ES+ 5.4865</p>
41.	N-(4-{4-[(1-Methyl-1H-benzimidazol-2-yl)methyl]-1-piperazinyl}phenyl)cyclohexanecarboxamide	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 315 (11.516) Cm (314.315)</p> <p>1: TOF MS ES+ 6.5066</p>
42.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 321 (11.516) Cm (314.322)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.1966</p>
43.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 332 (12.179) Cm (332.333)</p> <p>1: TOF MS ES+ 5.2945</p>



44.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 339 (12.396) Cm (339-341)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.1566</p>
45.	2-(Trimethylammonio) octadecanoate	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 351 (12.842) Cm (351)</p> <p>1: TOF MS ES+ 7.8365</p>
46.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 358 (13.094) Cm (357-358)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.1266</p>
47.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 366 (13.391) Cm (366)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.1846</p>
48.	Unknwon	<p>Univ Brawijaya Fisetun N Sample Daun 379 (13.860) Cm (378-380)</p> <p>1: TOF MS ES+ 4.1546</p>

49.	N-{2-[(11a <i>S</i> )-5-(4-Isopropylphenyl)-1,3-dioxo-5,6,11,11a-tetrahydro-1 <i>H</i> -imidazo[1',5':1,6]pyrido[3,4- <i>b</i> ]indol-2(3 <i>H</i> )-yl]benzoyl}- <i>L</i> -leucine	<p>Univ Brawijaya Fibrotun N Sample Daun 388 (14.191) Cm (388)</p> <p>1: TOF MS ES+ 7.7166</p>
50.	1-(1-{4-[6-(1-Methyl-1 <i>H</i> -tetrazol-5-yl)-3-phenyl-2-quinolinyl]benzyl}-4-piperidinyl)-1,3-dihydro-2 <i>H</i> -benzimidazol-2-one	<p>Univ Brawijaya Fibrotun N Sample Daun 394 (14.409) Cm (394)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.3566</p>
51.	Unknown	

54.	N-(1-Oxidoisonicotinoyl)-L-isoleucyl-N-[(2S)-1-[[ (2S)-3-amino-1-[[ (2S)-1-(ethylamino)-3-methyl-1-oxo-2-butanyl]amino}-1-oxo-2-propanyl]amino}-4-methyl-2-pentanyl]-L-norvalinamide	<p>Univ Brawijaya File:run N Sample Daun 427 (16.620) Cm (423-427) 1: TOF MS ES+ 7.2666</p>
55.	Unknown	<p>Univ Brawijaya File:run N Sample Daun 435 (16.906) Cm (433-435) 1: TOF MS ES+ 7.9866</p>
56.	Unknown	<p>Univ Brawijaya File:run N Sample Daun 443 (16.204) Cm (440-443) 1: TOF MS ES+ 1.7167</p>
57.	N,N-Didodecyl-1-dodecanamine	<p>Univ Brawijaya File:run N Sample Daun 454 (16.604) Cm (440-455) 1: TOF MS ES+ 1.0267</p>
58.	Unknown	<p>Univ Brawijaya File:run N Sample Daun 460 (17.153) Cm (467-473) 1: TOF MS ES+ 1.0667</p>

59.	2-Chloropteridine	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Daun 517 (18.913) Cm (517.523)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.0166</p>
60.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Daun 540 (19.748) Cm (540.548)</p> <p>1: TOF MS ES+ 9.1165</p>
61.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Daun 593 (19.691) Cm (592.594)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.0065</p>

### Lampiran 3.4 Spektra Hasil Interpretasi Ekstrak Biji *Helianthus annuus* L.

No	Senyawa	Spektra
1.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fisetin N Sample Biji 67 (2.449) Cm (66.69)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.6167</p>

2.	7-[2-(Cyclohexylamino)ethyl]-1,3-dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione hydrochloride (1:1)	<p>Univ Brawijaya F1000 N Sample: Bij 91 (3.330) Cm (91)</p> <p>1: TOF MS ES+ 6.38e5</p>
3.	Arginyltyrosylaspartic acid	<p>Univ Brawijaya F1000 N Sample: Bij 96 (3.513) Cm (94.96)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.15e6</p>
4.	Unknown	<p>Univ Brawijaya F1000 N Sample: Bij 101 (3.696) Cm (100:101)</p> <p>1: TOF MS ES+ 6.85e5</p>
5.	Unknown	<p>Univ Brawijaya F1000 N Sample: Bij 104 (3.799) Cm (104:105)</p> <p>1: TOF MS ES+ 8.26e5</p>
6.	Unknown	<p>Univ Brawijaya F1000 N Sample: Bij 109 (3.981) Cm (108:109)</p> <p>1: TOF MS ES+ 6.48e5</p>



7.	4-Benzyl 1-(6-oxo-7,8,9,10-tetrahydro-6H-benzo[c]chromen-3-yl) N-{[(2-methyl-2-propanyl)oxy]carbonyl}-L-aspartate	<p>Univ Brawijaya Flourun N Sample: Bij 117 (4.279) Cm (117)</p> <p>1: TOF MS ES+ 8.59e5</p>
8.	6-Hydroxy-2-phenyl-2-(2-phenylethyl)-5-[(2-phenylethyl)sulfany l]-2,3-dihydro-4H-pyran-4-one	<p>Univ Brawijaya Flourun N Sample: Bij 125 (4.565) Cm (125)</p> <p>1: TOF MS ES+ 8.66e4</p>
9.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Flourun N Sample: Bij 125 (4.783) Cm (130131)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.30e6</p>
10.	Ethyl 11-oxo-2,3,6,7-tetrahydro-1H,5H,11H-pyrano[2,3-f]pyrido[3,2,1-ij]quinoline-10-carboxylate	<p>Univ Brawijaya Flourun N Sample: Bij 141 (5.159) Cm (141-142)</p> <p>1: TOF MS ES+ 5.05e5</p>
11.	3-Cyclohexyl-3-(4-isopropoxyphenyl)-1-propanaminium hydrogen oxalate	<p>Univ Brawijaya Flourun N Sample: Bij 152 (5.559) Cm (152)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.13e5</p>

12.	Glycyl-N-[(2S)-2-amino-2-carboxyethyl]-L-cysteinamide	<p>Univ Brawijaya Filtratun N Sample: Bij 163 (5.959) Cm (162.163)</p> <p>1: TOF MS ES+ 4.58e5</p>
13.	N <sup>5</sup> -{2-[(2-Aminoethyl)carbamoyl]-1H-indol-5-yl}-N <sup>2</sup> -{2-[(2-aminoethyl)carbamoyl]-3H-indol-5-yl}-3H-indole-2,5-dicarboxamide	<p>Univ Brawijaya Filtratun N Sample: Bij 167 (6.108) Cm (166.167)</p> <p>1: TOF MS ES+ 4.62e5</p>
14.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Filtratun N Sample: Bij 175 (6.394) Cm (175)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.24e6</p>
15.	(1Z)-N-(4-Hydroxy-3-methoxybenzyl)-8-methylnonanimidic acid	<p>Univ Brawijaya Filtratun N Sample: Bij 180 (6.577) Cm (180)</p> <p>1: TOF MS ES+ 9.75e5</p>
16.	Methyl (2R,3S,4S,5S)-6-[(8-aminooctyl)amino]-2,3,4,5-tetrahydro-6-oxohexanoate	<p>Univ Brawijaya Filtratun N Sample: Bij 188 (6.874) Cm (188)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.04e5</p>

17.	3-[Ethyl(1-methyl-1H-tetrazol-5-yl)amino]-2-methylpropanethioamide	<p>Univ Brawijaya Fitorun N Sample: Bij 198 (7.240) Cm (198)</p> <p>1: TOF MS ES+ 5.66e5</p>
18.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fitorun N Sample: Bij 201 (7.354) Cm (201)</p> <p>1: TOF MS ES+ 7.88e5</p>
19.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fitorun N Sample: Bij 209 (7.640) Cm (209)</p> <p>1: TOF MS ES+ 4.84e6</p>
20.	2-Methoxyethyl 5-(2-furoyloxy)-2-methyl-1-benzofuran-3-carboxylate	<p>Univ Brawijaya Fitorun N Sample: Bij 221 (8.086) Cm (221)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.02e6</p>
21.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fitorun N Sample: Bij 237 (8.689) Cm (237)</p> <p>1: TOF MS ES+ 7.68e5</p>

22.	Ethyl 2-[(cyclohexylcarbamothioyl)amino]-4,5,6,7-tetrahydro-1-benzothiophene-3-carboxylate	<p>Univ Brawijaya F1000 N Sample: Bij 250 (8.138) Cm (249.250)</p> <p>1: TOF MS ES+ 6.41e5</p>
23.	7-Butyl-8-{{[4-(3-chlorophenyl)-1-piperazinyl]methyl}-1,3-dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione}	<p>Univ Brawijaya F1000 N Sample: Bij 255 (8.321) Cm (254.255)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.25e5</p>
24.	1-( $\alpha$ -D-Allopyranosyl)-N-(2-{[3-(dimethylamino)propyl]carbamoyl}-1-methyl-1H-imidazol-4-yl)-4-[(4-{[(11aR)-7-methoxy-5-oxo-2,3,5,11a-tetrahydro-1H-pyrrolo[2,1-c][1,4]benzodiazepin-8-yl]oxy}butanoyl)amino]-1H-pyrrole-2-carboxamide	<p>Univ Brawijaya F1000 N Sample: Bij 261 (8.549) Cm (261)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.64e5</p>
25.	Unknown	<p>Univ Brawijaya F1000 N Sample: Bij 269 (8.835) Cm (268.270)</p> <p>1: TOF MS ES+ 9.15e5</p>

26.	4-(2-Methyl-2-propanyl) 1-(4-nitrophenyl) N-[(2-methyl-2-propanyl)oxy]carbo- nyl}-L-aspartate	<p>Univ Brawijaya Filetun N Sample: Bij 277 (10.133) Cm (277)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.50e6</p>
27.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Filetun N Sample: Bij 288 (10.533) Cm (288)</p> <p>1: TOF MS ES+ 5.66e5</p>
28.	3-[(4-Cyclohexyl-1-piperazinyl)(1-cyclohexyl-1H-tetrazol-5-yl)methyl]-6-ethoxy-2(1H)-quinolinone	<p>Univ Brawijaya Filetun N Sample: Bij 297 (10.864) Cm (297)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.17e6</p>
29.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Filetun N Sample: Bij 303 (11.081) Cm (303.304)</p> <p>1: TOF MS ES+ 9.74e5</p>
30.	12-Phenyldodecanoic acid	<p>Univ Brawijaya Filetun N Sample: Bij 309 (11.299) Cm (309)</p> <p>1: TOF MS ES+ 8.31e5</p>



31.	N <sup>2</sup> - [(Allyloxy)carbonyl ]-N <sup>5</sup> -{[(2-methyl-2- propanyl)oxy]carbo nyl}-D-ornithine - N- cyclohexylcyclohex anamine (1:1)	<p>Univ Brawijaya Fitotun N Sample: Bij 317 (11.596) Cm (317)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.37e6</p>
32.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fitotun N Sample: Bij 321 (11.745) Cm (321)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.72e6</p>
33.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fitotun N Sample: Bij 326 (11.928) Cm (326)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.28e7</p>
34.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Fitotun N Sample: Bij 335 (12.248) Cm (335)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.30e7</p>
35.	4-Amino-N,N- bis(4-aminobutyl)- N-(3-aminopropyl)- 1-butanaminium chloride	<p>Univ Brawijaya Fitotun N Sample: Bij 342 (12.511) Cm (342)</p> <p>1: TOF MS ES+ 4.00e5</p>

36.	(1S,5S,6R,7S,8S,11R,12R,16R)-7-Hydroxy-7-(hydroxymethyl)-11,14,14,18,21,21-hexamethyl-19-oxo-3-phenyl-2,4,13,15-tetraoxapentacyclo[15.3.1.0 <sup>1,5</sup> .0 <sup>6,11</sup> .0 <sup>12,16</sup> ]henicos-17-en-8-yl methanesulfonate	<p>Univ Brawijaya Filterout N Sample Bij 346 (12.659) Cm (346:347)</p> <p>1: TOF MS ES+ 7.04e5</p>
37.	2-(Trimethylammonio)octadecanoate	<p>Univ Brawijaya Filterout N Sample Bij 351 (12.842) Cm (351)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.42e6</p>
38.	N,N-Didecyl-2-hydroxypropanamide	<p>Univ Brawijaya Filterout N Sample Bij 358 (13.094) Cm (358)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.53e7</p>
39.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Filterout N Sample Bij 367 (13.425) Cm (366:368)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.58e5</p>

