

**ANALISIS METABOLOMIK *UNTARGETED* PADA KACANG PANJANG
HITAM, HIJAU, AZUKI, DAN KECIPIR MENGGUNAKAN INSTRUMENTASI
UHPLC-ESI-QTOF**

SKRIPSI

Diajukan untuk memenuhi sebagian syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains Departemen
Pendidikan Kimia Program Studi Kimia



oleh:

Agil Aprianto

NIM 1804942

KELOMPOK BAHAN KAJIAN KIMIA MAKANAN

PROGRAM STUDI KIMIA

DEPARTEMEN PENDIDIKAN KIMIA

FAKULTAS PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS PENDIDIKAN INDONESIA

BANDUNG

2022

**ANALISIS METABOLOMIK *UNTARGETED* PADA KACANG PANJANG
HITAM, HIJAU, AZUKI, DAN KECIPIR MENGGUNAKAN
INSTRUMENTASI UHPLC-ESI-QTOF**

Oleh:

Agil Aprianto

Sebuah skripsi yang diajukan untuk memenuhi salah satu syarat untuk
memperoleh gelar Sarjana Sains Kimia pada Fakultas Pendidikan Matematika dan
Ilmu Pengetahuan Alam

©Agil Aprianto

Universitas Pendidikan Indonesia

Agustus 2022

Hak Cipta dilindungi undang-undang.

Skripsi ini tidak boleh diperbanyak seluruhnya atau sebagian, dengan dicetak
ulang, difotokopi, atau cara lainnya tanpa izin dari peneliti.

LEMBAR PENGESAHAN

ANALISIS METABOLOMIK *UNTARGETED* PADA KACANG PANJANG
HITAM, HIJAU, AZUKI, DAN KECIPIR MENGGUNAKAN
INSTRUMENTASI UHPLC-ESI-QTOF

Oleh,

Agil Aprianto

1804942

Disetujui oleh:

Pembimbing I



Dr. Siti Aisyah, M.Si.

NIP. 197509302001122001

Pembimbing II



Amelinda Pratiwi, M.Si.

NIP. 920200419910505201

Mengetahui,

Ketua Departemen Pendidikan Kimia



Dr. Hendrawan, M.Si.

NIP. 196309111989011001

PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “**Analisis Metabolomik Untargeted pada Kacang Panjang Hitam, Hijau, Azuki, dan Kecipir Menggunakan Instrumentasi UHPLC-ESI-QTOF**” beserta seluruh isinya adalah benar-benar karya saya sendiri. Saya tidak melakukan pengutipan atau penjiplakan dengan cara-cara yang tidak sesuai dengan etika keilmuan yang berlaku dalam masyarakat keilmuan. Atas pernyataan ini, saya siap menerima risiko atau sanksi apabila kemudian hari ditemukan adanya pelanggaran etika keilmuan atau ada klaim dari pihak lain terhadap keaslian karya saya.

Bandung, Agustus 2022

Yang membuat pernyataan,



Agil Aprianto

NIM. 1804942

UCAPAN TERIMA KASIH

Keberhasilan penulis dalam menyusun skripsi ini tidak lepas dari bantuan serta kerja sama dari beragam pihak. Oleh sebab itu, dengan segala kerendahan hati, penulis ingin menyampaikan ucapan terima kasih kepada;

1. Ibu Dr. Siti Aisyah, M.Si. selaku Dosen Pembimbing I yang telah memberikan penulis kepercayaan untuk bergabung di dalam proyek penelitian metabolomik, bersedia meluangkan waktu disela kesibukannya untuk membimbing penulis dalam penulisan skripsi, memberikan kritik, saran, serta motivasi kepada penulis sehingga skripsi ini dapat selesai.
2. Ibu Amelinda Pratiwi, M.Si. selaku Dosen Pembimbing II yang telah memberikan saran, masukan, dan kritik terhadap skripsi penulis, merangkul penulis selaku mahasiswa bimbingannya supaya tidak begitu tegang dalam penyusunan skripsi sehingga skripsi ini dapat selesai tepat waktu.
3. Bapak Dr. Hendrawan, M.Si. selaku Ketua Departemen Pendidikan Kimia UPI dan Ibu Fitri Khoerunnisa, P.hD. selaku Ketua Program Studi yang telah membantu kelancaran penyelesaian skripsi ini.
4. Bapak Gun Gun Gumilar, S.Pd. M.Si., selaku Dosen Pembimbing Akademik penulis yang senantiasa memberikan dukungan kepada penulis selama perkuliahan dan membantu kelancaran penyelesaian skripsi ini.
5. Ibu Dr. F.M. Titin Supriyanti, M.Si. selaku Ketua KBK Kimia makanan yang membimbing penulis selama semester 7 pada berbagai perkuliahan yang berkaitan dengan kimia makanan.
6. Bapak Prof. Dr. Asep Kadarohman, M.Si. dan Ibu Dr. Soja Siti Fatimah, M.Si. serta Ibu Dra. Zackiyah, M.Si. dan Ibu Dr. F.M. Titin Supriyanti, M.Si. selaku dosen penguji penulis yang telah bersedia meluangkan waktunya untuk melakukan *review* dan memberikan kritik, masukan serta saran pada skripsi ini.

