

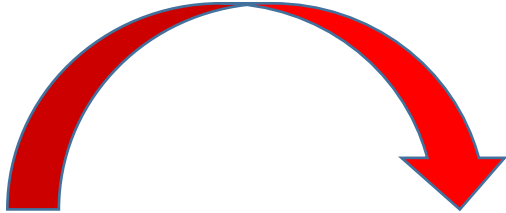


PENGANTAR COSMETIC CHEMISTRY

apt. Dra. Shelly Taurhesia, PhD



DEFINISI KOSMETIKA



EPIDERMIS → pelembab,
tabir surya

Bahan/ sediaan yang
digunakan pada bagian
luar tubuh manusia

RAMBUT → sampo,
kondisioner, cat rambut



KUKU → nail color



BIBIR → Lipstick



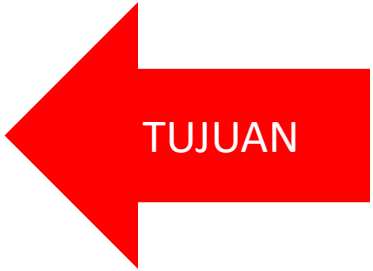
Organ genital bagian luar
→ feminim hygiene



GIGI/MUKOSA MULUT →
pasta gigi, mouth wash



- Membersihkan
- Mewangikan
- Mengubah penampilan
- Memperbaiki bau badan
- Melindungi dan atau
- Memelihara tubuh pada kondisi baik



TUJUAN

SEMESTER 1

KODE	MATA KULIAH
12611042	Entrepreneurship dan Leadership
12611035	Farmakoepidemiologi
12611004	Metode Penelitian dan Penulisan Tesis
12614017	Bioteknologi Farmasi
12611037	Regulasi dan Etika Farmasi
12611023	Manajemen Strategik
12611001	Kimia Bahan Alam
12611003	Analisis Fisikokimia

SEMESTER 2

KODE	MATA KULIAH
12624039	Cosmetic Product Development
12622007	Kosmetikologi
12621020	Chemistry for Cosmetic Science
12623032	Uji Mutu Bahan Alam & Produknya
12621038	Tesis I
12621048	Seminar Proposal Tesis (Terbuka)

MATA KULIAH PILIHAN

KODE	MATA KULIAH
12631056	Formulasi Kosmetik
12632051	Farmakologi Herbal
12632040	Perfumery, Aromacology, Aromatherapy
12633052	Etnofarmakologi
12632022	Manfaat dan Keamanan Kosmetik Bahan Alam

PERBEDAAN :

KOSMETIKOLOGI

**CHEMISTRY FOR
COSMETIC
SCIENCE**

**COSMETIC
PRODUCT
DEVELOPMENT**

Kosmetikologi

REGULASI

HAKI (Merk, Patent dll)

Uji Keamanan
& Manfaat



Uji Keamanan
& Manfaat

Menggali Potensi Bahan ... *Chemistry for
Cosmetic Science*

Bahan
Alam

Ekstraksi

Fraksinasi
/ Isolasi

Kombinasi

Formulasi
SEDIAAN

Commercial
Aspek

Literatur Sains/ Data
Empiris :

- Morfologi
- **Manfaat**
- **Kandungan kimia**

- Metode
- Pelarut
- Skrining
Fitokimia Ekstrak
- Mutu Extract

- Skrining Fitokimia
Fraksi
- Mutu Fraksi/ Isolat
- Elusidasi Struktur
- In-silico

- Proses pembuatan
- Spesifikasi Produk jadi
- Pengemas
- Data Stabilitas
- Data pendukung Claim

DIGITAL

Bahan Baku

Cosmetic product Development

Sediaan Jadi



Menebalkan alis pada bayi dan orang dewasa
Merangsang pertumbuhan rambut baru
Penghitam dan Menebalkan rambut alami
Mengatasi uban, rambut kembali hitam dan ternutrisi
Mineral dan protein yang terkandung dalam minyak kemiri
dapat Menguatkan akar rambut

Netto: 100g

CARA PENGGUNAAN :
GUNAKAN MINYAK KEMIRI PADA SELURUH RAMBUT / ALIS
DIAMKAN SELAMA KURANG LEBIH 60 MENIT, KEMUDIAN
BILAS DENGAN SHAMPOO, GUNAKAN SEMINGGU 3X
UNTUK HASIL YANG MAKSIMAL



SKER TERBAIK!!



**BIKIN BEDAK
DINGIN SENDIRI**

NO	NOMOR ACD	NAMA BAHAN/CAS No. ⁽¹⁾	PEMBATASAN		KONDISI PENGGUNAAN DAN PERINGATAN YANG HARUS DICANTUMKAN PADA PENANDAAN	
			JENIS SEDIAAN/KEGUNAAN	KADAR MAKSIMUM DALAM KOSMETIKA SIAP PAKAI		
	a	b	c	d	e	f
			(b) Losion rambut dan sampo	(b) 0,5%		<ul style="list-style-type: none"> - Jangan gunakan untuk mewarnai bulu mata atau alis. - Bilas rambut sampai bersih setelah pemakaian. (b) Mengandung resorcinol
124	98	Salicylic acid (INCI) CAS No 69-72-7 Benzoic acid, 2-hydroxy-	(a) Sediaan perawatan rambut bilas (b) Sediaan lainnya	(a) 3,0 % (b) 2,0 %	Tidak boleh digunakan pada sediaan untuk anak di bawah usia 3 tahun, kecuali sampo. Untuk kegunaan selain sebagai pengawet, maka kegunaannya harus dijelaskan pada penandaan produk. Fungsi sebagai pengawet, lihat Lampiran III Peraturan Badan ini, pada nomor 49.	Tidak digunakan untuk anak di bawah usia 3 tahun ^(1,2)



Drug Facts

Active Ingredient **Purpose**
 Salicylic Acid 3%.....Anti-dandruff

Use for relief of flaking and itching due to dandruff and seborrheic dermatitis, and to help prevent their recurrence

Warnings For external use only
Ask a doctor before use if you have
 ■ seborrheic dermatitis in areas other than the scalp

When using this product ■ avoid contact with eyes. if contact occurs, rinse eyes thoroughly with water.

Stop use and ask a doctor if ■ condition worsens or does not improve after regular use of this product as directed

Keep out of reach of children. If swallowed, get medical help or contact a Poison Control Center right away.


Directions ■ shampoo, then rinse thoroughly ■ for best results, use at least twice a week or as directed by a doctor

Other Information store at room temperature

QUESTIONS/COMMENTS?
 1-855-345-5575

Inactive Ingredients: water, sodium laureth sulfate, sodium lauryl sulfate, cocamidopropyl betaine, cocamide MEA, fragrance, polyquaternium-10, disodium EDTA, citric acid, benzyl alcohol, Panthenol (Pro-Vitamin B5), triclosan, fd&c blue no.1.

*This product is not manufactured or distributed by Chatterm Inc., owner of the registered trademark Selsun Blue® Naturals Dandruff Shampoo.