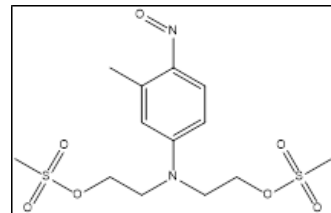
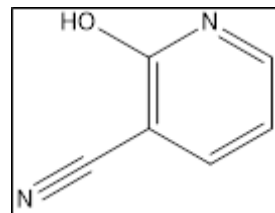
40.	Unknown	<p>Univ Brawijaya F10run N Sample: Bij 371 (13.574) Cm (371)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.54e6</p>
41	N,N'-Bis[2-(9-acridinylamino)ethyl]-1-methyl-1H-pyrazole-3,5-dicarboxamide	<p>Univ Brawijaya F10run N Sample: Bij 380 (13.894) Cm (380)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.55e6</p>
42.	N,N-Didecyl-2-hydroxypropanamide	<p>Univ Brawijaya F10run N Sample: Bij 383 (14.008) Cm (383)</p> <p>1: TOF MS ES+ 2.46e6</p>
43.	4-[(4-[3-Ethyl-7-(4-morpholinyl)-3H-[1,2,3]triazolo[4,5-d]pyrimidin-5-yl]phenyl)carbamoyl]amino-N-[2-(2-pyridinyl)ethyl]benzamide	<p>Univ Brawijaya F10run N Sample: Bij 388 (14.191) Cm (388)</p> <p>1: TOF MS ES+ 1.83e7</p>
44.	3-[(Methyl{3-[(4-oxo-2-phenyl-4H-chromen-7-yl)oxy]propyl}amino)methyl]phenyl heptylcarbamate hydrochloride (1:1)	<p>Univ Brawijaya F10run N Sample: Bij 394 (14.409) Cm (394)</p> <p>1: TOF MS ES+ 4.60e6</p>

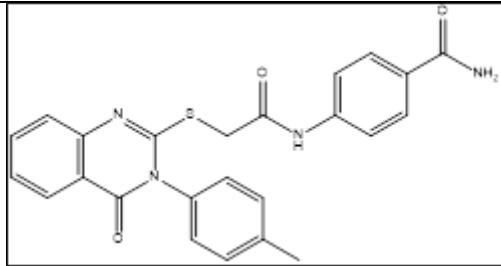
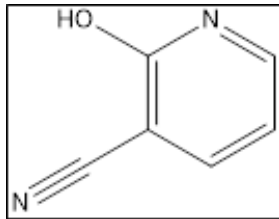
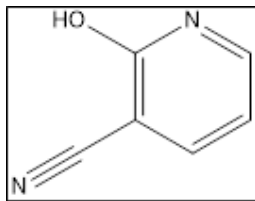
45.	N <sup>5</sup> -Acetyl-N <sup>5</sup> -hydroxy-L-ornithyl-N <sup>5</sup> -acetyl-N <sup>5</sup> -hydroxy-L-ornithyl-N <sup>5</sup> -acetyl-N <sup>5</sup> -hydroxy-L-ornithin	<p>Univ Brawijaya Filtratun N Sample: Bij 399 (14.091) Cm (398-399)</p> <p>1: TOF MS ES+ 4.79e6</p>
46.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Filtratun N Sample: Bij 403 (14.740) Cm (403)</p> <p>1: TOF MS ES+ 5.96e5</p>
47.	N-(2,2-Dimethyltetrahydro-2H-pyran-4-yl)-N-[3-(4-isopropoxyphenyl)-4-methylpentyl]acetamide	<p>Univ Brawijaya Filtratun N Sample: Bij 411 (15.037) Cm (411)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.71e6</p>
48.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Filtratun N Sample: Bij 426 (15.586) Cm (425-426)</p> <p>1: TOF MS ES+ 3.33e6</p>
49.	Unknown	<p>Univ Brawijaya Filtratun N Sample: Bij 448 (16.396) Cm (448-449)</p> <p>1: TOF MS ES+ 6.18e6</p>

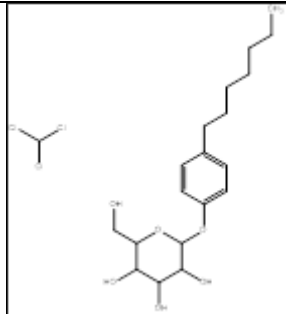
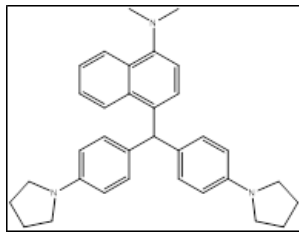
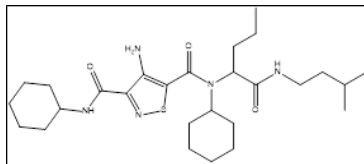


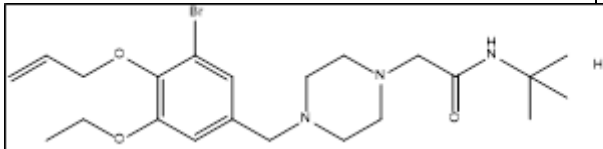
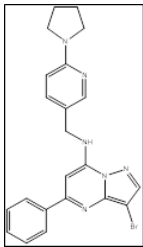
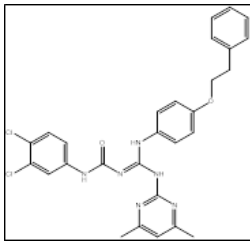


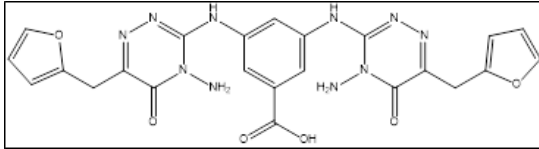
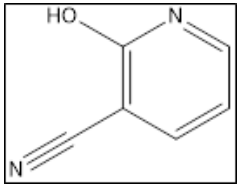
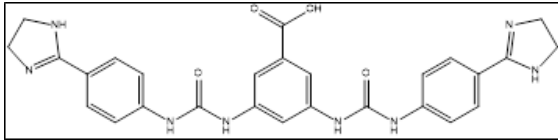
# Lampiran Spektra m/z Senyawa Bagian Akar

No.	Rt	Tinggi	Area	%Area	Measure d Mass	Calculate d Mass	Rumus Molekul	Nama IUPAC	Golongan Senyawa	Struktur
1.	0,1528	4438,000	491061,000	0,0063%						
2.	0,4785	794867,000	44247910,0000	0,5712%						
3.	0,6292	46346,000	3054044,0000	0,0394%	380,0716	380,0712	C13H20N2O7S2	[(3-Methyl-4-nitrosophenyl)imino]di-2,1-ethanediyl dimethanesulfonate	Ester	
4.	1,1350	6229,000	705115,0000	0,0091%	120,0324	120,0324	C6H4N2O	2-hydroxynicotinonitrile	Alkaloid	
5.	1,4200	206821,000	16110048,0000	0,2080%	444,1251	444,1256	C24H20N4O3S	4-[[[3-(4-Methylphenyl)-4-oxo-3,4-dihydro-2-quinazolinyl]sulfanyl]acetyl]amino]benzamide	Alkaloid	

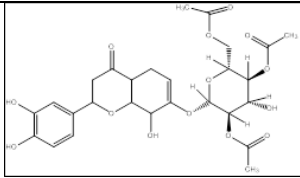
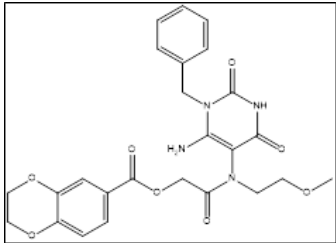
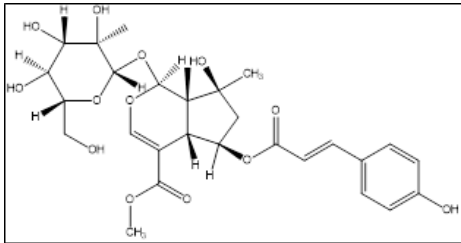
										
6.	1,7520	3163,000 0	461154,0 000	0,0060%	120,0322	120,0324	C6H4N2O	2-hydroxynicotinonitrile	Alkaloid	
7.	1,8660	5580,000 0	506233,0 000	0,0065%	120,0322	120,0324	C6H4N2O Cl	2-hydroxynicotinonitrile	Alkaloid	
8.	2,4490	104126,0 000	11401274 ,0000	0,1472%	265,1308	265,1306	C9H21N5 O2Cl	Unknown		
9.	2,9180	693224,0 000	44315727 ,0000	0,5720%	472,1190	472,1186	C20H31O 6Cl3	4-Heptylphenyl hexopyranoside - chloroform (1:1)		

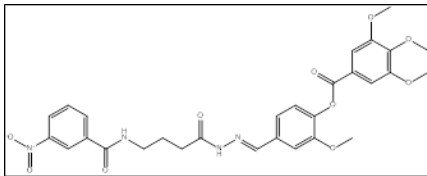
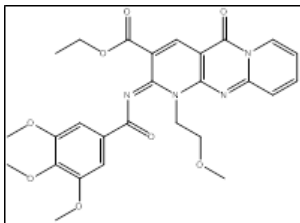
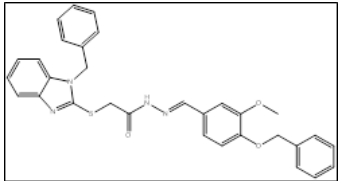
										
10.	3,7300	393120,000	84955453,0000	1,0966%	431,2729	431,2731	C18H41NO10	Unknown		
11.	3,7990	459876,000	34834184,0000	0,4497%	475,2986	475,2988	C33H37N3	4-[Bis[4-(1-pyrrolidinyl)phenyl]methyl]-N,N-dimethyl-1-naphthalenamine	Senyawa turunan pirazon	
12.	3,9470	296561,000	26035777,0000	0,3361%	519,3243	519,3243	C27H45N5O3S	4-Amino-N <sup>3</sup> ,N <sup>5</sup> -dicyclohexyl-N <sup>5</sup> -{1-[(3-methylbutyl)amino]-1-oxo-2-pentanyl}-1,2-thiazole-3,5-dicarboxamide	Amida	

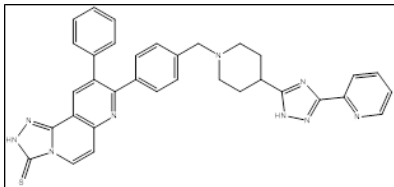
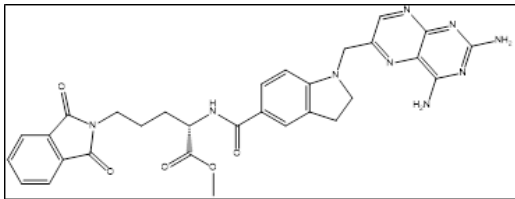
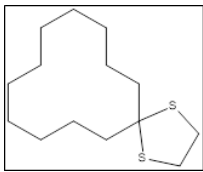
13.	4,0610	233011,0000	16028802,0000	0,2069%	557,11741	557,1737	C24H36N3O7Br	2-{4-[4-(Allyloxy)-3-bromo-5-ethoxybenzyl]-1-piperazinyl}-N-(2-methyl-2-propanyl)acetamide ethanedioate (1:1)	Asam Oksalat	
14.	4,1640	233011,0000	16028802,0000	0,2069%	448,1014	448,1011	C22H21N6Br	3-Bromo-5-phenyl-N-{{6-(1-pyrrolidinyl)-3-pyridinyl}methyl}pyrazolo[1,5-a]pyrimidin-7-amine	Alkaloid	
15.	4,3470	132834,0000	7188264,0000	0,0928%	602,1987	602,1983	C7H23N26O6Cl	Unknown		
						602,1986	C7H23N26O6Cl	Unknown		
						602,1989	C15H40N16Br2	Unknown		
16.	4,4960	139814,0000	10462132,0000	0,1350%	548,1491	548,1495	C28H26N6O2Cl2	1-(3,4-Dichlorophenyl)-3-([(4,6-dimethyl-2-pyrimidinyl)amino]{[4-(2-phenylethoxy)phenyl]amino}methylene)urea	Alkaloid	