7. Kedua orang tua tercinta, Bapak Purwono dan Ibu Dwi Rusharyani yang selalu mendukung dan menjadi penyemangat bagi penulis untuk segera menyelesaikan skripsi ini.
8. Adik saya, Intan Afni Nuraini yang juga menjadi salah satu alasan penulis untuk menyelesaikan skripsi dan studi S1 tepat waktu.
9. Nida Khofiyya, yang selalu mendukung dan menemani penulis selama tingkat akhir dan proses penyusunan skripsi, mendengarkan keluh kesah yang dialami oleh penulis.
10. Shelina Lauren, Vivi Hasna Fatimah, dan Zahra Novyani selaku rekan dalam pengerjaan riset metabolomik yang selalu memberikan motivasi dan dukungan pada setiap tahap dalam penyusunan skripsi ini.
11. Rini, Riri serta rekan-rekan *Blended pitch* 2018 D yang telah menemani penulis selama masa perkuliahan, melewati masa suka maupun duka.
12. Seluruh anggota Departemen kemahasiswaan 2019 dan 2020 BEM HMK FPMIPA UPI, anggota Divisi MEDINFO BEM FPMIPA UPI, anggota Kementerian KOMINFO BEM REMA UPI, serta anggota Program *Volunteer SAHABAT DIA* Batch 5, yang telah memberikan warna tersendiri dalam setiap langkah penulis selama tingkat S1.

ABSTRAK

Gizi buruk merupakan masalah yang masih marak terjadi di Indonesia dan merupakan salah satu penyebab utama kasus stunting. Salah satu penyebab gizi buruk adalah karena kurangnya asupan makronutrien yang dibutuhkan oleh tubuh akibat adanya gangguan penyerapan nutrisi oleh senyawa anti nutrisi yang terkandung dalam makanan yang dikonsumsi. Pada penelitian ini, telah dilakukan analisis *untargeted* metabolomik pada sampel kacang panjang hitam, azuki, kecipir, dan kacang hijau dengan menggunakan instrumentasi UHPLC-ESI-QTOF agar didapatkan profil metabolomik yang koheren dan menyeluruh. Data multivariat yang dihasilkan dari instrumen diolah menggunakan perangkat lunak MetaboAnalyst 5.0 agar dapat disederhanakan dan dikelompokkan menggunakan teknik statistika SAM, PCA, PLSDA, dan HCA sehingga didapatkan kesimpulan terkait profil metabolomik dan hubungan kekerabatan antara keempat sampel kacang-kacangan (Legum). Dari hasil analisis SAM, tercatat 27 senyawa tergolong sebagai metabolit sekunder signifikan yang diantaranya merupakan kelompok senyawa lignan siklobutana, guanidin, dan anilida. Sedangkan pada hasil analisis PLSDA didapat nilai R^2 dan Q^2 sebesar 0.96415 dan 0.5287 yang mengindikasikan bahwa data dapat diterima, bersifat prediktif dan tidak dipaksakan untuk memiliki relevansi secara berlebihan. Terdapat 25 senyawa metabolit sekunder yang teridentifikasi sebagai senyawa pembeda, sebagian besar diantaranya berasal dari kelompok senyawa benzenoid, asam organik dan lipid serta molekul serupa lipid. Tanin, yang termasuk ke dalam kelompok senyawa anti nutrisi terdeteksi menjadi senyawa pembeda bagi kacang azuki. Hasil analisis HCA menunjukkan bahwa analisis dendrogram memiliki kemiripan dengan pohon filogeni keempat kacang tersebut.

Kata kunci: Kacang, Kemometri, Metabolit sekunder, UHPLC-ESI-QTOF.