8 49607 05948 2

DISTRIBUTED BY:
 REJOICE INTERNATIONAL INC.
 NORTHVILLE, MI 48168, USA
 MADE IN CHINA

Lampiran I
 Daftar Bahan yang Diizinkan Digunakan dalam Kosmetika dengan Pembatasan dan Persyaratan Penggunaan

Inactive Ingredients: water, sodium laureth sulfate, sodium lauryl sulfate, cocamidopropyl betaine, cocamide MEA, fragrance, polyquaternium-10, disodium EDTA, citric acid, benzyl alcohol, Panthenol (Pro-Vitamin B5), triclosan, fd&c blue no.1.

Drug Facts (continued)/Datos del Producto (continuación)

To decrease this risk, regularly use a broad spectrum SPF of 15 or high sun protection measures including the sun, especially from 10 a.m. – long-sleeve shirts, pants, hats, and **Medidas de Protección Solar.** Ex períodos largos al sol aumenta su en la piel y envejecimiento premat reducir el riesgo, debe usar filtro s gama con FPS 15 o más regularm medidas de protección contra el s limite el tiempo expuesto al sol, es las 10 a.m. – 2 p.m. ■ use camisa: pantalones, sombreros y lentes de ■ Children under 6 months: ask a de 6 meses : consultar con un rr

MADE IN KOREA/HECHO EN COREA
DIST. BY AMWAY CORP., 7575
49355 USA • IMP. Y/O DIST. POR: J
REPUBLIC LLC
FABRICADO EN E.U.A. POR ACCESS
LLC, 7575 FULTON STREET EAST, A
FABRICADO POR: KOLMAR KORE
DEOKGOGAE-GIL, JEONUI-MYEON,
PARA ACCESS BUSINESS GROU
LLC, ADA, MI 49355 USA

Exclusively from **Amway**

Inactive ingredients/Ingredientes inactivos :

WATER/AQUA, CYCLOPENTASILOXANE, BUTYLENE GLYCOL, ALCOHOL, DICAPRYLYL CARBONATE, DIMETHICONE, PEG-10 DIMETHICONE, MAGNESIUM SULFATE, METHYL METHACRYLATE CROSSPOLYMER, VINYL DIMETHICONE/METHICONE SILSESQUIOXANE CROSSPOLYMER, ALUMINUM HYDROXIDE, TRIETHOXYCAPRYLYLSILANE, ALUMINUM STEARATE, FRAGRANCE / PARFUM, CAPRYLYL GLYCOL, PHENOXYETHANOL, POLYGLYCERYL-6 POLYRICINOLEATE, GLYCERYL CAPRYLATE, BELLIS PERENNIS (DAISY) FLOWER EXTRACT, MALTODEXTRIN, SODIUM HYALURONATE, GLYCERIN, JASMINUM OFFICINALE (JASMINE) FLOWER EXTRACT, LECITHIN, HYDROLYZED CONCHIOLIN PROTEIN, SOPHORA JAPONICA LEAF EXTRACT, GERANIUM ROBERTIANUM EXTRACT, LACTOBACILLUS/ACEROLA CHERRY FERMENT, OENOTHERA BIENNIS (EVENING PRIMROSE) SEED EXTRACT, GLYCERIN, BETA-SITOSTEROL, CERAMIDE 3, GLYCYRRHIZA GLABRA (LICORICE) ROOT EXTRACT, TETRAHEXYLDECYL ASCORBATE, TOCOPHERYL ACETATE.

1035864

ARTISTRY IDEAL RADIANCE™
Protección UV Protector Solar FPS 50+ De Amplio Espectro
TO USE: SHAKE BOTTLE WELL AFTER APPLYING MOISTURIZER, SMOOTH A LIBERAL AMOUNT
OVER FACE AND NECK WITH YOUR FINGERS. SEE EVERY HOUR™ / USO: AGITAR

Stop use and see a doctor if rash occurs/Deje de usar y consulte con un médico si ocurre irritación

Drug Facts (continued)/Datos del Producto (continuación)

Keep out of reach of children. If product is swallowed, get medical help or contact a Poison Control Center right away./ **Mantener fuera del alcance de los niños.** Si se ingiere el producto, debe obtener ayuda médica o comunicarse con un Centro de Control de Envenenamientos de inmediato.

Other information/Otra Información

■ Protect this product from excessive heat and direct sun/Proteja este producto de calor excesivo y exposición directa al sol

Inactive ingredients/Ingredientes inactivos :

WATER/AQUA, CYCLOPENTASILOXANE, BUTYLENE GLYCOL, ALCOHOL, DICAPRYLYL CARBONATE, DIMETHICONE, PEG-10 DIMETHICONE, MAGNESIUM SULFATE, METHYL METHACRYLATE CROSSPOLYMER, VINYL DIMETHICONE/METHICONE SILSESQUIOXANE CROSSPOLYMER, ALUMINUM HYDROXIDE, TRIETHOXYCAPRYLYLSILANE, ALUMINUM STEARATE, FRAGRANCE / PARFUM, CAPRYLYL GLYCOL, PHENOXYETHANOL, POLYGLYCERYL-6 POLYRICINOLEATE, GLYCERYL CAPRYLATE, BELLIS PERENNIS (DAISY) FLOWER EXTRACT, MALTODEXTRIN, SODIUM HYALURONATE, GLYCERIN, JASMINUM OFFICINALE (JASMINE) FLOWER EXTRACT, LECITHIN, HYDROLYZED CONCHIOLIN PROTEIN, SOPHORA JAPONICA LEAF EXTRACT, GERANIUM ROBERTIANUM EXTRACT, LACTOBACILLUS/ACEROLA CHERRY FERMENT, OENOTHERA BIENNIS (EVENING PRIMROSE) SEED EXTRACT, GLYCERIN, BETA-SITOSTEROL, CERAMIDE 3, GLYCYRRHIZA GLABRA (LICORICE) ROOT EXTRACT, TETRAHEXYLDECYL ASCORBATE, TOCOPHERYL ACETATE.

Directions/Instrucciones

For sunscreen use/Usa del protector solar

- Apply liberally 15 minutes before sun exposure/Aplicar abundantemente 15 minutos antes de exponerse al sol
- Reapply: • immediately after towel drying • at least every 2 hours / ■ Aplicar de nuevo: • inmediatamente después de secarse con toalla • al menos cada 2 horas
- **Sun Protection Measures.** Spending time in the sun increases your risk of skin cancer and early skin aging.



Ps EDITABLE LABEL TEMPLATES
www.aiwsolutions.net

Directions for Use:
Use this as a toner, to hydrate your skin, to freshen up and to set your make up! This infusion is great for all skin types. It is antibacterial, anti-inflammatory, rich in vitamin C and antioxidants! Experience soft, clear and glowing skin!

Distributed by:
Lorem Ipsum is simply dummy text of the printing and typesetting industry.