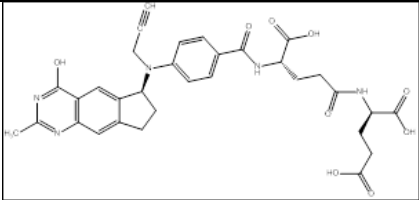
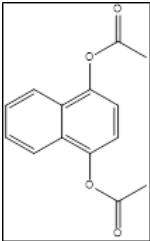
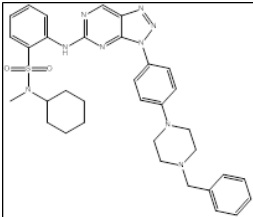
17.	4,6450	1018918,0000	66563547,0000	0,8592%	542,1992	542,1991	C7H22N2O8	Unknown		
						542,1988	C15H34N12O4S3	Unknown		
						542,1987	C7H30N18O7S2	Unknown		
18.	4,8960	582470,000	44125941,0000	0,5696%	532,1572	532,1568	C23H20N10O6	3,5-Bis{[4-amino-6-(2-furylmethyl)-5-oxo-4,5-dihydro-1,2,4-triazin-3-yl]amino}benzoic acid	Asam karboksilat aromatik	
19.	5,1590	6622,0000	874818,0000	0,0113%	120,0322	120,0324	C6H4N2O	2-hydroxynicotinonitrile	Alkaloid	
20.	5,4110	622645,000	55601641,0000	0,7177%	526,2081	526,2077	C27H26N8O4	3,5-Bis({[4-(4,5-dihydro-1H-imidazol-2-yl)phenyl]carbonyl}amino)benzoic acid	Asam karboksilat aromatik	
21.	5,5250	238430,000	12848756,0000	0,1659%	576,1481	576,1479	C27H28O14	2-(3,4-Dihydroxyphenyl)-8-hydroxy-4-oxo-3,4-	Flavon	

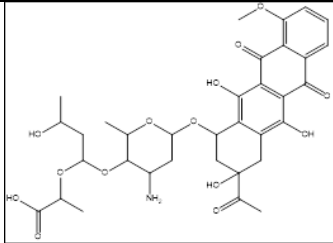
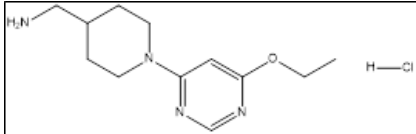



								dihydro-2H-chromen-7-yl 2,4,6-tri-O-acetyl-β-D-glucopyranoside		
22.	5,7420	3794556,0000	252383359,0000	3,2578%	510,1749	510,1751	C25H26N4O8	2-[(6-Amino-1-benzyl-2,4-dioxo-1,2,3,4-tetrahydro-5-pyrimidinyl)(2-methoxyethyl)amino]-2-oxoethyl 2,3-dihydro-1,4-benzodioxine-6-carboxylate	Alkaloid	
23.	5,8910	716482,0000	37877332,0000	0,4889%	552,1846	522,1843	C26H32O13	Methyl (1S,4aS,5R,7S,7aS)-1-(β-D-glucopyranosyloxy)-7-hydroxy-5-[(2E)-3-(4-hydroxyphenyl)-2-propenoyl]oxy)-7-methyl-1,4a,5,6,7,7a-hexahydrocyclopenta[c]pyran-4-carboxylate	Asam karboksilat	
24.	5,9940	1293175,0000	74153172,0000	0,9572%	536,1888	536,1885	C32H35O3Cl2	Unknown		
						536,1883	C16H32N12O3S3	Unknown		
						536,1892	C25H35N	Unknown		

							6OSCl2			
25.	6,2110	641353,0000	57565094,0000	0,7431%	594,1967	594,1962	C29H30N4O10	2-Methoxy-4-[(E)-{(4-[(3-nitrobenzoyl)amino]butanoyl}hydrazono)methyl]phenyl 3,4,5-trimethoxybenzoate	Flavonoid	
26.	6,4400	1324814,0000	88571102,0000	1,1433%	536,1905	536,1907	C27H28N4O8	Ethyl (2Z)-1-(2-methoxyethyl)-5-oxo-2-[(3,4,5-trimethoxybenzoyl)imino]-1,5-dihydro-2H-dipyrido[1,2-a:2',3'-d]pyrimidine-3-carboxylate	Alkaloid	
27.	6,6570	3724385,0000	333840438,0000	4,3093%	536,1886	536,1882	C31H28N4O3S	2-[(1-Benzyl-1H-benzimidazol-2-yl)sulfanyl]-N'-{(E)-[4-(benzyloxy)-3-methoxyphenyl]methylene}acetohydrazide	Turunan asam sinamat	
28.	7,0570	368898,0000	25010082,0000	0,3228%	639,2172	639,2173	C8H18N35Cl	Unknown		
						639,2172	C43H25N7	Unknown		
						639,2167	C18H39N17SClBr	Unknown		

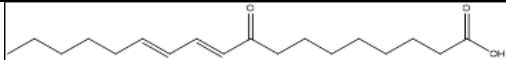
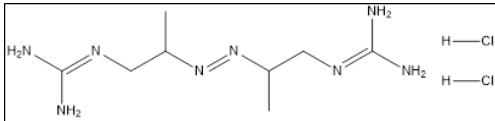
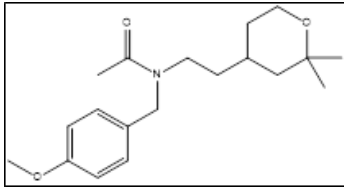

29.	7,1710	3271512,0000	342016188,0000	4,4149%	595,2271	595,2267	C34H29N9S	9-Phenyl-8-[4-({4-[3-(2-pyridinyl)-1H-1,2,4-triazol-5-yl]-1-piperidinyl}methyl)phenyl][1,2,4]triazolo[3,4-f][1,6]naphthyridine-3(2H)-thione	Alkaloid	
30.	7,3540	4981267,0000	460862688,0000	5,9490%	595,2289	585,2292	C30H29N9O5	Methyl N-({1-[(2,4-diamino-6-pteridinyl)methyl]-2,3-dihydro-1H-indol-5-yl}carbonyl)-5-(1,3-dioxo-1,3-dihydro-2H-isoindol-2-yl)norvalinate	Alkaloid	
31.	7,6060	2424503,0000	222574188,0000	2,8731%	258,1480	258,1476	C14H26S2	1,4-Dithiaspiro[4.11]hexadecane	Hidrokarbon	
32.	8,0400	886279,0000	37240543,0000	0,4807%	675,2202	675,2205	C43H29N7S	Unknown		
						675,2204	C35H25N13O3	Unknown		
33.	8,1890	661023,0000	32097959,0000	0,4143%	631,2284	631,2279	C32H33N5O9	N-(4-{[(6S)-2-Methyl-4-oxo-4,6,7,8-tetrahydro-1H-	Asam amino	

								cyclopenta[g]quinazolin-6-yl](2-propyn-1-yl)amino}benzoyl)-L- $\gamma$ -glutamyl-D-glutamic acid		
34.	8,3370	18824,0000	645660,0000	0,0083%	244,0734	244,0736	C14H12O4	1,4-Naphthalenediyl diacetate	Alkaloid	
35.	8,4520	47190,0000	1888375,0000	0,0244%	637,2946	637,2948	C34H39N9O2S	2-({3-[4-(4-Benzyl-1-piperazinyl)phenyl]-3H-[1,2,3]triazolo[4,5-d]pyrimidin-5-yl}amino)-N-cyclohexyl-N-methylbenzenesulfonamide	Alkaloid	
36.	8,6350	1747469,0000	102343602,0000	1,3211%	687,2530	687,2527	C34H41NO14	3-Acetyl-3,5,12-trihydroxy-10-methoxy-6,11-dioxo-1,2,3,4,6,11-hexahydro-1-tetracenyl	Turunan asam amino	

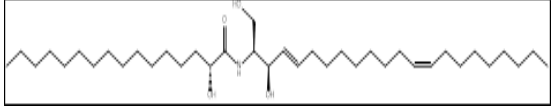
								3-amino-4-O-[1-(1-carboxyethoxy)-3-hydroxybutyl]-2,3,6-trideoxyhexopyranoside		
37.	9,0350	201555,0000	16760738,0000	0,2164%	723,3300	723,3297	C37H57N O7S3	Unknown		
						723,3300	C29H45N 11O11	Unknown		
						723,3302	C37H49N 5O8S	Unknown		
38.	9,2180	231195,0000	13062953,0000	0,1686%	272,1403	272,1404	C12H21N 4OCl	1-[1-(6-Ethoxy-4-pyrimidinyl)-4-piperidinyl]methanamine hydrochloride (1:1)	Alkaloid	
39.	9,4350	282160,0000	16163821,0000	0,2086%	241,2772	241,2770	C16H35N	1-Hexadecanamine	Senyawa turunan anilin	
40.	9,5490	245996,0000	12740830,0000	0,1645%	809,3684	809,3684	C36H59N O19	Unknown		
						809,3683	CN6O4S5 Cl5Br4	Unknown		
						809,3686	C19H43N 27O10	Unknown		



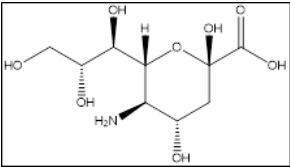
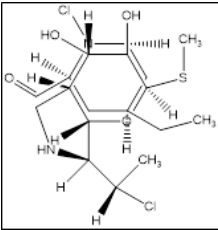
41.	9,7320	58938,00 00	3469489, 0000	0,0448%	287,2827	287,2825	C17H37N O2	2-Amino-2-tetradecyl- 1,3-propanediol	Glikol	
42.	9,9840	215315,0 000	17209324 ,0000	0,2221%	895,4058	895,4059	C62H57N O3S	Unknown		
						895,4058	C54H53N 7O6	Unknown		
43.	10,3840	170582,0 000	8163967, 0000	0,1054%	981,4466	981,4466	C63H59N 5O6	Unknown		
						981,4465	C53H80N 3OSCl5	Unknown		
						981,4467	C46H90N 5SBr3	Unknown		
44.	10,6470	138809,0 000	10713259 ,0000	01383%	218,1673	218,1671	C15H22O	(4R,4aS,6R)-6- Isopropenyl-4,4a- dimethyl-4,4a,5,6,7,8- hexahydro-2(3H)- naphthalenone	Seskuiterpen	
45.	11,0810	186702,0 000	20713898 ,0000	0,2674%	519,3319	519,3322	C29H41N 7O2	3-[(4-Cyclohexyl-1- piperazinyl)(1- cyclohexyl-1H- tetrazol-5-yl)methyl]- 6-ethoxy-2(1H)- quinolinone	Alkaloid	
46.	11,2990	61084,00	3331915,	0,0430%	294,2191	294,2195	C18H30O	(10E,12E)-9-Oxo-	Asam oleat	

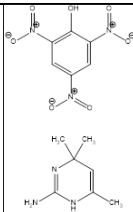
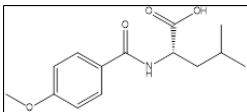
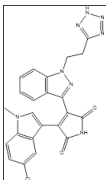
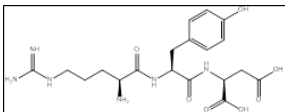
		00	0000				3	10,12-octadecadienoic acid		
47.	11,5620	248526,000	20876012,0000	0,2695%	495,3334	495,3329	C20H41N13S	Unknown		
						495,3332	C21H47N9Cl2	Unknown		
						495,3336	C26H54NOS2Cl	Unknown		
48.	11,7450	525265,000	70217992,0000	0,9064%	300,1349	300,1345	C8H22N8Cl2	2,2'-[(E)-1,2-Diazenediyl]di-1,2-propanediyl]diguanidine dihydrochloride	Alkaloid	
49.	12,1450	414031,000	28913736,0000	0,3732%	319,2149	319,2148	C19H29NO3	N-[2-(2,2-Dimethyltetrahydro-2H-pyran-4-yl)ethyl]-N-(4-methoxybenzyl)acetamide	Turunan <i>p-t</i> -butilkaliks	
50.	12,3280	124302,000	9749649,0000	0,1259%	401,3511			Unknown		
51.	12,4760	72726,000	3743310,0000	0,0483%	283,3241	283,3239	C19H41N	N-Methyl-1-octadecanamine	Alkaloid	
52.	13,0590	102075,000	19353521,0000	0,2498%	607,5553	607,5548	C4H4N4OS2Cl3Br4	Unknown		
						607,5553	C39H69N	Unknown		