ABSTRACT

Malnutrition is a problem that is still prevalent in Indonesia and is one of the main causes of stunting. One of the causes of malnutrition is the lack of macronutrient intake needed by the body due to impaired nutrient absorption by anti-nutritional compounds contained in the food consumed. In this study, an untargeted metabolomic analysis was carried out on samples of black long beans, azuki, winged beans, and green beans using the UHPLC-ESI-QTOF instrumentation in order to obtain a coherent and comprehensive metabolomic profile. The multivariate data generated from the instrument was processed using MetaboAnalyst 5.0 in order to be simplified and clusterized using statistical techniques such as SAM, PCA, PLSDA, and HCA so that the conclusions of the metabolomic profile and the relationship between the four samples of legumes can be obtained. From the results of the SAM analysis, it was noted that 27 compounds were classified as significant secondary metabolites which some of it consists of cyclobutane lignans, guanidine, and anilide. from the results of the PLSDA analysis R2 and Q2 values of 0.96415 and 0.5287 were obtained which stated that the data were acceptable, predictive and not forced to have excessive relevance. There are 25 secondary metabolite compounds categorized as distinguishing compounds, most of which come from the group of benzenoid compounds, organic acids and lipids as well as lipid-like molecules. Tannins, which belong to the group of anti-nutrients compounds, are the distinguishing compounds for adzuki beans. The results of the HCA analysis showed that the dendrogram analysis had quality with the phylogenetic tree of the four legumes.

Keywords: Chemometrics, Legumes, Secondary metabolite, UHPLC-ESI-QTOF.

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN	i
PERNYATAAN	ii
UCAPAN TERIMA KASIH	iii
ABSTRAK	v
ABSTRACT	vi
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1. Latar Belakang Penelitian.....	1
1.2. Rumusan Masalah Penelitian.....	3
1.3. Tujuan Penelitian.....	3
1.4. Manfaat / Signifikansi Penelitian.....	3
1.5. Struktur Organisasi Skripsi.....	4
BAB II KAJIAN PUSTAKA	5
2.1. Stunting.....	5
2.2. Senyawa Anti Nutrisi Pada Kacang-kacangan.....	6
2.3. Kacang Hijau (<i>Vigna radiata</i>).....	10
2.4. Kacang Azuki (<i>Vigna angularis</i>).....	11
2.5. Kacang Panjang Hitam (<i>Vigna unguiculata L.</i>).....	12
2.6. Kacang Kecipir (<i>Psophocarpus tetragonolobus (L.) DC.</i>).....	13
2.7. Analisis Metabolomik.....	14
2.8. Analisis Kemometrik.....	17
2.9. Perangkat Lunak Identifikasi dan Analisis Statistik.....	19
2.10. Proses Ekstraksi Pada Analisis Metabolomik.....	21
2.11. Spektrofotometer UV/VIS.....	21
2.12. <i>Liquid Chromatography/Mass Spectrometry (LC-MS)</i>	22
BAB III METODE PENELITIAN	26
3.1. Waktu dan Lokasi Penelitian.....	26
3.2. Alat dan Bahan.....	26
3.2.1. Alat.....	26
3.2.2. Bahan.....	26

Agil Aprianto, 2022

ANALISIS METABOLOMIK *UNTARGETED* PADA KACANG PANJANG HITAM, HIJAU, AZUKI, DAN
KECIPIR MENGGUNAKAN INSTRUMENTASI UHPLC-ESI-QTOF

Universitas Pendidikan Indonesia | repository.upi.edu | perpustakaan.upi.edu

3.3.	Bagan Alir Penelitian	26
3.4.	Prosedur Kerja.....	29
3.4.1.	Pencucian dan Penepungan Kacang.....	29
3.4.2.	Ekstraksi Metabolit Sekunder Pada Sampel Kacang	29
3.4.3.	Analisis Metabolomik dengan Instrumen UHPLC-ESI-QTOF	30
3.4.4.	Pengolahan Data dan Analisis Secara Statistik.....	30
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN		33
4.1.	Proses Ekstraksi Sampel Kacang	33
4.2.	Proses Analisis Sampel Kacang dengan UHPLC-ESI-QTOF	34
4.3.	Pengolahan Data Pada MS-DIAL dan Identifikasi Spektra Massa.....	37
4.4.	Analisis Metabolomik Menggunakan MetaboAnalyst 5.0	39
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....		52
5.1.	Kesimpulan	52
5.2.	Saran.....	52
DAFTAR PUSTAKA		53
LAMPIRAN		61

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1. Hasil Pengukuran Menggunakan Spektrofotometer UV/VIS.....	33
Tabel 4.2 Daftar Nilai Ion Prekursor.....	35
Tabel 4.3 Daftar Senyawa Signifikan SAM.....	40
Tabel 4.4. Senyawa pembeda pada setiap sampel kacang	43