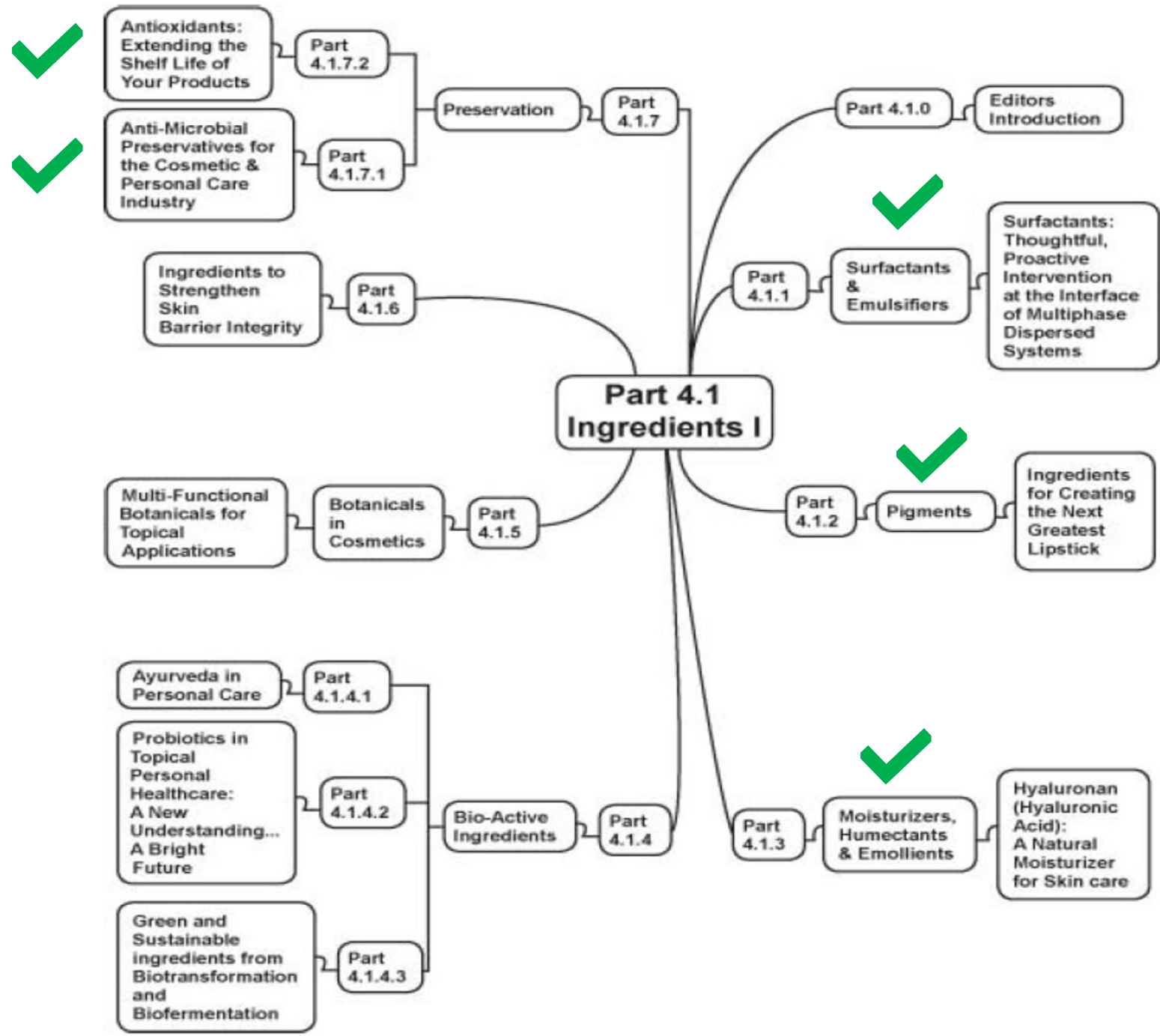
Your Logo
EMERGING NATURAL BEAUTY
Body Scrub

HYDRATE AND NOURISH SMOOTH
& FIRM REPAIR & REVITALIZE
40ml | 2OZ

Ingredients:
Water, Organic Aloe Vera Extract, Witch Hazel, Botanical Hyaluronic Acid, Kosher Vegetable Glycerin, Methylsulfonylmethane (MSM), Hydroxyethyl Cellulose, Carrageenan Gum, Organic Jojoba Oil, Wildcrafted Green Tea, Geranium Essential Oil, Vitamin C, Vitamin E, Sodium Benzoate, Potassium Sorbate,



Ingredients:
Water, Organic Aloe Vera Extract, Witch Hazel, Botanical Hyaluronic Acid, Kosher Vegetable Glycerin, Methylsulfonylmethane (MSM), Hydroxyethyl Cellulose, Carrageenan Gum, Organic Jojoba Oil, Wildcrafted Green Tea, Geranium Essential Oil, Vitamin C, Vitamin E, Sodium Benzoate, Potassium Sorbate,



28. **Antioxidants** 301
Stefan U. Weber, John K. Lodge, Claude Saliou, and Lester Packer
29. **UV Filters** 311
Stanley B. Levy
30. **Sun Protection and Sunscreens** 323
Bernard Gabard
31. **After-Sun Products** 331
Helena Karajiannis and Bernard Gabard
32. **Skin Care Products: Artificial Tanning** 339
Stanley B. Levy
33. **Reconstructed Human Skin and Skin Organ Culture Models Used in Efficacy Testing** 345
Alain Mavon, Daniel Bacqueville, and Bart De Wever
- PART V: SKIN PERCEPTION**
34. **Skin Feel Agents** 357
Germaine Zocchi
35. **Silicones—A Key Ingredient in Cosmetic and Toiletry Formulations**
Isabelle Van Reeth
36. **Sensory Effects and Irritation: A Strong Relationship** 381
Miriam A. Farage

Handbook of Cosmetic Science and Technology

Third
Edition

Edited by
André O. Barel
Marc Paye
Howard I. Maibach

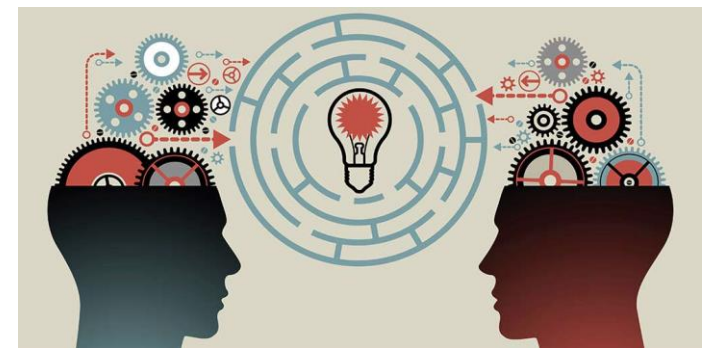
informa
healthcare

59. **Anticellulite Products and Treatments** 603
André O. Barel
60. **Baby Care Products** 613
Marie Lemper, Kristien De Paepe, Vera Rogiers, and Ralf Adam
61. **Cosmetics for the Elderly** 625
T. Blatt, G.-M. Muhr, and F. Stüb
62. **Antiperspirants** 631
Jörg Schreiber
63. **Deodorants** 643
Jörg Schreiber
64. **Revulsive Products: Way of Action and Evaluation of Their Efficacy** 653
Peter Clarys, André O. Barel, and Ron Clijsen
65. **Cooling Ingredients and Their Mechanism of Action** 661
John C. Leffingwell
66. **Oral Cosmetics** 677
Nathalie Demeester, Dirk Vanden Berghe, Mario R. Calomme, and André O. Barel
67. **Hair Conditioners** 687
Charles Reich, Dean Su, Cheryl Kozubal, and Zhi Lu
68. **Measuring Hair** 705
R. Randall Wickett and Janusz Jachowicz
69. **The Normal Nail** 737
Josette André
70. **Nail Cosmetics: Handle of Skin Care** 745
Josette André and Robert Baran
- PART VIII: COSMETICS VEHICLE**
71. **Surfactants: Classification** 769
Louis Oldenhove de Guertechin
72. **Encapsulation to Deliver Topical Actives** 787
Jocélia Jansen
73. **Elastic Vesicles as Topical/Transdermal Drug Delivery Systems** 797
Myeong Jun Choi and Howard I. Maibach
74. **Polymers Effect on Chemical Partition Coefficient Between Powdered Human Stratum Corneum and Water** 809
Ronald C. Wester, Xiaoying Hui, Philip G. Hewitt, Jurij J. Hostynek, Howard I. Maibach, Scott Krauser, and Thomas Chan