							5			
						607,5558	C24H65N 17O	Unknown		
53.	13,2420	168729,0 000	22597902 ,0000	0,2917%	607,5538	607,5540	C38H73N O4	(2R)-N- [(2S,3R,4E,13Z)-1,3- Dihydroxy-4,13- docosadien-2-yl]-2- hydroxyhexadecanami de	Alkaloid	

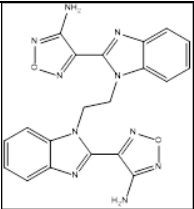
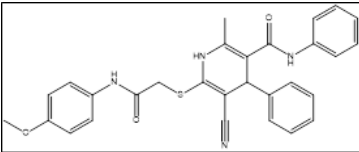
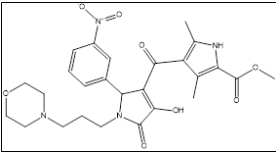
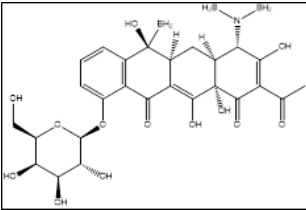
### Lampiran Spektra m/z Senyawa Bagian Batang

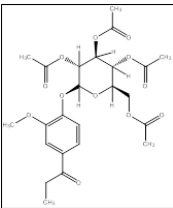
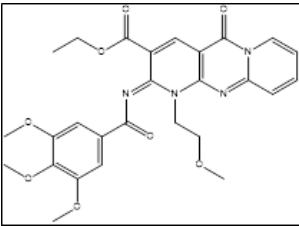
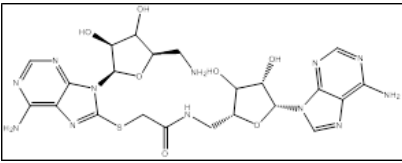
No.	Rt	Tinggi	Area	%Area	Measure d Mass	Calculate d Mass	Rumus Molekul	Nama IUPAC	Golongan Senyawa	Struktur
1.	0,1528	1457,000 0	62494,00 00	0,0007%						
2.	0,2479	2739,000 0	251602,0 000	0,0029%						
3.	0,4785	2150337, 0000	20490376 6,0000	2,3893%						
4.	1,1690	86470,00 00	5911991, 0000	0,0689%	267,0957	267,0954	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>8</sub>	(6R)-5-Amino-3,5-dideoxy-6-[(1R,2R)-1,2,3-trihydroxypropyl]- $\alpha$ -L-threo-hex-2-ulopyranosonic acid	Turunan asam karboksilat	
5.	1,4200	89801,00 00	7655873, 0000	0,0893%	444,1258	444,1253	C <sub>17</sub> H <sub>30</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub> SCl <sub>2</sub>	Methyl (5R)-5-[(1S,2S)-2-chloro-1-({[(2S,4R)-1-chloro-4-ethyl-2-piperidinyl]carbonyl}amino)propyl]-1-thio- $\beta$ -L-arabinopyranoside	Flavonoid	
6.	1,7180	30846,00 00	2189186, 0000	0,0255%	368,1085	368,1081	C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> N <sub>6</sub> O <sub>7</sub>	2,4,6-Trinitrophenol - 4,4,6-trimethyl-1,4-dihydro-2-pyrimidinamine (1:1)	Alkaloid	

										
7.	2,4490	1150315,0000	189628125,0000	2,2112%	265,1315	265,1314	C14H19NO4	N-(4-Methoxybenzoyl)leucine	Asam amino	
8.	2,9180	284095,0000	22624438,0000	0,2638%	472,1168	472,1163	C23H17N8O2Cl	3-(5-Chloro-1-methyl-1H-indol-3-yl)-4-{1-[2-(2H-tetrazol-5-yl)ethyl]-1H-indazol-3-yl}-1H-pyrrole-2,5-dione	Alkaloid	
9.	3,3300	99922,0000	9819632,0000	0,1145%	341,1621	341,1626	C8H24N11SCl	Unknown		
						341,1621	C12H28N3O6S	Unknown		
						341,1624	H20N17O3Cl	Unknown		
10.	3,5130	345328,0000	32448662,0000	0,3784%	452,2015	452,2020	C19H28N6O7	Arginyltyrosylaspartic acid	Asam amino	

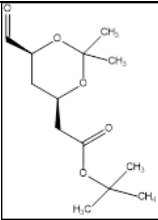
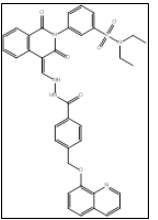
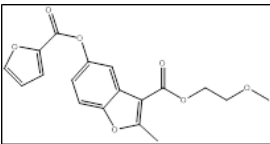
11.	3,6500	278831,0 000	26202660 ,0000	0,3055%	431,2716	431,2713	C15H41N7O3S2	Unknown		
						431,2714	C23H45NS3	Unknown		
						431,2717	C15H33N11O4	Unknown		
12.	3,7980	398453,0 000	27546898 ,0000	0,3212%	475,3006	475,3006	C21H41N5O7	(1S,2S,3R,4S,6R)-4-Amino-3-[[[(2S,3R)-3-amino-6-(aminomethyl)-3,4-dihydro-2H-pyran-2-yl]oxy}-6-(ethylamino)-2-hydroxycyclohexyl 3-deoxy-4-C-methyl-3-(methylamino)-β-L-arabinopyranoside	Flavonoid	
13.	4,0160	480058,0 000	62807543 ,0000	0,7324%	539,2373	539,2377	C12H34N19OBr	Unknown		
						539,2376	C27H41NO6S2	Unknown		
						539,2374	C19H37N7O9S	Unknown		
14.	4,2790	402009,0 000	25047439 ,0000	0,2921%	537,2223	537,2219	C27H39NO6S2	{3-[(4R,5R)-3,3-Dibutyl-7-(dimethylamino)-4-hydroxy-1,1-dioxido-2,3,4,5-tetrahydro-1-benzothiepin-5-yl]phenyl}methanesulfonic acid	Asam sulfonat	
15.	4,4960	535796,0 000	35357895 ,0000	0,4123%	428,1453	428,1458	C20H16N10O2	N-{2-[(3-Phenyl[1,2,4]triazolo[4,3-b]pyridazin-6-yl)oxy]ethyl}-6-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)-3-pyridazinecarboxamide	Alkaloid	
16.	4,6790	456170,0	38869645	0,4532%	542,2000	542,2000	C25H34O13	4,4'-[1,2-	Alkaloid	

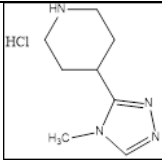
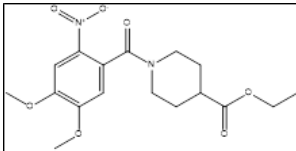
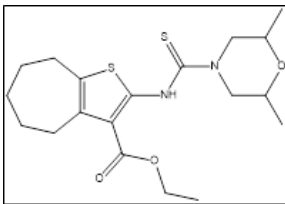


		000	,0000					Ethanediybis(1H-benzimidazole-1,2-diyl)]bis(1,2,5-oxadiazol-3-amine)		
17.	4,8960	316606,0000	57672512,0000	0,6725%	510,1730	510,1726	C29H26N4O3S	5-Cyano-6-({2-[(4-methoxyphenyl)amino]-2-oxoethyl} sulfanyl)-2-methyl-N,4-diphenyl-1,4-dihydro-3-pyridinecarboxamide	Alkaloid	
18.	5,4110	343908,0000	23965387,0000	0,2795%	526,2063	526,2064	C26H30N4O8	Methyl 4-({4-hydroxy-1-[3-(4-morpholinyl)propyl]-2-(3-nitrophenyl)-5-oxo-2,5-dihydro-1H-pyrrol-3-yl} carbonyl)-3,5-dimethyl-1H-pyrrole-2-carboxylate	Asam karboksilat	
19.	5,6280	969036,0000	83694258,0000	0,9759%	606,2064	606,2061	C28H34N2O13	(4S,4aS,5aS,6S,12aS)-4-(Dimethylamino)-10-(β-D-galactopyranosyloxy)-3,6,12,12a-tetrahydroxy-6-methyl-1,11-dioxo-1,4,4a,5,5a,6,11,12a-octahydro-2-tetracenecarboxamide	Ester	

20.	5,7760	1672060,0000	11059007,0000	1,2896%	510,1738	510,1738	C24H30O12	2-Methoxy-4-propionylphenyl 2,3,4,6-tetra-O-acetyl-β-D-glucopyranoside	Methoxyphenols	
21.	5,9940	819833,000	65852961,0000	0,7679%	536,1907	536,1907	C27H28N4O8	Ethyl (2Z)-1-(2-methoxyethyl)-5-oxo-2-[(3,4,5-trimethoxybenzoyl)imino]-1,5-dihydro-2H-dipyrido[1,2-a:2',3'-d]pyrimidine-3-carboxylate	Asam karboksilat	
22.	6,1420	643779,000	75955047,0000	0,8857%	604,1929	604,1925	C22H28N12O7S	2-[6-amino-9-[(2R,3S,5R)-5-(aminomethyl)-3,4-dihydroxy-tetrahydrofuran-2-yl]purin-8-yl]sulfanyln-[[[(2R,4S,5R)-5-(6-aminopurin-9-yl)-3,4-dihydroxy-tetrahydrofuran-2-yl]methyl]acetamide	Alkaloid	
23.	6,4400	1087918,0000	93123141,0000	1,0859%	606,2084	606,2080	C14H26N18O10	Unknown		
						606,2090	C22H30N12O7S	Unknown		
						606,2088	C30H276N10O5	Unknown		

24.	6,6570	2624581,0000	175562188,0000	2,0472%	536,1904	536,1907	C27H28N4O8	Ethyl (2Z)-1-(2-methoxyethyl)-5-oxo-2-[(3,4,5-trimethoxybenzoyl)imino]-1,5-dihydro-2H-dipyrido[1,2-a:2',3'-d]pyrimidine-3-carboxylate	Alkaloid	
25.	6,8400	957890,0000	75173383,0000	0,8766%	832,2913	832,2912	C61H40N2S	Unknown		
						832,2911	C23H44N24O3S4	Unknown		
						832,2914	C38H66N4Cl5Br	Unknown		
26.	7,2060	2038768,0000	156056250,0000	1,8197%	595,2243	595,2238	C24H33N7O11	L-Asparaginyln-L-tyrosyl-L-asparaginyln-L-alanyl-L-aspartic acid	Asam amino	
27.	7,3540	4057536,0000	341727844,0000	3,9848%	595,2263	595,2265	C28H37NO13	(5R)-1,2,3,4,5-Penta-O-acetyl-5-C-[(1S)-2-acetyl-6,7-dimethoxy-1,2,3,4-tetrahydro-1-isoquinolinyl]-D-xylitol	Alkaloid (Isokuiolon)	
28.	7,6400	2342355,0000	226679141,0000	2,6432%	258,1470	258,1467	C13H22O5	2-Methyl-2-propanyl 3,5-dideoxy-2,4-O-isopropylidene-L-	Kumarin	

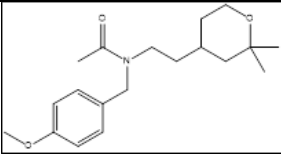
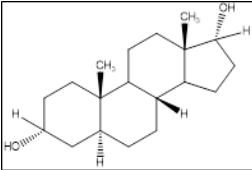
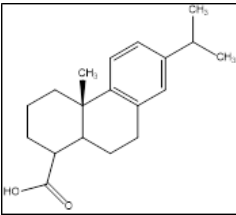
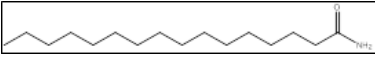
								erythro-hexuronate		
29.	8,0400	319886,0000	12800753,0000	0,1493%	675,2154	675,2152	C37H33N5O6S	3-[(4Z)-1,3-Dioxo-4-[(2-{4-[(8-quinolinylloxy)methyl]benzoyl}hydrazino)methylene]-3,4-dihydro-2(1H)-isoquinolinyl]-N,N-diethylbenzenesulfonamide	Alkaloid	
30.	8,2690	628485,0000	56003039,0000	0,6530%	344,0892	344,0896	C18H16O7	2-Methoxyethyl 5-(2-furoyloxy)-2-methyl-1-benzofuran-3-carboxylate	Asam karboksilat	
31.	8,6350	848186,0000	79515484,0000	0,9272%	687,2545	687,2541	C35H37N5O10	Unknown		
						687,2546	C20H33N17O11	Unknown		
						687,2548	C28H37N11O8S	Unknown		
32.	8,9210	2140814,0000	16510857,0000	1,9253%	202,0986	202,0985	C8H15N4Cl	4-(4-Methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)piperidine hydrochloride (1:1)	Alkaloid	