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Contoh Senyawa Saponin	6
Gambar 2.2 Struktur Molekul Asam Fitat	8
Gambar 2.3 Salah Satu Senyawa Tanin, Gallotannin	9
Gambar 2.4 Interaksi Antara Tanin dan Protein	10
Gambar 2.5 Kacang Hijau.....	11
Gambar 2.6 Kacang Azuki.....	12
Gambar 2.7 Kacang Panjang Hitam.....	13
Gambar 2.8 Kacang Kecipir.....	14
Gambar 2.9 Tahapan Umum Targeted Metabolomics	15
Gambar 2.10 Tahapan Umum Analisis Untargeted Metabolomics	16
Gambar 2.11 Antarmuka software MS-DIAL 4.90	19
Gambar 2.12 Proses Ekstraksi Menggunakan Gelombang Ultrasonik	21
Gambar 2.13 Skema Diagram Spektrofotometer UV/VIS.....	22
Gambar 2.14 Diagram LC-MS.....	22
Gambar 2.15 Diagram Skematik Instrumen UHPLC-MS/MS	23
Gambar 2.16 Diagram Skematik Electrospray Ionization	24
Gambar 2.17 Mekanisme Kerja TOF MS	25
Gambar 3.1 Bagan Alir penelitian	28
Gambar 4.1 Proses Identifikasi Nama Senyawa Tentatif.....	38
Gambar 4.2 Plot Analisis SAM.....	39
Gambar 4.3 Plot skor Analisis PCA.....	41
Gambar 4.4 Plot skor Analisis dan Plot VIP PLSDA	42
Gambar 4.5 Struktur Senyawa asam isovaloneat-oktametil trimetil ester	46
Gambar 4.6 Grafik Koefisien Korelasi Terhadap Senyawa Tannin	48
Gambar 4.7 Hasil Analisis Heatmap 25 Senyawa Profil Tertinggi Pada Sampel. 49	
Gambar 4.8 Hasil Analisis Dendrogram Pada Sampel	50
Gambar 4.9 Hasil Analisis Pohon Filogenetik Pada Keempat Sampel.....	50

DAFTAR LAMPIRAN

LAMPIRAN 1 Data Penimbangan Sampel Kacang	62
LAMPIRAN 2 Data Perhitungan	63
LAMPIRAN 3 Langkah Kerja Pengolahan Data Pada MS-DIAL	65
LAMPIRAN 4 Nilai Ion Prekursor Dalam Scanning PIS	67
LAMPIRAN 5 Optimasi Parameter MS-DIAL	72
LAMPIRAN 6 Kromatogram Hasil Analisis Sampel	73
LAMPIRAN 7 Hasil Identifikasi Spektra Massa	85
LAMPIRAN 8 Dokumentasi	96

DAFTAR PUSTAKA

- Abbas, Y., & Ahmad, A. (2018). Impact of processing on nutritional and anti-nutritional factors of legumes: A review. *Annal Food Sci. Technol*, *19*, 99–215.
- Abdi, H., & Williams, L. J. (2010). Principal component analysis. *Wiley interdisciplinary reviews: computational statistics*, *2*(4), 433–459.
- Ahmed, S., & Hasan, M. M. (2014). Legumes: an overview. *RADS Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences*, *2*(1), 34–38.
- Alcázar-Valle, M., Lugo-Cervantes, E., Mojica, L., Morales-Hernández, N., Reyes-Ramírez, H., Enríquez-Vara, J. N., & García-Morales, S. (2020). Bioactive Compounds, Antioxidant Activity, and Antinutritional Content of Legumes: A Comparison between Four Phaseolus Species. *Molecules*, *25*(15). <https://doi.org/10.3390/molecules25153528>
- Anca, P., Ignat, I., Volf, I., & Popa, V. (2011). Transformation of polyphenols from biomass by some yeast species. *Cellulose Chemistry and Technology*, *45*, 211–219.
- Aniszewski, T. (2015). *Chapter 2 - Alkaloid chemistry* (T. B. T.-A. (Second E. Aniszewski (ed.); hal. 99–193). Elsevier. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B978-0-444-59433-4.00002-X>
- Aryani, S., & Gurid, G. (2020). The Retention of Phytoestrogens (Daidzein And Genistein) on Tofu and Tempe due to fried and boiled treatments. *Sapporo Medical Journal*, *57*(7).
- Azka, N. A., & Sayekti, R. R. S. (2020). KARAKTERISASI AKSESI KACANG PANJANG (*Vigna unguiculata* subsp. *sesquipedalis*) LOKAL. *Agrinova: Journal of Agriculture Innovation*, *3*(2), 14–18. <https://doi.org/10.22146/a.62709>
- Beal, T., Tumilowicz, A., Sutrisna, | Aang, Doddy Izwardy, |, Neufeld, L. M., Gizi Masyarakat-Kementerian, D., & Ri, K. (2018). *A review of child stunting determinants in Indonesia*. <https://doi.org/10.1111/mcn.12617>
- Bordoloi, A. (2018). *A DETAILED STUDY ON OPTICAL AND PHYSICAL PROPERTIES OF RICE AND ITS BY-PRODUCTS*.
- Borresen, E. C., Zhang, L., Trehan, I., Nealon, N. J., Maleta, K. M., Manary, M. J., & Ryan, E. P. (2017). The Nutrient and Metabolite Profile of 3 Complementary Legume Foods with Potential to Improve Gut Health in Rural Malawian Children. *Current Developments in Nutrition*, *1*(10). <https://doi.org/10.3945/cdn.117.001610>
- Brown, P. N., Murch, S. J., & Shipley, P. (2012). Phytochemical diversity of cranberry (*Vaccinium macrocarpon* Aiton) cultivars by anthocyanin determination and metabolomic profiling with chemometric analysis. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, *60*(1), 261–271.