Pertemuan	Judul/Topik	Bahan Kajian
1	Pengantar Chemistry for Cosmetic Science & Chemotaxonomy	Chemotaksonomi
2	Memahami Antioksidan dan mekanisme (mode of action) anti aging	Kimia Antioksidan dan Mekanisme Antiaging, uji in vitro dan in vivo
3	Essential Oil, serta aplikasinya sebagai Fragrans/perfume , potensi antimikroba	Kimia Fragrans dan Parfume dalam Kosmetika Bahan Alam
4	Senyawa-senyawa Tabir Surya , Uji in vitro dan in vivo	Mengerti kimia zat bersifat Tabir surya yang dapat digunakan dalam formulasi kosmetik
5	Pewarna dalam kosmetika dan pengembangan produknya	Kimia, jenis, keamanan dan penggunaan zat warna dalam kosmetika bahan alam
6	Surfaktan Alam	Sumber serta klasifikasi Surfaktan
7	UTS	Bahan Kuliah 1 sd 6



BAHAN ALAM - TANAMAN



- Penggunaan Bahan alam sudah sejak lama, banyak digunakan dari tanaman
- Taksonomi tanaman dilakukan berdasarkan klasifikasi :
 - **Morfologi,**
 - **Anatomi &** } tradisional
- **Kemotaksonomi** modern
- **Kemotaksonomi** adalah studi sistematis tentang variasi kimia diantara taksa tanaman. Berabad-abad yang lalu, orang mencoba mengklasifikasi tanaman berdasarkan sifat mudah dimakan, rasa, warna, bau dan manfaat sebagai obat meskipun sifat kimianya belum diketahui. *Mint* aromatik telah diakui dan dikelompokkan bersama Dioscorides sejak awal masehi.
- Meningkatnya pengetahuan, beberapa ahli taksonomi (abad ke-18 & 19) memanfaatkan beberapa karakteristik kimia dalam upaya mengklasifikasikan tanaman dan menunjukkan filogeninya. (***Filogeni*** adalah perkembangan evolusi terkait dengan diversifikasi spesies atau kelompok organisme, atau fitur tertentu dari suatu organisme)

- Semua organisme hidup menghasilkan metabolit sekunder, sedangkan metabolit sekunder tsb berasal dari metabolit primer.
- Struktur kimia metabolit sekunder dan jalur biosintesisnya untuk organisme tertentu adalah SPESIFIK, berguna dalam melakukan klasifikasi.
- Metode klasifikasi Kemotaksonomi dianggap lebih baik dibandingkan dengan metode tradisional karena metodologinya mudah. Untuk melakukan klasifikasi, bahan yang akan dianalisis dapat dikeringkan atau dihancurkan.
- Menurut De Candolle :
 - 1) Taksonomi tanaman akan menjadi panduan berharga bagi manusia dalam usahanya mencari tanaman industri dan obat baru; dan
 - 2) Karakteristik kimia tanaman akan sangat bermanfaat untuk melakukan taksonomi di masa depan.

1. Keberadaan senyawa kimia dan/atau jalur biosintesis tergantung pada lingkungan, sehingga keberadaannya baik secara **kuantitatif atau kualitatif amat dipengaruhi** oleh faktor seperti suhu atau kekurangan mineral.
2. Terbatasnya pengetahuan atas biosintetik serta jumlah karakter kimia yang digunakan dalam taksonomi, sehingga dapat membingungkan persepsi filogeni.

Suatu senyawa mungkin muncul melalui dua atau lebih jalur biosintesis (**konvergensi**) yang sepenuhnya berbeda dan kehadirannya tidak serta-merta menyiratkan adanya hubungan antara taksa.

Contoh naphthoquinone yang mungkin ditemukan pada tanaman tingkat tinggi melalui empat jalur yang berbeda.

Paralelisme dapat menyebabkan produk akhir yang serupa muncul dalam kelompok terkait, terutama apabila berasal dari zat antara metabolisme.

3. Dalam banyak kasus tidak diketahui apakah jalur metabolik bersifat reversibel atau tidak, dan pembalikan jalur membingungkan. Apakah suatu karakter bersifat primitif atau diturunkan dalam takson tertentu.
4. Molekul yang besar dan/atau kompleks belum tentu merupakan yang terakhir, karena pengurangan bahan kimia dapat terjadi karena perubahan metabolisme
5. Fitur kimia dan morfologis mungkin telah berevolusi pada kecepatan yang berbeda karena seleksi tekanan yang berbeda. Mungkin ditemukan 'karakter kimia primitif bersama-sama dengan morfologi 'maju' dalam takson.
6. Terjadi variabilitas kimia - misalnya, pada rentang geografis, atau melalui mutan kimia di dalam spesies. Kimia juga dapat bervariasi antara tahapan ontogenetik organ yang dianalisis

CHEMO-TAXONOMIC

Klasifikasi chemotaxonomic berdasarkan **kemiripan kimia** dari takson.

Perkembangan taksonomi amat ditunjang oleh kemajuan teknik analisis, sehingga data fitokimia tersedia

Ada/Tidak adanya fitokimia tertentu serta pengetahuan tentang jalur biokimia sintetis membantu penetapan posisi taksonominya

Pendekatan yang digunakan :

1. metabolit primer;
2. metabolit sekunder dan
3. semantida

1. Metabolit Primer

- Metabolit primer adalah senyawa yang terlibat dalam jalur metabolisme dasar, terjadi secara universal dan akan dimanfaatkan oleh tanaman itu sendiri untuk pertumbuhan/perkembangan.
- **Kurang berperan** dalam chemotaxonomic karena banyak ditemukan di alam. Namun, KUANTITASnya dapat membantu klasifikasi kemotaksonomi.

Misal : Karbohidrat sedoheptulosa pada genus *Sedum* terdapat dalam jumlah besar (Gb. 1). Akumulasi sedoheptulose dalam

genus *Sedum* berfungsi sebagai karakter kimia dalam Kemo-taksonomi.