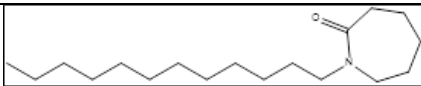
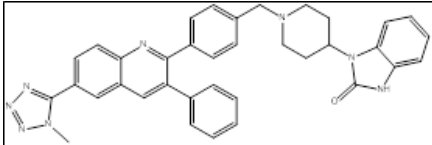
										
33.	9,1040	218884,000	14987778,0000	0,1748%	366,1430	366,1427	C17H22N2O7	Ethyl 1-(4,5-dimethoxy-2-nitrobenzoyl)-4-piperidinecarboxylate	Alkaloid	
34.	9,2860	765340,000	82104984,0000	0,9574%	396,1539	396,1542	C19H28N2O3S2	Ethyl 2-[(2,6-dimethyl-4-morpholinyl)carbonothioyl]amino-5,6,7,8-tetrahydro-4H-cyclohepta[b]thiophene-3-carboxylate	Asam karboksilat	
35.	9,5490	216292,000	9630797,0000	0,1123%	809,3701	809,3702	C28H43N25O3S	Unknown		
						809,3700	C20H39N31O6	Unknown		
						809,3701	C23H60N19O4S2Br	Unknown		
36.	9,6870	330380,000	29347107,0000	0,3422%	391,2358	391,2359	C22H33NO5	(1aR,2S,5aR,6aR,9aR,9bS)-9-(1,4-Dioxo-8-azaspiro[4.5]dec-8-ylmethyl)-2,5a-dimethyloctahydro-2H-oxireno[4,4a]naphtho[2,3	Asam organik	

								-b]furan-8(9H)-one			
37.	9,8350	120202,0000	9183114,0000	0,1071%	492,2722	492,2723	C27H41O8	(3 $\alpha$ ,5 $\beta$ ,7 $\alpha$ ,12 $\alpha$ )-3,7,12-Tris(formyloxy)cholan-24-oic acid	Asam organik		
38.	10,1320	1240621,0000	99925109,0000	1,1652%	410,1714	410,1716	C21H18N10	1-(1H-Benzotriazol-1-yl)-N,N-bis(1H-benzotriazol-1-ylmethyl)methanamine	Alkaloid		
39.	10,3500	611985,0000	89370133,0000	1,0421%	276,2089	276,2089	C18H28O2	12-Phenyldodecanoic acid	Asam karboksilat		
40.	10,6010	1359512,0000	17562228	2,0479%	298,1927	298,1924	C15H27N4Cl	1-[(5-Chloro-3-ethyl-1-methyl-1H-pyrazol-4-	Alkaloid		



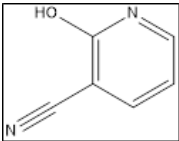
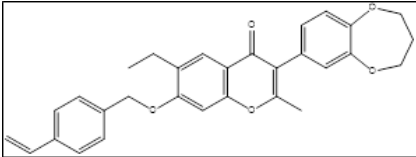
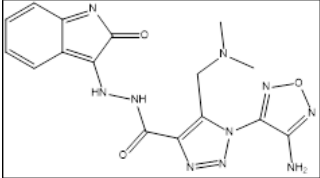
			1,0000					yl)methyl]-N,N-dimethyl-4-azepanamine		
41.	11,0810	1718123,0000	129261789,0000	1,5073%	519,3334	519,3329	C7H37N25OS	Unknown		
						519,3332	C23H47N9Cl2	Unknown		
						519,3334	C7H38N25OS	Unknown		
42.	11,2990	658254,0000	36206520,0000	0,4222%	276,2106			Unknown		
43.	11,5160	7672921,0000	476458469,0000	5,5558%	431,2668	431,2672	C25H37NO5	N-[(3-{2-[(1S,5S,8aR)-5-(Methoxycarbonyl)-5,8a-dimethyl-2-methylenedecahydro-1-naphthalenyl]ethyl}-2-furyl)methyl]alanine	Asam amino	
44.	11,7450	4508830,0000	310886563,0000	3,6251%	433,2827	433,2828	C25H39NO5	2-[3-(2,2-Dimethyltetrahydro-2H-pyran-4-yl)-6-methylheptyl]isoindoline ethanedioate (1:1)	Alkaloid (indol)	
45.	11,8820	438361,0000	35096879,0000	0,4093%	521,3471	521,3470	C24H44N11Cl	Unknown		
						521,3472	C21H47N9O4S	Unknown		
						521,3474	C29H51N3OS2	Unknown		
46.	12,1790	564684,0	88131406	1,0277%	319,2149	319,2148	C19H29NO3	N-[2-(2,2-Dimethyltetrahydro-2H-	Amina	

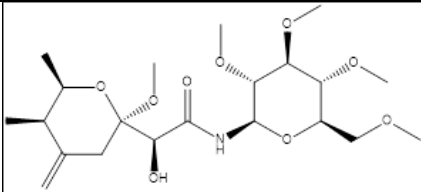
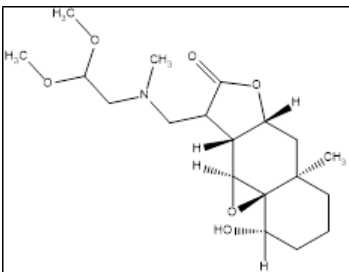
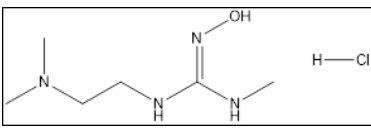
		000	,0000					pyran-4-yl)ethyl]-N-(4-methoxybenzyl)acetamide		
47.	12,5110	879418,000	62306016,0000	0,7265%	323,2834	323,2831	C13H37N7S	Unknown		
48.	12,6940	127957,000	7971097,0000	0,0929%	292,2402	292,2403	C19H32O2	(3 $\alpha$ ,5 $\alpha$ ,9 $\xi$ ,14 $\xi$ ,17 $\alpha$ )-Androstane-3,17-diol	Amina	
49.	12,8420	431193,000	45724719,0000	0,5332%	341,3287			Unknown		
50.	13,0940	763735,000	79917711,0000	0,9319%	300,2095	300,2090	C20H28O2	(5 $\xi$ )-Abieta-8,11,13-trien-18-oic acid	Asam organik	
51.	13,5280	469111,000	34237059,0000	0,3992%	255,2565	255,2562	C16H33NO	Palmitamide	Alkaloid	
52.	13,8250	4339359,	313960469,0000	3,6610%	281,2719	281,2719	C18H35NO	1-Dodecyl-2-azepanone		

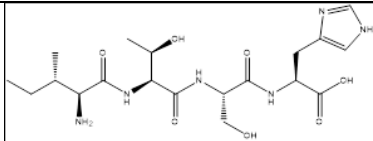
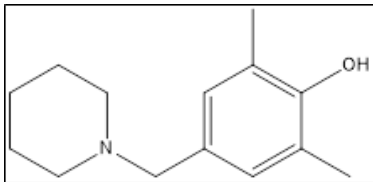
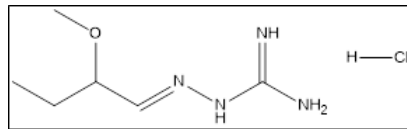
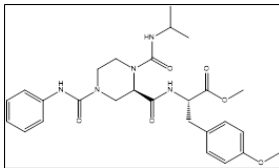
		0000								
53.	14,1910	4439759,0000	28641284,4,0000	3,3398%	592,2695	592,2699	C36H32N8O	1-(1-{4-[6-(1-Methyl-1H-tetrazol-5-yl)-3-phenyl-2-quinoliny]benzyl}-4-piperidinyl)-1,3-dihydro-2H-benzimidazol-2-one	Alkaloid	



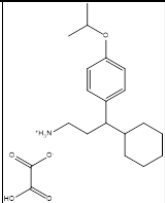
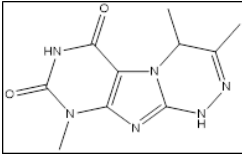
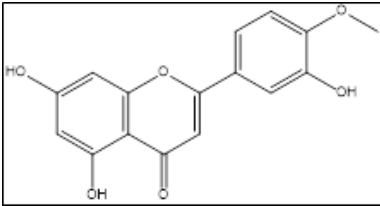
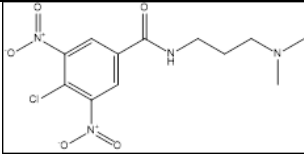
Lampiran Spektra m/z Senyawa Bagian Daun

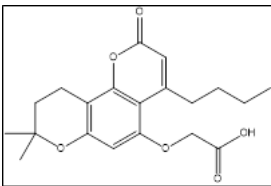
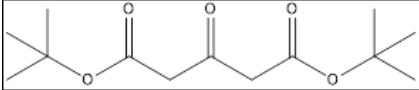
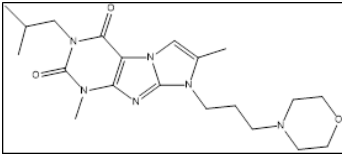
No.	Rt	Tinggi	Area	%Area	Measured Mass	Calculated Mass	Rumus Molekul	Nama IUPAC	Golongan Senyawa	Struktur
1.	2,0840	8267,0000	3497790,0000	0,0505%	120,0317			Unknown		
2.	2,4150	9110,0000	2442131,0000	0,0353%	120,0323	120,0324	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	2-hydroxynicotinonitrile		
3.	2,9180	127068,0000	10441742,0000	0,1509%	468,1938	468,1937	C <sub>30</sub> H <sub>28</sub> O <sub>5</sub>	3-(3,4-Dihydro-2H-1,5-benzodioxepin-7-yl)-6-ethyl-2-methyl-7-[(4-vinylbenzyl)oxy]-4H-chromen-4-one	Stirena	
4.	3,1810	202441,0000	22606064,0000	0,3267%	396,1405	396,1407	C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> N <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	1-(4-Amino-1,2,5-oxadiazol-3-yl)-5-[(dimethylamino)methyl]-N'-(2-oxo-2H-indol-3-yl)-1H-1,2,3-triazole-4-carbohydrazide	Aldehid	
5.	3,5130	2859251,0000	33493134,0000	4,8403%	447,2474	447,2469	C <sub>21</sub> H <sub>37</sub> N <sub>9</sub> O	(2S)-2-Hydroxy-2-[(2R,5R,6R)-2-methoxy-5,6-dimethyl-4-methylenetetrahydro-2H-pyran-2-yl]-N-	Kuinazolinon	

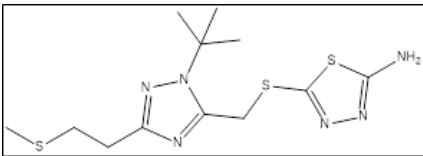
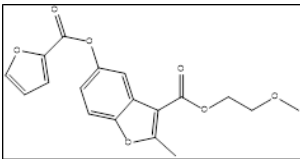
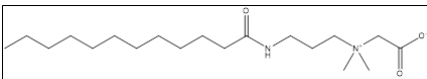
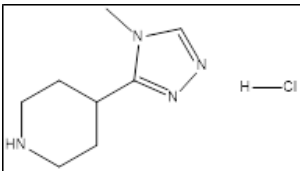
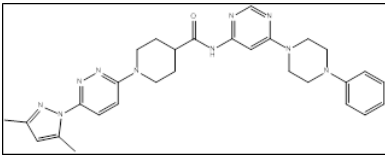
								[(2R,3R,4S,5R,6R)-3,4,5-trimethoxy-6-(methoxymethyl)tetrahydro-2H-pyran-2-yl]acetamide		
6.	3,8330	376044,000	55788645,0000	0,8062%	475,2990	475,2993	C20H45NO11	Unknown		
7.	3,9470	282682,000	20060621,0000	0,2899%	519,3250	519,3252	C22H49NO12	Unknown		
8.	4,0960	415419,000	36780449,0000	0,5315%	367,2344	367,2359	C20H33NO5	(1aR,2S,5aR,6aR,9aR,9bS)-9-[[[(2,2-Dimethoxyethyl)(methyl)amino]methyl]-2,5a-dimethyloctahydro-2H-oxireno[4,4a]naphtho[2,3-b]furan-8(9H)-one	Aldehyd	
9.	4,3470	530275,000	34420723,0000	0,4974%	196,1094	196,1091	C6H17N4OCl	1-[2-(Dimethylamino)ethyl]-2-hydroxy-3-methylguanidine hydrochloride (1:1)	Alkaloid	
10.	4,4960	300146,000	17127258,0000	0,2475%	456,2335	456,2333	C19H32N6O7	Isoleucylthreonylserylhistidine		