Agil Aprianto, 2022

ANALISIS METABOLOMIK UNTARGETED PADA KACANG PANJANG HITAM, HIJAU, AZUKI, DAN KECIPIR MENGGUNAKAN INSTRUMENTASI UHPLC-ESI-QTOF

Universitas Pendidikan Indonesia | repository.upi.edu | perpustakaan.upi.edu

<https://doi.org/10.1021/jf2033335>

- Bueno, P. C. P., & Lopes, N. P. (2020). Metabolomics to Characterize Adaptive and Signaling Responses in Legume Crops under Abiotic Stresses [Review-article]. *ACS Omega*, 5(4), 1752–1763. <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b03668>
- Cai, Z., Liao, H., Wang, C., Chen, J., Tan, M., Mei, Y., Wei, L., Chen, H., Yang, R., & Liu, X. (2020). A comprehensive study of the aerial parts of *Lonicera japonica* Thunb. based on metabolite profiling coupled with PLS-DA. *Phytochemical Analysis*, 31(6), 786–800.
- Candra, A. (2020). *Epidemiologi Stunting*. Fakultas Kedokteran Universitas Diponegoro.
- Chaves, J. O., de Souza, M. C., da Silva, L. C., Lachos-Perez, D., Torres-Mayanga, P. C., Machado, A. P. da F., Forster-Carneiro, T., Vázquez-Espinosa, M., González-de-Peredo, A. V., Barbero, G. F., & Rostagno, M. A. (2020). Extraction of Flavonoids From Natural Sources Using Modern Techniques. *Frontiers in Chemistry*, 8. <https://doi.org/10.3389/fchem.2020.507887>
- Chen, T., Yao, Q., Nasaruddin, R. R., & Xie, J. (2019). Electrospray Ionization Mass Spectrometry: A Powerful Platform for Noble-Metal Nanocluster Analysis. *Angewandte Chemie International Edition*, 58(35), 11967–11977. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/anie.201901970>
- Chernushevich, I. V., Loboda, A. V., & Thomson, B. A. (2001). An introduction to quadrupole–time-of-flight mass spectrometry. *Journal of Mass Spectrometry*, 36(8), 849–865. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/jms.207>
- Chin, W. W. (1998). The partial least squares approach to structural equation modeling. *Modern methods for business research*, 295(2), 295–336.
- Clemente, A., MacKenzie, D. A., Johnson, I. T., & Domoney, C. (2004). Investigation of legume seed protease inhibitors as potential anti-carcinogenic proteins. *Publication-European Association for Animal Production*, 110, 137–142.
- Falk, R. F., & Miller, N. B. (1992). A Primer for Soft Modeling. In *The University of Akron Press* (Nomor April). University of Akron Press. http://books.google.com/books/about/A_Primer_for_Soft_Modeling.html?id=3CFrQgAACAAJ
- Farag, M. A., Sharaf El-Din, M. G., Aboul-Fotouh Selim, M., Owis, A. I., & Abouzid, S. F. (2021). Mass spectrometry-based metabolites profiling of nutrients and anti-nutrients in major legume sprouts. *Food Bioscience*, 39, 100800. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.fbio.2020.100800>
- Flyman, M. V, & Afolayan, A. J. (2008). Effect of plant maturity on the mineral content of the leaves of *Momordica balsamina* L. and *Vigna unguiculata* subsp. *Sesquipedalis* (L.) Verdc. *Journal of Food Quality*, 31(5), 661–671. <https://doi.org/https://doi.org/10.1111/j.1745-4557.2008.00218.x>