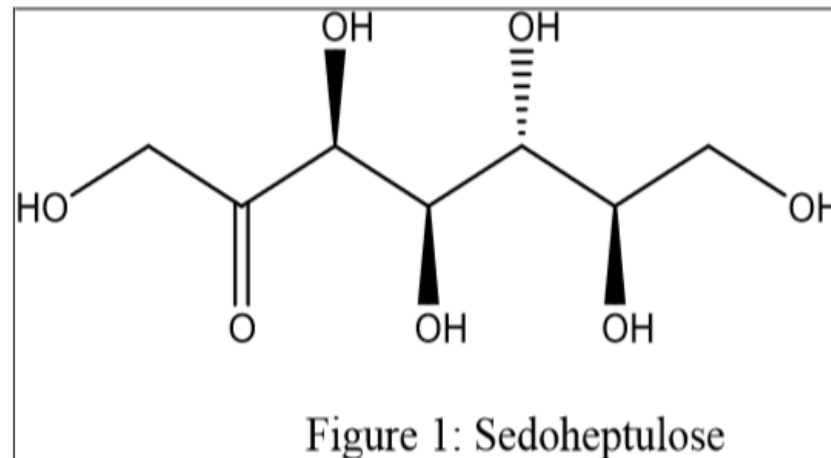


Figure 1: Sedoheptulose

- WSP - Water Soluble Polysaccharide, (Polisakarida larut air) digunakan sebagai penanda kemotaksonomi. Analisis GLC pada WSP dari pohon annatto (*Bixa orellana L.*) menunjukkan tipe :

- hemispherical mengandung 38% rhamnose, sedangkan
- tipe kerucut mengandung 17% dan
- bulat telur mengandung 34% glukosa.

Kandungan WSP (baik glukosa dan rhamnose) dapat digunakan untuk membedakan ketiga jenis pohon annatto.

2. Metabolit sekunder

- Metabolit sekunder adalah senyawa yang umumnya tidak mempunyai fungsi esensial pada tanaman.
- Mereka digunakan untuk perlindungan dan pertahanan terhadap pemangsa dan patogen.
- Karena keberadaan senyawa-senyawa tersebut adalah TERBATAS maka dapat digunakan untuk klasifikasi kemotaksonomi.
- Beberapa kelompok utama metabolit sekunder yang dapat digunakan untuk klasifikasi Kemotaksonomi adalah :
 - 1) Glikosida
 - 2) Cyanogenic glikosida
 - 3) Glucosinolates
 - 4) Alkaloid
 - 5) Plant Phenol

2.1 Kemotaksonomi - Glikosida

- Glikosida adalah senyawa yang memiliki satu atau lebih unsur gula, dikombinasikan dengan molekul non-gula melalui ikatan glikosidik.
- Glikosida dapat dikelompokkan berdasarkan ikatannya :
 - a) O-glikosida,
 - b) C-glikosida,
 - c) N-glikosida, dan
 - d) S-glikosida
- Distribusi **O-glikosida** seperti pada *rhein* sangat umum, sehingga berpeluang kecil sebagai Kemotaksonomi.

Glikosida flavonol pada *R. rugosa* terbukti menjadi penanda kemotaksonomi penting dalam species Cinnamomeae. Juga pada spesies Rosa sebagai penanda yang termasuk dalam bagian Gallicanae, Cinnamomeae, Caninae, dan Synstylae.

- **C-glikosida** : aloin, cascaroside yang memiliki ikatan C langsung antara gula dan non-gula jarang dijumpai di alam. Sering ditemukan pada beberapa tanaman yang mengandung turunan antrakuinon seperti aloin pada aloe-Liliaceae; cascaroside pada cascararhamnaceae (Gambar 2).

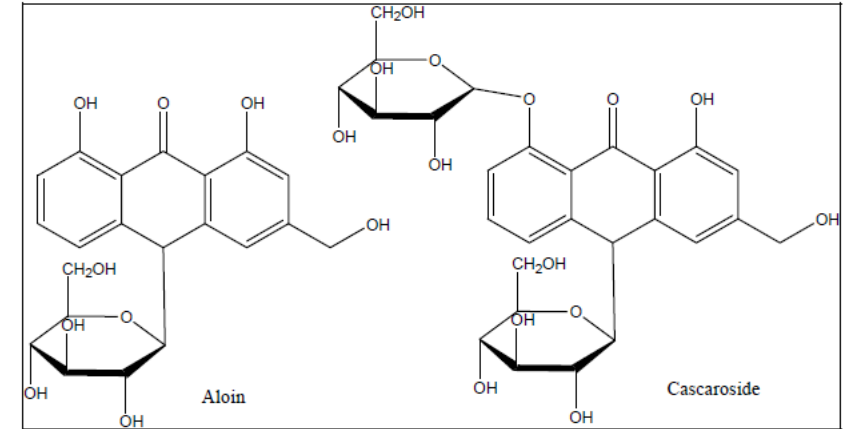


Fig 2: Aloin and Cascarioside

- **S-Glycosides**, contoh Sinigrin yang bila dihidrolisis menghasilkan isotiosianat. Senyawa-senyawa ini adalah karakteristik dari famili Cruciferae, Moringaceae, Capparaceae.
- Famili tsb memiliki hubungan filogenetik.

2.2 Kemotaksonomi - Glikosida sianogen

- **Glikosida sianogenik** adalah senyawa yang bertanggung jawab dalam mekanisme pertahanan tanaman. Hidrogen sianida (HCN) yang dihasilkan dari hasil hidrolisis enzimatik glikosida sianogen melalui proses yang disebut sianogenesis.
- Cyanogenesis dilaporkan untuk pertama kalinya dalam genera *Beilschmiedia*, *Cardwellia*, *Cleistanthus*, *Elaeocarpus*, *Embelia*, *Mischocarpus*, *Opisthiole*, *Parsonsia* dan *Polyscias*.
- Asam amino yang berbeda seperti fenil alanin, tirosin, valin, leusin, dan isoleusin adalah prekursor untuk biosintesis glikosida sianogenik, tetapi hanya terbatas pada keluarga tertentu.
- Misal :
 - glikosida sianogen yang disintesis dari **leusin** biasanya terjadi pada subfamili amygdaloideae (almond) dan maloideae (apel) dari famili rosaceae.
 - Glikosida yang berasal dari **tyrosine** umumnya terjadi pada famili ordo Mangnoliales dan Laurales

2.3 Kemotaksonomi - Glukosinolat

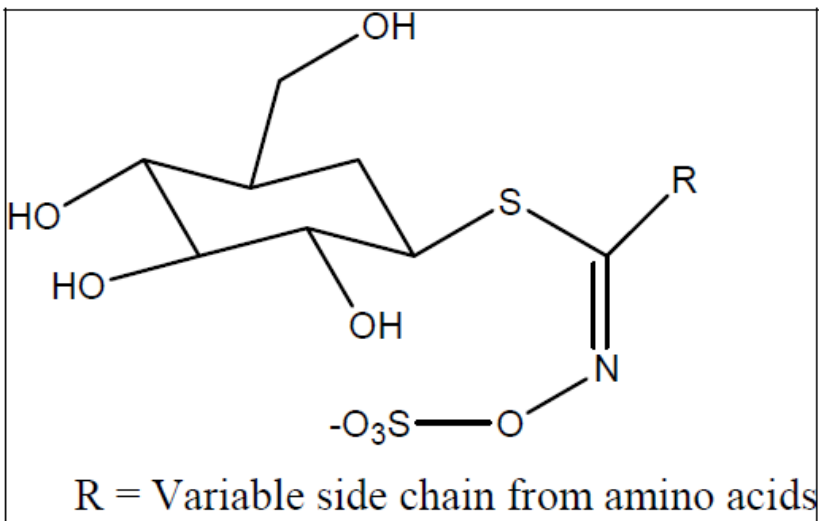


Fig 3: Glucosinolates

- **Glukosinolat** adalah metabolit sekunder yang mengandung sulfur dan nitrogen yang umum dalam ordo Capparales, yang termasuk keluarga Brassicaceae (Gambar 3). spesies brassica dapat dibedakan berdasarkan komponen alkil dari senyawa glukosinolat. *Brassica juncea* (mustard) dari India mengandung 3-butenyl glucosinolate dan allylglucosinolate, sedangkan yang dari negara Asia hanya mengandung senyawa allyl. Diduga, spesies yang berasal dari India adalah hibrida dari *B. nigra* (allylglucosinate) dan *B. compestris* (3-butenyl glukosinat).
- Bersama alkaloid, telah digunakan untuk membedakan Ordo “Rhoedales” menjadi 2 ordo baru yaitu :
 - Capparales yang menghasilkan glukosinolat yaitu Capparaceae dan Cruciferae
 - Papaverales yang menghasilkan alkaloid yaitu Papaveraceae dan Fumariaceae