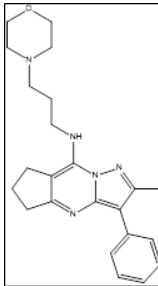
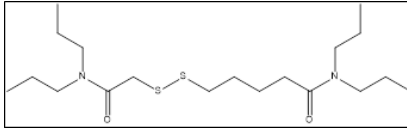
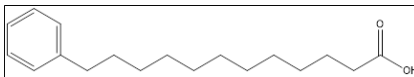
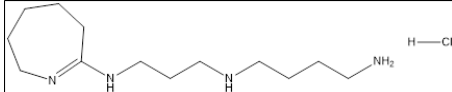
										
11.	4,7130	445024,000	36994055,0000	0,5346%	219,1625	220,1701	C14H21NO	2,6-Dimethyl-4-(1-piperidinylmethyl)phenol	Alkaloid	
12.	4,8270	455783,000	60561238,0000	0,8752%	194,0936	194,0935	C6H15N4OCl	(2E)-2-(2-Methoxybutylidene)hydrazinecarboximidamide hydrochloride (1:1)	Isoeugenol	
13.	5,0790	348216,000	50662949,0000	0,7322%	396,1776	396,1778	C10H20N16S	Unknown		
						396,1776	C15H29N4O6Cl	Unknown		
14.	5,3760	575146,000	36959848,0000	0,5341%	525,2583	525,2588	C27H35N5O6	Methyl N-{[(2R)-1-(isopropylcarbonyl)-4-(phenylcarbonyl)-2-piperazinyl]carbonyl}-O-methyl-L-tyrosinate	Alkaloid	
15.	5,5590	1965152,	14327939	2,0706%	365,2200	365,2202	C20H31NO5	3-Cyclohexyl-3-(4-	Senyawa	

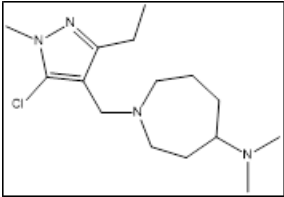
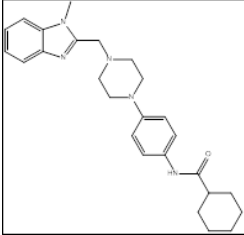
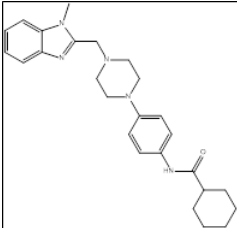


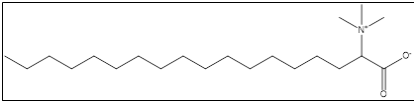
		0000	1,0000					isopropoxyphenyl)-1-propanaminium hydrogen oxalate	hidrogen	
16.	5,8110	353104,000	33229383,0000	0,4802%	438,2215	438,2216	C22H43S3Cl	Unknown		
						438,2219	C14H31N10O4Cl	Unknown		
17.	5,9590	73316,000	5151269,0000	0,0744%	248,1018	248,1022	C10H12N6O2	3,4,9-Trimethyl-1,4-dihydro[1,2,4]triazino[3,4-f]purine-6,8(7H,9H)-dione	Alkaloid	
18.	6,2910	621652,000	47261719,0000	0,6830%	300,0636	300,0634	C16H12O6	5,7-Dihydroxy-2-(3-hydroxy-4-methoxyphenyl)-4H-chromen-4-one	Kuinazonon	
19.	6,3940	1916869,0000	101736891,0000	1,4703%	330,0729	330,0731	C12H15N4O5Cl	4-Chloro-N-[3-(dimethylamino)propyl]-3,5-dinitrobenzamide	Polisakarida	
20.	6,6570	655940,000	43129309,0000	0,6233%	360,0820	360,0820	C3H19N12O2Cl3	Unknown		

						360,0823	C10H9N14Cl	Unknown		
						360,0821	C7H20N8O3S3	Unknown		
21.	6,7600	719255,0 000	36207520 ,0000	0,5233%	477,2323	477,2323	C20H35N3O10	Unknown		
						477,2325	C24H44NS3Cl	Unknown		
						477,2322	C13H40N11OSBr	Unknown		
22.	6,8740	206624,0 000	20285768 ,0000	0,2932%	350,2077	350,2073	C9H26N12OS	Unknown		
						350,2072	CH22N18O4	Unknown		
23.	7,2400	1330314, 0000	74017711 ,0000	1,0697%	228,1167			Unknown		
24.	7,3890	458558,0 000	23455244 ,0000	0,3390%	360,1572	360,1573	C20H24O6	[(4-Butyl-8,8-dimethyl-2-oxo-9,10-dihydro-2H,8H-pyrano[2,3-f]chromen-5-yl)oxy]acetic acid	Asam asetat	
25.	7,6400	2310782, 0000	22526093 8,0000	3,2554%	258,1464	258,1467	C13H22O5	Bis(2-methyl-2-propanyl) 3-oxopentanedioate		
26.	7,9030	619465,0 000	29699785 ,0000	0,4292%	402,2377	402,2380	C20H30N6O3	3-Isobutyl-1,7-dimethyl-8-[3-(4-morpholinyl)propyl]-1H-imidazo[2,1-f]purine-2,4(3H,8H)-dione	Alkaloid	

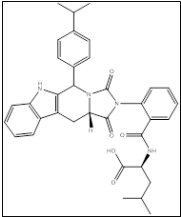
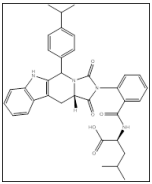
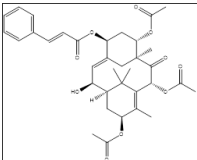
27.	8,0860	603769,0000	43459313,0000	0,6281%	344,0912	344,0912	C12H20N6S3	5-[(1-(2-Methyl-2-propanyl)-3-[2-(methylsulfanyl)ethyl]-1H-1,2,4-triazol-5-yl)methyl)sulfanyl]-1,3,4-thiadiazol-2-amine	Alkaloid	
28.	8,2690	2577546,0000	169981500,0000	2,4565%	344,0896	344,0896	C18H16O7	2-Methoxyethyl 5-(2-furoyloxy)-2-methyl-1-benzofuran-3-carboxylate	Asam karboksilat	
29.	8,6690	598813,0000	44602555,0000	0,6446%	342,2883	342,2883	C19H38N2O3	{[3-(Dodecanoylamino)propyl](dimethyl)ammonio}acetate	Asam aseta	
30.	8,9210	384353,0000	37723961,0000	0,5452%	202,0987	202,0985	C8H15N4Cl	4-(4-Methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)piperidine hydrochloride (1:1)	Alkaloid	
31.	9,1840	445007,0000	39057309,0000	0,5644%	538,2915	538,2917	C29H34N10O	1-[6-(3,5-Dimethyl-1H-pyrazol-1-yl)-3-pyridazinyl]-N-[6-(4-phenyl-1-piperazinyl)-4-pyrimidinyl]-4-piperidinecarboxamide	Alkaloid	
32.	9,4690	200584,0	23110818	0,3340%	241,2772	241,2770	C16H35N	1-Hexadecanamine	Triterpenoid	

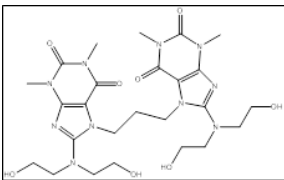
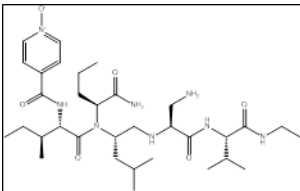
		000	,0000							
33.	9,6870	565462,000	33076469,0000	0,4780%	391,2371	391,2372	C23H29N5O	2-Methyl-N-[3-(4-morpholinyl)propyl]-3-phenyl-6,7-dihydro-5H-cyclopenta[d]pyrazolo[1,5-a]pyrimidin-8-amine	Alkaloid	
34.	9,8700	121471,000	7085604,0000	0,1024%	390,2373	390,2375	C19H38N2O2S2	2,2'-(1,3-Propanediyl)disulfanediyl)bis(N,N-dipropylacetamide)		
35.	10,0980	162953,000	23427779,0000	0,3386%	895,4011	895,4011	C14H51N39OClBr	Unknown		
						895,4012	C7H2919SBr6	Unknown		
36.	10,3500	1153869,0000	78825523,0000	1,1392%	276,2092	276,2090	C18H28O2	12-Phenyldodecanoic acid		
37.	10,4640	1116620,0000	91230789,0000	1,3184%	276,2083	276,2081	C13H29N4Cl	N-[3-(3,4,5,6-Tetrahydro-2H-azepin-7-ylamino)propyl]-1,4-	Alkaloid	

								butanediamine hydrochloride (1:1)		
38.	10,6010	507582,0000	43269582,0000	0,6253%	298,1922	298,1924	C15H27N4Cl	1-[(5-Chloro-3-ethyl-1-methyl-1H-pyrazol-4-yl)methyl]-N,N-dimethyl-4-azepanamine	Alkaloid	
39.	11,0810	193558,0000	21892938,0000	0,3164%	536,2739	536,2734	C27H40N2O9	[4-(Allyloxy)-3,5-dipropylphenyl](4-methyl-1-piperazinyl)methanone 2-hydroxy-1,2,3-propanetricarboxylate (1:1)	Alkaloid	
40.	11,2300	239562,0000	13019631,0000	0,1882%	789,5006	789,5006	C13H8O3S3Cl7Br3	Unknown		
						789,5005	C23H51N33	Unknown		
41.	11,5160	3243375,0000	262092859,0000	3,7877%	431,2688	431,2685	C26H33N5O	N-(4-{4-[(1-Methyl-1H-benzimidazol-2-yl)methyl]-1-piperazinyl}phenyl)cyclohexanecarboxamide	Alkaloid	

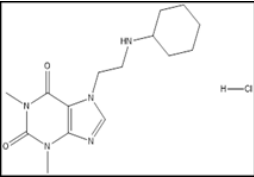
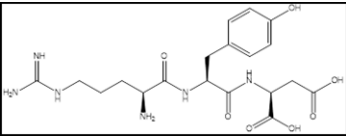
42.	11,745 0	1868621, 0000	11096535 9,0000	1,6036%	433,2836	433,2835	C18H39N7O3S	Unknown		
						433,2837	C26H43NS2	Unknown		
						433,2834	C10H35N13O6	Unknown		
43.	12,179 0	145064,0 000	13876198 ,0000	0,2005%	781,5626	781,5625	C40H71N13OS	Unknown		
						781,5625	C25H75N21OS3	Unknown		
						781,5627	C6H3N12O3Cl5Br 4	Unknown		
44.	12,396 0	91645,00 00	18259652 ,0000	0,2639%	781,5628	781,5627	C17H63N31O5	Unknown		
						781,5628	C10H4N8O4S3Cl2 Br4	Unknown		
45.	12,842 0	416123,0 000	57266633 ,0000	0,8276%	341,3294	341,3294	C21H43NO2	2- (Trimethylammonio)octade canoate	Asam organik	
46.	13,094 0	680001,0 000	81632305 ,0000	1,1797%	781,5637	781,5637	C35H75N9O10	Unknown		
						781,5636	C11H2N8O5Cl4Br 4	Unknown		
47.	13,391 0	707243,0 000	16824257 8,0000	2,4314%	781,5623	781,5624	C32H67N19O4	Unknown		
						781,5623	C8HO21S6Br2	Unknown		
						781,5622	C22H8OS2ClBr5	Unknown		
48.	13,894	1096315,	29530162	4,2676%	781,5608	781,5609	C6H59N43OS	Unknown		

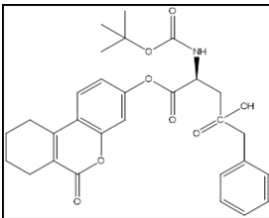
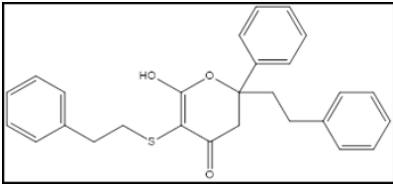