Agil Aprianto, 2022

ANALISIS METABOLOMIK UNTARGETED PADA KACANG PANJANG HITAM, HIJAU, AZUKI, DAN KECIPIR MENGGUNAKAN INSTRUMENTASI UHPLC-ESI-QTOF

Universitas Pendidikan Indonesia | repository.upi.edu | perpustakaan.upi.edu

- FoodDB. (2022). *Predicted LC-MS/MS Spectrum*.
- Garcia, V., Palmer, J., & Young, R. (1979). Fatty acid composition of the oil of winged beans, *Psophocarpus tetragonolobus* (L.) DC. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, *56*, 931–932. <https://doi.org/10.1007/BF02674137>
- Ghatak, A., Chaturvedi, P., & Weckwerth, W. (2018). Metabolomics in plant stress physiology. *Plant Genetics and Molecular Biology*, 187–236.
- Ghisoni, S., Lucini, L., Rocchetti, G., Chiodelli, G., Farinelli, D., Tombesi, S., & Trevisan, M. (2020). Untargeted metabolomics with multivariate analysis to discriminate hazelnut (*Corylus avellana* L.) cultivars and their geographical origin. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, *100*(2), 500–508.
- Ghosh, Shibani, Suri, D., & Uauy, R. (2012). Assessment of protein adequacy in developing countries: quality matters. *British Journal of Nutrition*, *108*(S2), S77–S87. <https://doi.org/10.1017/S0007114512002577>
- Ghosh, Somsubhra, Challamalla, P., & Banji, D. (2012). Negative ion mode mass spectrometry- an overview. *Journal of Chemical, Biological and Physical Sciences*, *2*, 1462–1471.
- Gil Solsona, R., Boix, C., Ibáñez, M., & Sancho, J. V. (2018). The classification of almonds (*Prunus dulcis*) by country and variety using UHPLC-HRMS-based untargeted metabolomics. *Food Additives & Contaminants: Part A*, *35*(3), 395–403. <https://doi.org/10.1080/19440049.2017.1416679>
- Gissane, C. (2015). Is the data normally distributed? *Physiotherapy Practice and Research*, *37*, 57–60. <https://doi.org/10.3233/PPR-150069>
- Greiner, R., & Konietzny, U. (2006). Phytase for food application. *Food Technology & Biotechnology*, *44*(2).
- Gupta, Y. P. (1987). Anti-nutritional and toxic factors in food legumes: a review. *Plant Foods for Human Nutrition*, *37*(3), 201–228. <https://doi.org/10.1007/BF01091786>
- Hager, J. W., & Yves Le Blanc, J. C. (2003). Product ion scanning using a Q-q-Qlinear ion trap (Q TRAP™) mass spectrometer. *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, *17*(10), 1056–1064. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/rcm.1020>
- Heuze, V., Tran, G., Bastianelli, G., & Lebas, F. (2015, Juli 3). *Mung bean (Vigna radiata)*. Feedipedia, a programme by INRAE, CIRAD, AFZ and FAO. <https://www.feedipedia.org/node/235>
- HMDB. (2022). *Predicted LC-MS/MS Spectrum*.
- Horai, H., Suwa, K., Arita, M., Nihei, Y., & Nishioka, T. (2008). MassBank: Mass spectral database for metabolome analysis. *The 56th ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics, Denver, CO*.
- Hou, D., Yousaf, L., Xue, Y., Hu, J., Wu, J., Hu, X., Feng, N., & Shen, Q. (2019). Mung bean (*Vigna radiata* L.): bioactive polyphenols, polysaccharides, Agil Aprianto, 2022
- ANALISIS METABOLOMIK UNTARGETED PADA KACANG PANJANG HITAM, HIJAU, AZUKI, DAN KECIPIR MENGGUNAKAN INSTRUMENTASI UHPLC-ESI-QTOF
Universitas Pendidikan Indonesia | repository.upi.edu | perpustakaan.upi.edu