2.4 Kemotaksonomi - Alkaloid

- Alkaloid adalah golongan senyawa basa bernitrogen yang kebanyakan heterosiklik, tetapi beberapa alkaloid non-heterosiklik.
- Apabila biosintesis dari sebuah alkaloid tidak diketahui, maka alkaloid digolongkan menurut nama senyawanya, termasuk nama senyawa yang tidak mengandung nitrogen
- **Golongan Indola:**
 - Tryptamines: serotonin, DMT, 5-MeO-DMT, bufotenine, psilocybin
 - Ergolines (alkaloid-alkaloid dari ergot): ergine, ergotamine, lysergic acid
 - Beta-carboline: harmine, harmaline, tetrahydroharmine
 - Yohimbans: reserpine, yohimbine
 - Alkaloid Vinca: vinblastine, vincristine
 - Alkaloid Kratom (*Mitragyna speciosa*): mitragynine, 7-hydroxymitragynine
 - Alkaloid *Tabernanthe iboga*: ibogaine, voacangine, coronaridine
 - Alkaloid *Strychnos nux-vomica*: strychnine, brucine
- **Alkaloid indol** mengandung senyawa indol terutama dari tiga famili tumbuhan, Rubiaceae, Loganiaceae dan Apocynaceae.
- Terbentuk dari secologanin dan tryptamine; atau tryptophane melalui prekursor tunggal, strictosidine, dan menunjukkan hubungan dalam keluarga.
- Alkaloid indol lain seperti physostigmine (Gb 4) diperoleh dari *Physostigma venenosum* (family Leguminosae); yohimbine dari *Rauwolfia serpentine* (family Apocyanaceae), dan *Corynanthe yohimbe* (family Rubiaceae) & Vinblastine dari fam Vincarosea

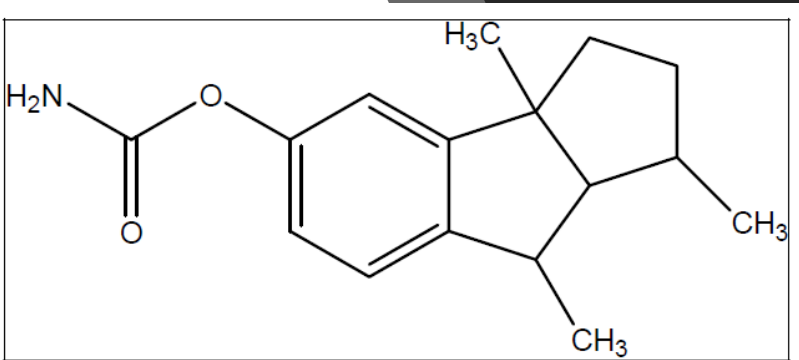


Fig 4: Physostigmine

Samb Alkaloid

- **Golongan Piridina:** piperine, coniine, trigonelline, arecoline, arecaidine, guvacine, cytisine, lobeline, nikotina, anabasine, sparteine, pelletierine.
Lobeline diperoleh dari Lobelia dari famili Lobeliaceae; Nikotin diperoleh dari *Nicotiana tobaccum* family Solanaceae; Anabasine diperoleh dari *Nicotiana gluaca* family Chenopodiaceae.
- **Golongan Pyrrolidine:** hygrine, cuscohygrine, nikotina
- **Golongan Tropane:** atropine, kokaina, ecgonine, scopolamine, catuabine
- **Golongan Kuinolina:** kuinina, kuinidina, dihidrokuinina, dihidrokuinidina, strychnine, brucine, veratrine, cevadine
- **Golongan Isokuinolina:** alkaloid-alkaloid opium (papaverine, narcotine, narceine), sanguinarine, hydrastine, berberine, emetine, berbamine, oxyacanthine
- **Alkaloid Fenantrena:** alkaloid-alkaloid opium (morfin, codeine, thebaine)
- **Golongan Phenethylamine:** mescaline, ephedrine, dopamin
- **Golongan Purine:** Xantina: Kafeina, teobromina, theophylline
- **Golongan Terpenoid:**
 - Alkaloid *Aconitum*: aconitine
 - Alkaloid Steroid (yang bertulang punggung steroid pada struktur yang bernitrogen):
 - *Solanum* (contoh: kentang dan alkaloid tomat) (solanidine, solanine, chaconine)
 - Alkaloid *Veratrum* (veratramine, cyclopamine, cycloposine, jervine, muldamine)^[2]
 - Alkaloid Salamander berapi (samandarin)
 - lainnya: conessine
- Senyawa ammonium kuartar : muscarine, choline, neurine
- Lain-lainnya: capsaicin, cynarin, phytolaccine, phytolaccotoxin

2. 5 Kemotaksonomi - Kandungan Fenol

- Polifenol adalah salah satu kelas metabolit yang paling luas di alam yang distribusinya luas
- Diperkirakan ada 100.000 hingga 200.000 metabolit sekunder dan sekitar 20% karbon yang difiksasi oleh fotosintesis disalurkan ke jalur fenilpropanoid, sehingga menghasilkan sebagian besar fenolik alami.
- Kelompok senyawa fenolik yang terbesar adalah FLAVONOID.
- Berbagai kelas fenol tanaman termasuk flavon, flavanon, isoflavanon, isoflavonoid, antosianidin dan chalcones.
- Sebagian besar ditemukan di vakuola tanaman tingkat tinggi dan tidak ada di tanaman yang tingkat rendah.
- Semua flavonoid memiliki asal biosintesis yang sama dan karena itu ia memiliki elemen struktur dasar yang sama. Misalnya, kerangka 2- fenil krom yang dijumpai dalam banyak kelas tergantung pada tingkat oksidasi cincin pyran. Contoh: 2-phenyl benzopyrilium: anthocyanin dan 2-phenyl chromone: flavone, flavanol, isoflavone.
- Studi kemotaksonomi terhadap hampir semua spesies dari genus Aloe menunjukkan bahwa flavonoid muncul sebagai senyawa utama dari total 380 spesies