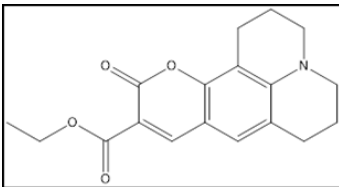
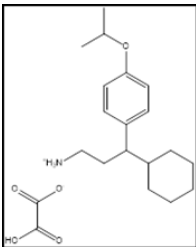
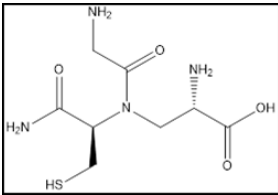
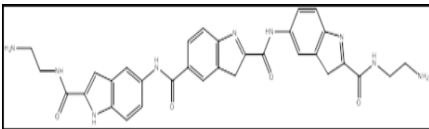
	0	0000	5,0000							
						781,5608	C39H83N5O4S3	Unknown		
						781,5607	C2H7N6O15SBr5	Unknown		
49.	14,1910	7091046,0000	466464438,0000	6,7412%	592,2686	592,2686	C35H36N4O5	N-{2-[(11aS)-5-(4-Isopropylphenyl)-1,3-dioxo-5,6,11,11a-tetrahydro-1H-imidazo[1',5':1,6]pyrido[3,4-b]indol-2(3H)-yl]benzoyl}-L-leucine	Flavonoid	
50.	14,4090	1812142,0000	93134055,0000	1,3459%	592,2697	592,2699	C36H32N8O	1-(1-{4-[6-(1-Methyl-1H-tetrazol-5-yl)-3-phenyl-2-quinolinyl]benzyl}-4-piperidinyl)-1,3-dihydro-2H-benzimidazol-2-one	Alkaloid	
51.	14,6260	69675,0000	6048954,0000	0,0874%	781,5621	781,5620	C55H75NS	Unknown		
						781,5621	C40H79N9S3	Unknown		
						781,5622	C6H3N6O13S2ClBr4	Unknown		
52.	14,8890	242278,0000	11809739,0000	0,1707%	622,2783	622,2778	C35H42O10	(1R,2S,3E,5S,7S,8S,10R,13S)-7,10,13-Triacetoxy-2-hydroxy-8,12,15,15-tetramethyl-9-oxotricyclo[9.3.1.1 <sup>4,8</sup> ]hexadeca-3,11-dien-5-yl (2E)-3-		

								phenylacrylate		
53.	15,255 0	4162515, 0000	34942956 3,0000	5,0498%	606,2875	606,2874	C25H38N10O8	7,7'-(1,3-Propandiyl)bis{8-[bis(2-hydroxyethyl)amino]-1,3-dimethyl-3,7-dihydro-1H-purin-2,6-dion}	Alkaloid	
54.	15,540 0	917568,0 000	17530945 3,0000	2,5335%	662,4482	662,4480	C33H58N8O6	N-(1-Oxidoisonicotinoyl)-L-isoleucyl-N-[(2S)-1-{{[(2S)-3-amino-1-{{[(2S)-1-(ethylamino)-3-methyl-1-oxo-2-butanyl]amino}-1-oxo-2-propanyl]amino}-4-methyl-2-pentanyl]-L-norvalinamide	Asam amino	

Lampiran Spektra m/z Senyawa Bagian Biji

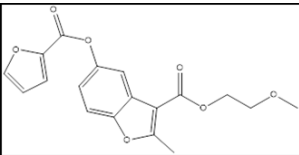
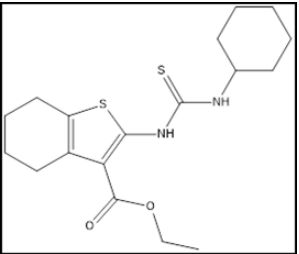
No.	Rt	Tinggi	Area	% Area	Measured Mass	Calculated Mass	Rumus Formula	Nama IUPAC	Golongan Senyawa	Struktur
1.	0,1528	6356,0000	1010211,0000	0,0073%	-	-	-	-	-	-
2.	0,3514	3166,0000	224471,0000	0,0016%	-	-	-	-	-	-
3.	0,4785	1832714,0000	303230656,0000	2,1916%	-	-	-	-	-	-
4.	2,4490	10956192,0000	3126689000,0000	22,5986%	265,1307	265,1306	Unknown	-	-	-
5.	3,3300	490925,0000	31382709,0000	0,2268%	341,1621	341,1619	C15H24N5O2Cl	7-[2-(Cyclohexylamino)ethyl]-1,3-dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione hydrochloride (1:1)	Alkaloid	
6.	3,5130	749868,0000	73955891,0000	0,5345%	452,2017	452,2020	C19H28N6O7	Arginyltyrosylaspartic acid		
7.	3,6960	182012,0000	18193988,0000	0,1315%	431,2717	431,2717	C15H33N11O4	Unknown		
						431,2719	C23H37N5OS	Unknown		
						431,2722	C24H43NOCl2	Unknown		
8.	3,7990	341702,0	2093840	0,1513%	475,2980	475,2975	C17H45N7O4S2	Unknown		

		000	0,0000							
						475,2979	C17H37N11O5	Unknown		
						475,2984	C26H47NO2Cl2	Unknown		
9.	3,9470	209448,000	13671265,0000	0,0988%	519,3239	519,3235	C22H46N9OSCl	Unknown		
						519,3237	C19H49N7O5S2	Unknown		
						519,3242	C19H41N11O6	Unknown		
10.	4,2790	550068,000	99035000,0000	0,7158%	521,2053	521,2050	C29H31NO8	4-Benzyl 1-(6-oxo-7,8,9,10-tetrahydro-6H-benzo[c]chromen-3-yl) N-[[[(2-methyl-2-propanyl)oxy]carbonyl]-L-aspartate	Steroid	
11.	4,5650	34092,000	1472671,0000	0,0106%	430,1608	430,1603	C27H26O3S	6-Hydroxy-2-phenyl-2-(2-phenylethyl)-5-[(2-phenylethyl)sulfanyl]-2,3-dihydro-4H-pyran-4-one		
12.	4,7930	602814,000	61294980,0000	0,4430%	337,1320	337,1315	C5H23N9O4S2	Unknown		
						337,1316	C9H26N7Cl3	Unknown		
						337,1319	C5H15N13O5	Unknown		

13.	5,1590	256556,0000	23342971,0000	0,1687%	313,1314	313,1314	C18H19NO4	Ethyl 11-oxo-2,3,6,7-tetrahydro-1H,5H,11H-pyrano[2,3-f]pyrido[3,2,1-ij]quinoline-10-carboxylate	Alkaloid	
14.	5,5590	249276,0000	23288227,0000	0,1683%	365,2200	365,2202	C20H31NO5	3-Cyclohexyl-3-(4-isopropoxyphenyl)-1-propanaminium hydrogen oxalate	Asam organik	
15.	5,9250	196340,0000	12541647,0000	0,0906%	264,0893	264,0893	C8H16N4O4S	Glycyl-N-[(2S)-2-amino-2-carboxyethyl]-L-cysteinamide	Asam amino	
16.	6,1080	189485,0000	13487543,0000	0,0975%	605,2499	605,2499	C32H31N9O4	N <sup>5</sup> -{2-[(2-Aminoethyl)carbamoyl]-1H-indol-5-yl}-N <sup>2</sup> -{2-[(2-aminoethyl)carbamoyl]-3H-indol-5-yl}-3H-indole-2,5-	Alkaloid	

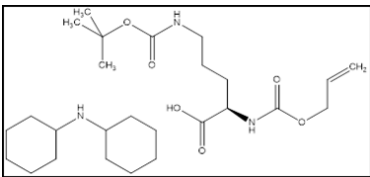
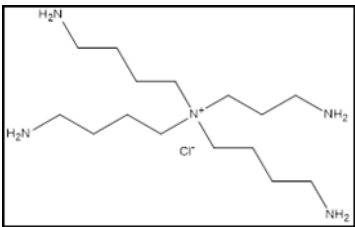
								dicarboxamide		
17.	6,3940	2154381,0000	112917188,0000	0,8161%	330,0725	330,0720	C6H10N12O3S	Unknown		
						330,0726	C14H6N10O	Unknown		
						330,0723	C7H16N8O3Cl2	Unknown		
18.	6,5770	908562,000	82812992,0000	0,5985%	307,2153	307,2148	C18H29NO3	(1Z)-N-(4-Hydroxy-3-methoxybenzyl)-8-methylnonanimidic acid	Asam organik	
19.	6,8740	39663,000	3990734,0000	0,0288%	350,2057	350,2058	C15H30N2O7	Methyl (2R,3S,4S,5S)-6-[(8-aminooctyl)amino]-2,3,4,5-tetrahydroxy-6-oxohexanoate	Asam amino	
20.	7,2400	501284,000	23120992,0000	0,1671%	228,1157	228,1157	C8H16N6S	3-[Ethyl(1-methyl-1H-tetrazol-5-yl)amino]-2-methylpropanethioamide	Asam amino	
21.	7,3540	722215,000	38355016,0000	0,2772%	352,2231	352,2228	CH24N18O4	Unknown		

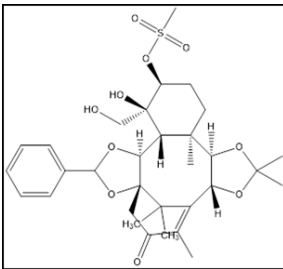
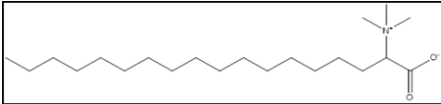
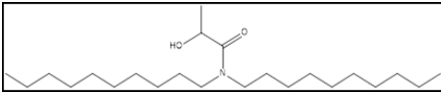


						352,2230	C9H28N12OS	Unknown		
22.	7,6060	2299149,0000	248303125,0000	1,7946%	258,1461	258,1459	C8H23N4O3Cl	Unknown		
23.	8,0860	826214,000	38701531,0000	0,2797%	344,0899	344,0896	C18H16O7	2-Methoxyethyl 5-(2-furoxyloxy)-2-methyl-1-benzofuran-3-carboxylate	Asam karboksilat	
24.	8,2690	4519570,0000	259292922,0000	1,8741%				Unknown		
25.	8,6690	701416,000	66177125,0000	0,4783%	342,2894			Unknown		
26.	9,1040	277416,000	36846324,0000	0,2663%	366,1433	366,1436	C18H26N2O2S2	Ethyl 2-[(cyclohexylcarbamothioyl)amino]-4,5,6,7-tetrahydro-1-benzothiophene-3-carboxylate	Asam karboksilat	

27.	9,3210	1264753,0000	128491406,0000	0,9287%	444,2041	444,2041	C22H29N6O2Cl	7-Butyl-8-{{[4-(3-chlorophenyl)-1-piperazinyl]methyl}-1,3-dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione}	Alkaloid	
28.	9,5490	192712,0000	15838650,0000	0,1145%	809,3707	809,3708	C38H51N9O11	1-(α-D-Allopyranosyl)-N-(2-{{[3-(dimethylamino)propyl]carbamoyl}-1-methyl-1H-imidazol-4-yl)-4-[(4-{{[(11aR)-7-methoxy-5-oxo-2,3,5,11a-tetrahydro-1H-pyrrolo[2,1-c][1,4]benzodiazepin-8-yl]oxy}butanoyl)amino]-1H-pyrrole-2-carboxamide	Alkaloid	
29.	9,8010	379706,0000	39589051,0000	0,2861%	336,2287	336,2281	C9H28N12S	Unknown		
						336,2292	C15H33N4O2Cl	Unknown		