- peptides, and health benefits. *Nutrients*, *11*(6), 1238.
- ITIS. (2022). *Integrated Taxonomic Information System*. on-line database. www.itis.gov
- Jayanegara, A., Ridla, M., Laconi, E. B., & Komponen Pada Pakan, N. (2019). *Komponen Antinutrisi Pada Pakan*. IPB Press.
- John Wiley & Sons, I. (2022). *SpectraBase*. <https://spectrabase.com/about>
- Kemenkes RI. (2021). *Penurunan Prevalensi Stunting tahun 2021 sebagai Modal Menuju Generasi Emas Indonesia 2045*. kemkes.go.id.
- Khoomrung, S., Wanichthanarak, K., Nookaew, I., Thamsermsang, O., Seubnooch, P., Laohapand, T., & Akarasereenont, P. (2017). Metabolomics and integrative omics for the development of Thai traditional medicine. *Frontiers in Pharmacology*, *8*(JUL). <https://doi.org/10.3389/fphar.2017.00474>
- Kim, T. J., Park, J. G., Ahn, S. K., Kim, K. W., Choi, J., Kim, H. Y., Ha, S.-H., Seo, W. D., & Kim, J. K. (2020). Discrimination of adzuki bean (*Vigna angularis*) geographical origin by targeted and non-targeted metabolite profiling with gas chromatography time-of-flight mass spectrometry. *Metabolites*, *10*(3), 112.
- Krisnawati, A. (2010). Keragaman genetik dan potensi pengembangan kecipir (*Psophocarpus tetragonolobus* L.) di Indonesia. *Jurnal Litbang Pertanian*, *29*(3), 113–119.
- Lal, N., Barcchiya, J., Raypuriya, N., & Shiurkar, G. (2017). Anti-nutrition in legumes: Effect in human health and its elimination. *Innovative Farming*, *2*(1), 32–36.
- Liland, K. H. (2011). Multivariate methods in metabolomics—from pre-processing to dimension reduction and statistical analysis. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, *30*(6), 827–841.
- Llorach, R., Favari, C., Alonso, D., Garcia-Aloy, M., Andres-Lacueva, C., & Urpi-Sarda, M. (2019). Comparative metabolite fingerprinting of legumes using LC-MS-based untargeted metabolomics. *Food Research International*, *126*, 108666.
- Loris, R., Hamelryck, T., Bouckaert, J., & Wyns, L. (1998). Legume lectin structure. *Biochimica et biophysica acta (BBA)-Protein structure and molecular enzymology*, *1383*(1), 9–36.
- Ma, R., & Shih, K. (2010). Perfluorochemicals in wastewater treatment plants and sediments in Hong Kong. *Environmental pollution (Barking, Essex : 1987)*, *158*, 1354–1362. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2010.01.013>
- Matysiak, J., Dereziński, P., Klupczynska, A., Matysiak, J., Kaczmarek, E., & Kokot, Z. (2014). Effects of a Honeybee Sting on the Serum Free Amino Acid Profile in Humans. *PloS one*, *9*, e103533. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0103533>
- Mecha, E., Erny, G. L., Guerreiro, A. C. L., Feliciano, R. P., Barbosa, I., Bento da Agil Aprianto, 2022
ANALISIS METABOLOMIK UNTARGETED PADA KACANG PANJANG HITAM, HIJAU, AZUKI, DAN KECIPIR MENGGUNAKAN INSTRUMENTASI UHPLC-ESI-QTOF
 Universitas Pendidikan Indonesia | repository.upi.edu | perpustakaan.upi.edu