3. SEMANTIDA

- Melibatkan DNA, RNA dan protein yang terkait erat dengan karakteristik genetik, banyak peneliti menganggap ketiganya memiliki nilai taksonomi.
- Kendala yang sering dijumpai terkait dengan waktu, peralatan, dan keterampilan untuk mendapat analisis yang efektif
- Tiga metode utama yang digunakan dalam pengurutan protein yaitu :
 - a) elektroforesis,
 - b) susunan asam amino dan
 - c) sistematis serologi

a. Teknik elektroforesis

- memungkinkan tersedianya 'finger print' protein dengan menetapkan ukuran yang relevan, muatan dan titik isoelektrik dengan pemisahan melalui variasi campuran gel dalam gradien tegangan.
- Profil protein yang dihasilkan melalui pemisahan elektroforesis yang dilanjutkan dengan pewarnaan telah digunakan dalam berbagai studi sistematis yang menyelidiki taksa poliploid, serta pada tingkat interspesifik, intraspesifik, dan populasi.
- Diperlukan keahlian dan harus hati-hati dalam menggunakan dan menginterpretasikan profil protein

b. Urutan Asam Amino

- Upaya menentukan urutan asam amino dalam menetapkan perbedaan urutan asam amino yang tepat dalam protein homolog tunggal di seluruh jajaran organisme.
- Analisis ini bergantung pada fakta bahwa protein tertentu dapat bervariasi sampai batas tertentu tanpa mengubah fungsi intinya.
- Salah satu molekul yang digunakan secara luas untuk tujuan ini adalah **sitokrom c**, di mana 79 dari sekitar 113 asam amino bervariasi, tetapi perubahan satu dari 34 lainnya akan merusak fungsi molekul.
- Secara umum jumlah perbedaan setara dengan jarak kedekatan antara organisme dalam klasifikasi tradisional tetapi memang dijumpai anomaly dalam menentukan ukuran struktur protein yang bukan merupakan panduan sempurna untuk tingkat kekerabatan

Saat melakukan analisis hasil menggunakan teknik ini, beberapa asumsi dibuat :

- molekul telah berevolusi melalui jumlah minimum mutasi
- tidak ada evolusi konvergen atau mutasi balik yang terjadi
- perbedaan pada posisi dalam molekul memiliki kerentanan terhadap substitusi.

Asumsi diatas membantu, disaat pengurutan sejumlah protein homolog menghasilkan bukti yang bertentangan.

- Beberapa peneliti telah menunjukkan bahwa untuk menerapkan pola sitokrom dalam kemosistematik mensyaratkan bahwa efek kuantitatif dan kualitatif dari kondisi pertumbuhan pada konten sitokrom harus diperhitungkan
- Untuk mencegah kesalahan dalam interpretasi hasil berbagai protein, harus dikumpulkan hasil penelitian dari berbagai teknik yang berbeda, daripada hanya bergantung atas skrining protein tunggal

c. Synthetic serology

- Serologi sintesis adalah teknik imunologis yang mengandalkan kespesifikan relatif dari reaksi imun, serta kenyataan bahwa derajat reaktivitas silang sebanding dengan tingkat hubungan antara organisme.
- Dalam serologi tanaman “anti sera” untuk antigen dari berbagai taksa yang ditumbuhkan pada hewan dari berbagai ekstrak tumbuhan dan kemudian antisera dapat digunakan sebagai uji standar terhadap ekstrak tanaman lainnya.
- Tingkat koagulasi yang disebabkan oleh ekstrak lain digunakan untuk mengukur kemiripannya dengan antigen asli.
- Perbaikan dalam teknik telah membuat metode ini lebih spesifik daripada sebelumnya dan serologi telah diperluas di seluruh tingkat taksonomi dari di atas keluarga hingga ketinggian di bawah spesies, dan menghasilkan banyak data berharga

- Asam nukleat belum digunakan secara luas dalam sistematika tanaman karena kompleksitas analisisnya. Teknik ini relatif baru sehingga data yang dikumpulkan, terbatas
- Secara teoritis karakter ini harus mampu menyelesaikan banyak masalah filogenetik :
 - pertama karena setiap organisme memiliki DNA dengan urutan basa yang unik dan
 - kedua teori evolusi berdasarkan bahwa organisme terkait harus menunjukkan kesamaan dalam DNA mereka yang tidak ditunjukkan oleh spesies yang tidak terkait
- Saat ini, teknik yang paling berguna adalah **hibridisasi DNA** di mana heliks ganda DNA diinduksi untuk melepaskan diri dan kemudian dibiarkan bergabung kembali satu sama lain serta DNA yang diperlakukan serupa dari spesies lain. Ini menghasilkan beberapa heliks ganda hibrid yang terbentuk, jumlah dan kesetiaan rekombinasi secara teoritis tergantung pada kompatibilitas dari dua sekuens basis DNA.
- Hasil dari Teknik diatas menunjukkan nilai potensial dari metode ini, tetapi belum sempurna.
- Perbedaan hasil tergantung pada kondisi eksperimental. Beberapa bukti mengatakan bahwa replikasi in vitro dari cetakan DNA dipengaruhi oleh faktor-faktor seperti suhu, dan tidak adanya fenomena pengaturan atau faktor spesifik yang hadir in vivo dan hal ini berlaku untuk rekombinasi.

- Teknik lain untuk menyelidiki DNA dan RNA telah dilakukan tetapi hasilnya aplikasi terbatas.
- Disarankan bahwa kemajuan dalam kloning gen dan rekayasa genetika dapat mengarah pada penggunaan karakter asam nukleat yang lebih luas dalam taksonomi tetapi tampak kelemahan penggunaannya secara luas dalam filogeni adalah bahwa materi hidup seringkali merupakan prasyarat. Variasi kimia adalah nilai taksonomi yang cukup besar.
- Dalam taksonomi, perlu dipertimbangkan adanya variasi kimia dalam beberapa cara:
 1. Konfirmasi atau dukungan klasifikasi putatif yang berasal dari sumber karakter taksonomi lainnya, seperti morfologi.
 2. Penyelesaian masalah apabila bukti lain menunjukkan hubungan yang tidak jelas atau bertentangan.
 3. Memberikan bukti untuk posisi yang lebih alami dari ketidaknormalan taksa, serta memisahkan taksa tersebut. Seringkali kehadiran taksa anomali dalam suatu kelompok ditekankan oleh kekhasan kimianya
 4. Deteksi konfirmasi hibridisasi.
 5. Menyediakan karakter tambahan “on/off” untuk taksonomi numerik dengan ada atau tidaknya karakter tsb dalam taksa.

- Dua masalah utama yang tampaknya perlu ditangani adalah kurangnya standarisasi metodologi dan kurangnya pengambilan sampel kelompok.
- Kemotaksonomi telah membuat sumbangan yang besar di masa lalu dan terus akan berkontribusi di masa yang akan datang.
- Namun, mengingat kurangnya bukti fosil dan kebutuhan akan bahan hidup dalam beberapa analisis, tampaknya kontribusinya terhadap klasifikasi filogenetik masih terbatas.
- Paling baik informasi tsb digunakan bersamaan dengan sumber-sumber bukti taksonomi lainnya dan oleh karena itu diperlukan pendekatan multidisiplin untuk membuat sistem klasifikasi yang mencerminkan hubungan alami seakurat mungkin.