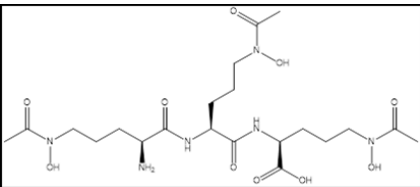
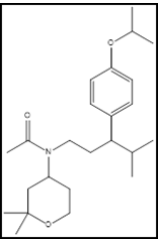
30.	10,133 0	1425319, 0000	1069388 75,0000	0,7729%	410,1693	410,1689	C19H26N2O8	4-(2-Methyl-2-propanyl)-1-(4-nitrophenyl) N-[[ (2-methyl-2-propanyl)oxy]carbonyl]-L-aspartate	Asam organik	
31.	10,533 0	470127,0 000	1082699 69,0000	0,7825%	506,2226	506,2221	C11H32N16O3Cl 2	Unknown		
						506,2224	C18H22N18O	Unknown		
						506,2231	C13H34N10O9S	Unknown		
32.	10,864 0	1001510, 0000	5388735 9,0000	0,3895%	519,3322	519,3322	C29H41N7O2	3-[(4-Cyclohexyl-1-piperazinyl)(1-cyclohexyl-1H-tetrazol-5-yl)methyl]-6-ethoxy-2(1H)-quinolinone	Alkaloid	
33.	11,081 0	5411427, 0000	4539701 56,0000	3,2811%	519,3329	519,3327	C14H37N19O3	Unknown		
						519,3329	C22H41N13S	Unknown		
						519,3334	C20H50N7O4SCl	Unknown		
34.	11,299 0	658989,0 000	5502587 9,0000	0,3977%	276,2089	276,2090	C18H28O2	12-Phenyl dodecanoic acid	Terpenoid	

35.	11,596 0	2225440, 0000	2667104 69,0000	1,9277%	495,3313	495,3309	C26H45N3O6	N <sup>2</sup> - [(Allyloxy)carbonyl]- N <sup>5</sup> -{[(2-methyl-2- propanyl)oxy]carbonyl }-D-ornithine - N- cyclohexylcyclohexana mine (1:1)	Flavonoid	
36.	11,745 0	1561832, 0000	1046213 91,0000	0,7562%	461,3053	461,3048	C14H35N15O3	Unknown		
						461,3052	C23H45N5Cl2	Unknown		
						461,3054	C7H35N21OS	Unknown		
37.	11,928 0	1260312 1,0000	6256293 75,0000	4,5218%	521,3486	521,3484	C14H39N19O3	Unknown		
						521,3487	C22H43N13S	Unknown		
						521,3488	C23H49N9Cl2	Unknown		
38.	12,248 0	1288251 5,0000	6408606 88,0000	4,6319%	365,3274			Unknown		
39.	12,511 0	367512,0 000	2249886 7,0000	0,1626%	323,2819	323,2816	C15H38N5Cl	4-Amino-N,N-bis(4- aminobutyl)-N-(3- aminopropyl)-1- butanaminium chloride	Asam amino	

40.	12,659 0	378563,0 000	2217427 5,0000	0,1603%	606,2504	606,2499	C31H42O10S	(1S,5S,6R,7S,8S,11R,12R,16R)-7-Hydroxy-7-(hydroxymethyl)-11,14,14,18,21,21-hexamethyl-19-oxo-3-phenyl-2,4,13,15-tetraoxapentacyclo[15.3.1.0 <sup>1,5</sup> .0 <sup>6,11</sup> .0 <sup>12,16</sup> ]phenicos-17-en-8-yl methanesulfonate	Flavonoid	
41.	12,842 0	3068596, 0000	2004822 03,0000	1,4490%	341,3298	341,3294	C21H43NO2	2-(Trimethylammonio)octadecanoate	Asam organik	
42.	13,094 0	2503613 2,0000	1275058 500,0000	9,2157%	367,3446	367,3451	C23H45NO2	N,N-Didecyl-2-hydroxypropanamide	Eter	
43.	13,425 0	267973,0 000	2482272 7,0000	0,1794%	781,5645	781,5645	C51H75NO5	Unknown		
						781,5646	C9N4O13S6Cl4Br	Unknown		
						781,5647	C12H10I7S4Br3	Unknown		
44.	13,574 0	1172416, 0000	5688289 5,0000	0,4111%	608,2642	608,2637	H29N32O6Cl	Unknown		
						608,2639	C36H48S4	Unknown		

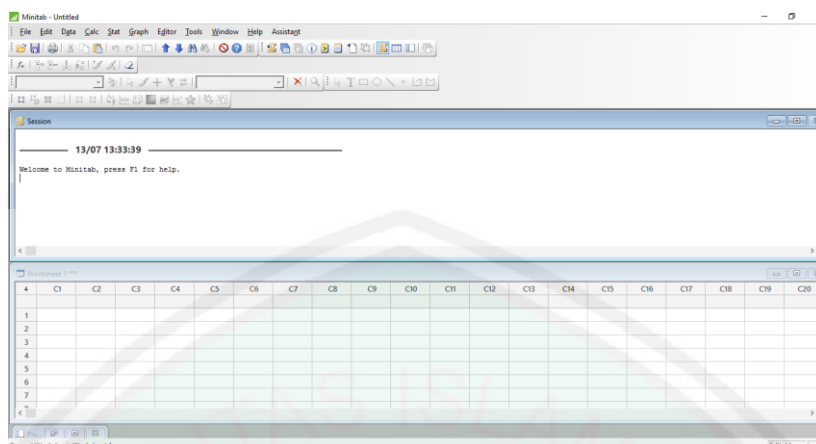
45.	13,894 0	3063194, 0000	2387163 59,0000	1,7254%	608,2648	608,2648	C36H32N8O2	N,N'-Bis[2-(9-acridinylamino)ethyl]-1-methyl-1H-pyrazole-3,5-dicarboxamide		
46.	14,008 0	1927843, 0000	9448193 0,0000	0,6829%	369,3602	369,3607	C23H47NO2	N,N-Didecyl-2-hydroxypropanamide	Polisakarida	
47.	14,191 0	1775445 0,0000	7811403 13,0000	5,6458%	592,2662	592,2659	C31H32N10O3	4-[(4-[3-Ethyl-7-(4-morpholinyl)-3H-[1,2,3]triazolo[4,5-d]pyrimidin-5-yl]phenyl} carbamoyl)amino]-N-[2-(2-pyridinyl)ethyl]benzamide	Alkaloid	
48.	14,409 0	4040625, 0000	2290961 72,0000	1,6558%	592,2708	592,2704	C34H41N2O5Cl	3-[(Methyl{3-[(4-oxo-2-phenyl-4H-chromen-7-yl)oxy]propyl}amino)methyl]phenyl heptylcarbamate hydrochloride (1:1)	Asam amino	



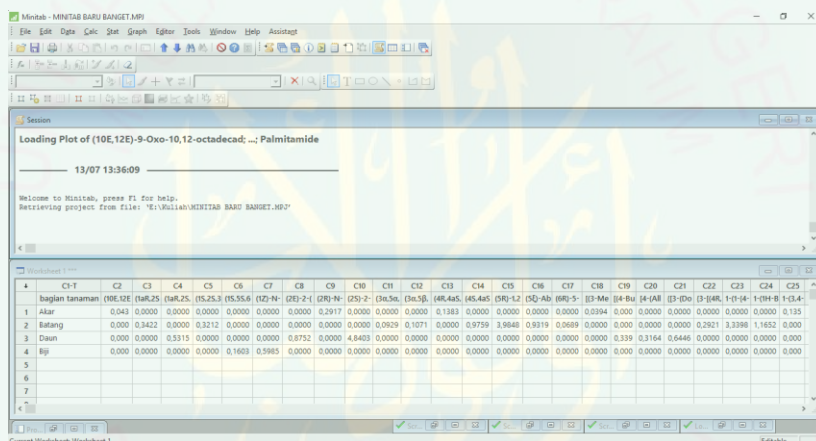
49.	14,591 0	2093114, 0000	1441511 88,0000	1,0419%	534,2650	534,2650	C21H38N6O10	N <sup>5</sup> -Acetyl-N <sup>5</sup> -hydroxy- L-ornithyl-N <sup>5</sup> -acetyl- N <sup>5</sup> -hydroxy-L-ornithyl- N <sup>5</sup> -acetyl-N <sup>5</sup> -hydroxy- L-ornithin	Amino non-esensial	
50.	14,740 0	289361,0 000	1193486 7,0000	0,0863%	875,7935	875,7935	C23H36N2O3SCl 4Br4	Unknown		
							C21H9N6O19S6 Cl	Unknown		
							C21H11N8O14S Cl7	Unknown		
51.	15,037 0	3194784, 0000	2401765 94,0000	1,7359%	389,2929	389,2930	C24H39NO3	N-(2,2- Dimethyltetrahydro- 2H-pyran-4-yl)-N-[3- (4-isopropoxyphenyl)- 4- methylpentyl]acetamid e	Steroid	

## Lampiran 5 Analisis Data Multivariat PCA Menggunakan *Minitab* v17

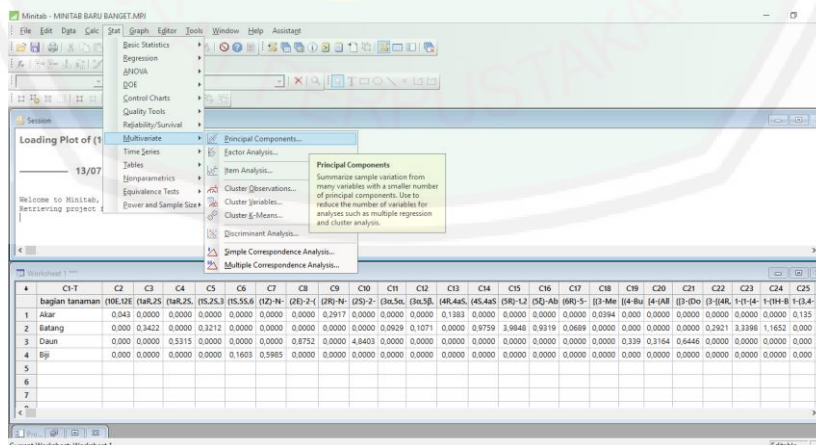
1. Dibuka aplikasi *Minitab* seperti berikut.



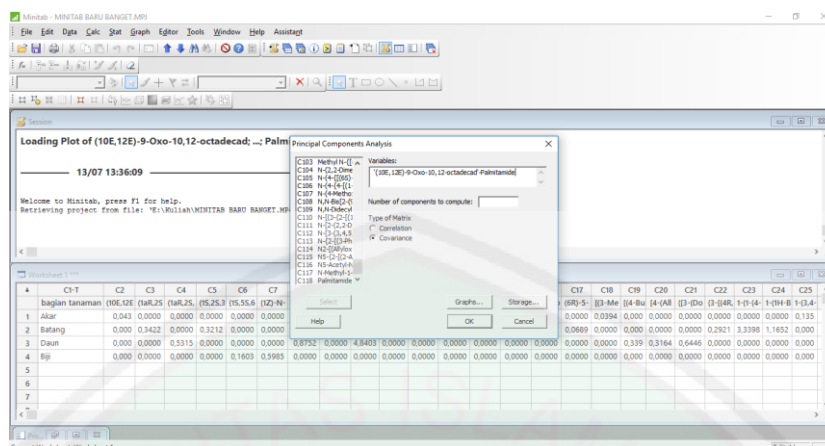
2. Disalin data berupa nama senyawa dan persentase luas area dari Ms.Excel hasil interpretasi kromatogram menggunakan *Masslynx*



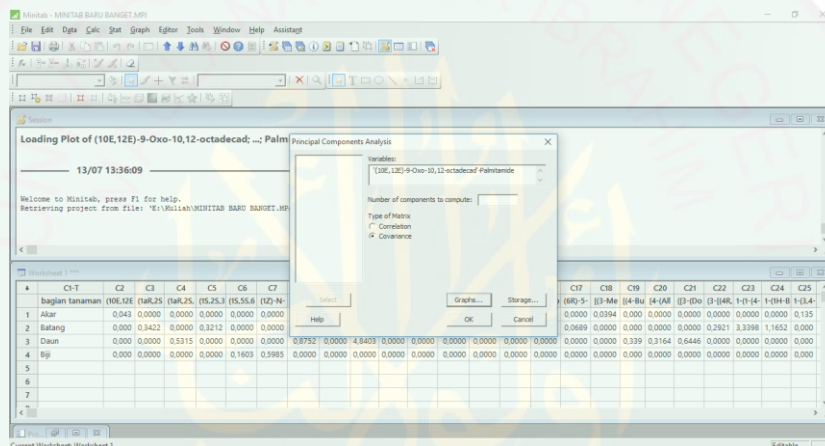
3. Klik Stat > Multivariate > Principal Component



4. Variabel diisi dengan nama senyawa yang ditemukan pada ekstrak dengan di klik daerah dan di klik “select”



5. Di pilih “Covariance” dan centang



6. Di klik “Graph” dan centang semua pilihan yang muncul, selanjutnya klik “OK” sehingga muncul hasil analisis berupa plot-plot grafik.

