

INTISARI

Penggunaan zat aktif kombinasi semakin sering digunakan akhir-akhir ini, sehingga menuntut peningkatan pengawasan terhadap mutu produk obat yang dihasilkan. Salah satu metode yang umumnya digunakan untuk penjaminan mutu adalah spektrofotometri. Akan tetapi metode spektrofotometri tidak dapat digunakan untuk analisis senyawa multikomponen secara simultan, hal ini disebabkan karena adanya *overlapping* spektra senyawa. Dengan berkembangnya kemometrika, keterbatasan pada metode spektrofotometri dapat diatasi.

Analisis sediaan farmasi yang mengandung parasetamol dan kafein dilakukan dengan menggunakan metode spektrofotometri yang dikombinasikan dengan kalibrasi multivariat *partial least square* (PLS). Validasi model kalibrasi didasarkan pada nilai koefisien determinasi (R^2), *root mean square error of calibration* (RMSEC), *root mean square of calibration validation* (RMSECV), dan *predicted residual error sum of square* (PRESS).

Hasil pemodelan yang diperoleh memiliki koefisien determinasi (R^2) parasetamol sebesar 0,999 dan nilai RMSEC sebesar 0,0036, sementara koefisien determinasi (R^2) untuk kafein adalah 0,999 dan RMSEC 0,0027. Model hasil validasi internal memiliki nilai R^2 sebesar 0,957, RMSECV 0,0196, PRESS 1,1892 untuk parasetamol dan R^2 0,999, RMSECV 0,1435, PRESS 0,0053 untuk kafein.

Kata Kunci : Analisis multivariat, spektrofotometri, *partial least square*

ABSTRACT

The increased use of combined active ingredients require an increased control on the quality of medicines product. One widely used method that used for quality control is spectrophotometry. However, the spectrophotometry cannot be used for the simultaneous analysis of multi-component mixtures, this problem was caused by overlapping of the mixtures. With the development of chemometrics method, the limitation of spectrophotometry can be resolved.

The analysis of pharmaceutical preparations containing paracetamol and caffeine can be conducted using spectrophotometry combined with multivariate partial least square (PLS) calibration. The validation of calibration model is based on the value of the determination coefficient (R^2), the root mean square error of calibration (RMSEC), root mean square of calibration validation (RMSECV), and predicted residual error sum of square (PRESS).

The modeling results obtained had a coefficient of determination (R^2) for paracetamol was 0,999 and RMSEC 0,0036. The coefficient of determination (R^2) for caffeine was 0,999 and RMSEC 0,0027. The internal validation result for the model had a R^2 value of 0,957, RMSECV of 0,0196, and PRESS of 1,1892 for paracetamol and R^2 of 0,999, RMSECV of 0,1435, PRESS 0,0053 for caffeine.

Key words: Multivariate analysis, spectrophotometry, *partial least square*