Klasifikasi kandungan kimia pada Tanaman berdasarkan **sumber nutrisi** adalah sbb :

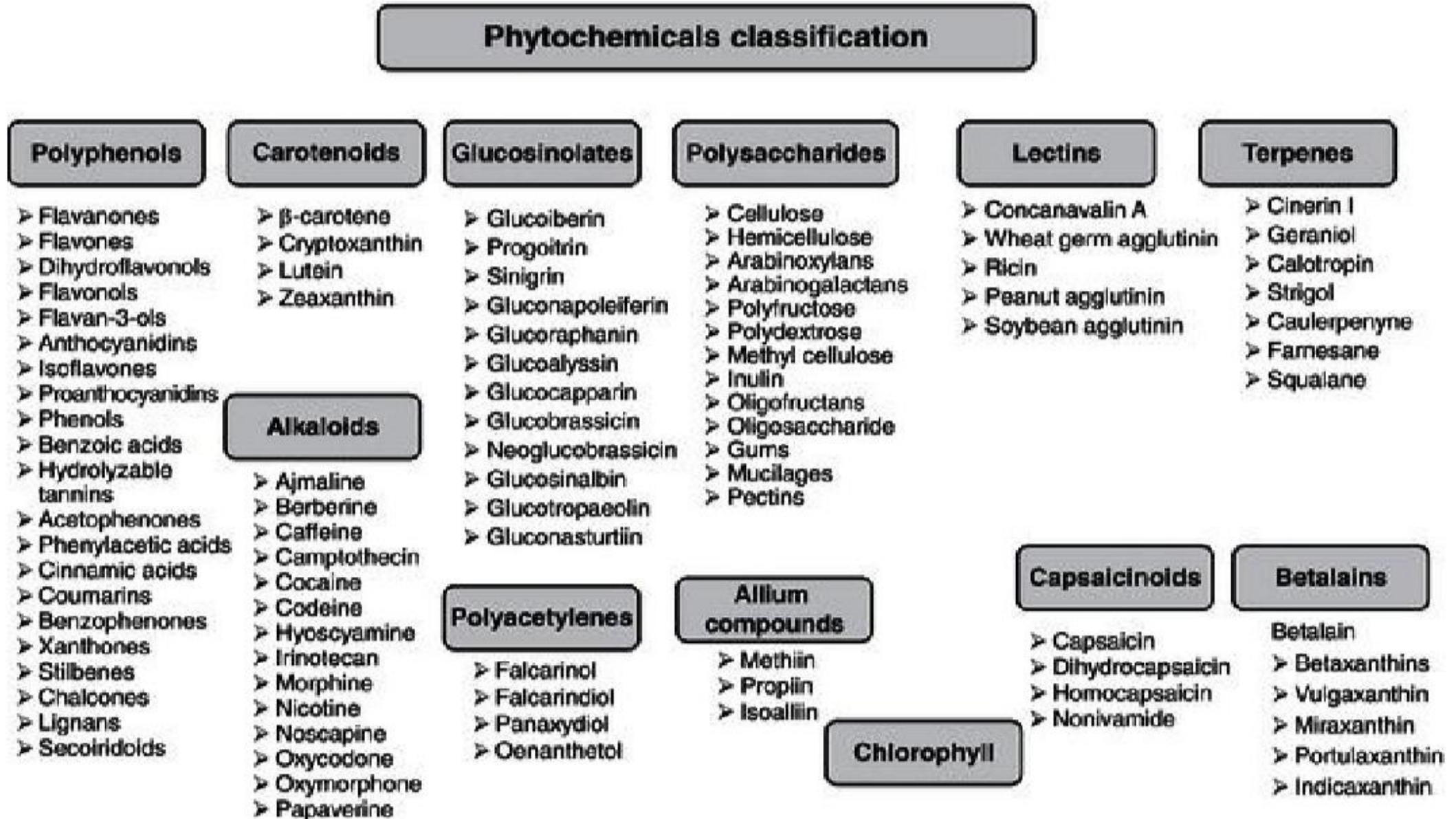
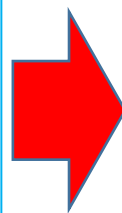


Table 2.2 Sources and biological activities of phytochemicals (adapted from Rowland *et al.*, 1999)

Group	Examples	Main food sources	Activity and functional marker
Fiber and related compounds	NSP Soluble (e.g. pectins, gums) Insoluble (celluloses) Resistant starch, retrograded starch Phytate Oligosaccharides	Fruit (apples, citrus), oats, soybean, algae Cereals (wheat, rye), vegetables High-amylose starches, processed starches, whole grains, and seeds Cereals, grains, soybeans Chicory, soybeans, artichokes, onion	Lowers serum cholesterol Prevents colon and breast cancer, diverticular disease Alleviates constipation Increases butyrate in faeces Prevents colon cancer Binds minerals. Prevents Colon cancer Modifies gut flora, modulates lipid metabolism, Cancer prevention?
Flavonoids	Flavonols: quercetin, kaempferol Flavanones: tangeritin, naringenin, hesperitin Flavanols: catechins, epicatechins	Vegetables (onion, lettuce, tomatoes, peppers) wine, tea Citrus fruits Green tea	Antioxidants, modulate phase I enzymes, inhibit protein kinase C. Prevent cancer protect CVD? Modulate immune response?
Tea polyphenols Derived tannins Isoflavonoids	Catechins, epicatechins Theaflavins, thearubigins Daidzein, genistein	Green tea Black tea, red wine, roasted coffee Soybean products	Antioxidants prevent CHD? Anti-oestrogenic effects, effects on serum lipids, prevent breast and prostate cancers
Lignans	Secoisolariciresinol, matairesinol	Rye bran, flaxseed, berries, nuts	Antioxidant and anti-oestrogenic effects Prevent colon and prostate cancer?
Glucosinolates Isothiocyanates	Glucobrassicin, indole-3-carbinol Allyl isothiocyanates, indoles, sulforaphane	Cruciferous vegetables (broccoli, cabbage, Brussel sprouts, watercress, mustard)	Induces phase 2 enzymes Cancer prevention?
Simple phenols Phenolic acids, condensed phenols	p-Cresol, ethyl phenol, hydroquinone Gallic acid, tannins, ellagic acid	Raspberry, cocoa beans, green tea, black tea, strawberries	Antioxidants
Monoterpenes	D-Limonene, D-carvone, perillyl alcohol	Citrus fruits, cherries, herbs	Induce Phase I and Phase II enzymes Anti-tumour activity
Hydroxycinnamic acid	Caffeic, ferulic, chlorogenic acids, curcumin	Apples, pears, coffee, mustard, curry	Inhibit nitrosation by trapping nitrite, nucleophiles, antioxidants
Phytosterols	β -Sitosterol, campesterol, stigmasterol	Vegetable oils (soybean, rape seed, maize, sunflower)	Lower serum cholesterol
Alkaloids	Caffeine, Codeine, Noscopine, Quinidine	Berberis vulgaris, Cinchona ledgeriana	Anticancer agents, glycosidase inhibitors, Analgesic
Polyacetylenes	Falcarindiol, Falcarinol, Crepenycic, Stearolic, Teriric acids	Carrots	Anti cancer properties
Chlorophyll Betalains	Chlorophyll Vulgaxanthin, Miraxanthin, Portulaxanthin, Indicaxanthin	Plants, algae and cyanobacteria Plants: amaranth, cactus fruits	Antioxidant Antioxidant
Organosulphides (allium compounds)	Diallyl sulphide, allyl methyl sulphide, S-allylcysteine	Garlic, onions, leeks	Induce Phase II enzyme, affects serum lipids and platelet aggregation Prevent cancer



Digunakan & Dirasakan
Manfaatnya



DITELITI :

- 1. Kaitan Manfaat dengan Kandungan kimia**
- 2. Bagian apa saja yang mengandung senyawa kimia tertentu (terutama bagian yang tidak terpakai)**