- Silva, A., Leitão, S. T., Veloso, M. M., Rubiales, D., Rodriguez-Mateos, A., Figueira, M. E., Vaz Patto, M. C., & Bronze, M. R. (2022). Metabolomics profile responses to changing environments in a common bean (*Phaseolus vulgaris* L.) germplasm collection. *Food Chemistry*, 370, 131003. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.131003>
- Mehta, S. S. (2020). *MassBank of North America (MoNA): An open-access, auto-curating mass spectral database for compound identification in metabolomics presentation*.
- Mohanty, C. S., Singh, V., & Chapman, M. A. (2020). Winged bean: An underutilized tropical legume on the path of improvement, to help mitigate food and nutrition security. *Scientia Horticulturae*, 260, 108789. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.scienta.2019.108789>
- Molport. (2022). *3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl 2,4-dihydroxy-6-[(1E)-2-phenylethenyl]benzoate, get quote*.
- Mushtaq, M. Y., Choi, Y. H., Verpoorte, R., & Wilson, E. G. (2014). Extraction for metabolomics: access to the metabolome. *Phytochemical Analysis*, 25(4), 291–306.
- Nature Portfolio. (2021). *Metabolomics*. Nature. <https://www.nature.com/subjects/metabolomics>
- NCBI. (2022). *Pubchem Compound Summary*.
- Östman, M. (2018). *Antimicrobials in sewage treatment plants*. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.30958.87367>
- Pang, Z., Chong, J., Zhou, G., de Lima Morais, D. A., Chang, L., Barrette, M., Gauthier, C., Jacques, P.-É., Li, S., & Xia, J. (2021). MetaboAnalyst 5.0: narrowing the gap between raw spectra and functional insights. *Nucleic Acids Research*, 49(W1), W388–W396. <https://doi.org/10.1093/nar/gkab382>
- Pedrosa, M. M., Cuadrado, C., Burbano, C., Allaf, K., Haddad, J., Gelencsér, E., Takács, K., Guillamón, E., & Muzquiz, M. (2012). Effect of instant controlled pressure drop on the oligosaccharides, inositol phosphates, trypsin inhibitors and lectins contents of different legumes. *Food Chemistry*, 131(3), 862–868.
- Perchuk, I., Shelenga, T., Gurkina, M., Miroshnichenko, E., & Burlyaeva, M. (2020). Composition of Primary and Secondary Metabolite Compounds in Seeds and Pods of Asparagus Bean (*Vigna unguiculata* (L.) Walp.) from China. In *Molecules* (Vol. 25, Nomor 17). <https://doi.org/10.3390/molecules25173778>
- PlantUse English contributors. (2015). *Vigna angularis (PROTA)*. PlantUse. [https://uses.plantnet-project.org/e/index.php?title=Vigna_angularis_\(PROTA\)&oldid=198622](https://uses.plantnet-project.org/e/index.php?title=Vigna_angularis_(PROTA)&oldid=198622)
- Popoola, J., Ojuederie, O., Omonhinmin, C., & Adegbite, A. (2019). Neglected and Underutilized Legume Crops: Improvement and Future Prospects. In F. Shah, Z. Khan, A. Iqbal, M. Turan, & M. Olgun (Ed.), *Recent Advances in Grain*
- Agil Aprianto, 2022
 ANALISIS METABOLOMIK UNTARGETED PADA KACANG PANJANG HITAM, HIJAU, AZUKI, DAN KECIPIR MENGGUNAKAN INSTRUMENTASI UHPLC-ESI-QTOF
 Universitas Pendidikan Indonesia | repository.upi.edu | perpustakaan.upi.edu

Crops Research. IntechOpen. <https://doi.org/10.5772/intechopen.87069>

- Pratiwi, R. A. (2021). How to read and interpret UV-VIS spectrophotometric results in determining the structure of chemical compounds. *Indonesian Journal of Educational Research and Technology*, 2(1), 1–20.
- Putri, S. P., & Fukusaki, E. (2014). *Mass spectrometry-based metabolomics: a practical guide*. CRC Press.
- Rahmawati, D., Astawan, M., Putri, S. P., & Fukusaki, E. (2021). Gas chromatography-mass spectrometry-based metabolite profiling and sensory profile of Indonesian fermented food (tempe) from various legumes. *Journal of Bioscience and Bioengineering*, 132(5), 487–495. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jbiosc.2021.07.001>
- Ranjha, M., Irfan, S., Lorenzo, J. M., Shafique, B., Kanwal, R., Pateiro, M., Arshad, R. N., Wang, L., Nayik, G., & Qazalbash, U. (2021). Sonication, a Potential Technique for Extraction of Phytoconstituents: A Systematic Review. *Processes*, 9, 1406. <https://doi.org/10.3390/pr9081406>
- Rathod, R. H., Chaudhari, S. R., Patil, A. S., & Shirkhedkar, A. A. (2019). Ultra-high performance liquid chromatography-MS/MS (UHPLC-MS/MS) in practice: analysis of drugs and pharmaceutical formulations. *Future Journal of Pharmaceutical Sciences*, 5(1), 6. <https://doi.org/10.1186/s43094-019-0007-8>
- Ratnasari, F. A., Wulandari, L., & Kristiningrum, N. (2016). Penentuan Kadar Fenol Total pada Ekstrak Daun Tanaman Menggunakan Metode Spektroskopi NIR dan Kemometrik (Determination of Total Phenolic in Leave Extracts Using Spectroscopy NIR and Chemometric). *e-Jurnal Pustaka Kesehatan*, 4(2), 235–240.
- Ratón, T. M. O., Vedey, I. B., & Cuypers, A. (2021). Biostimulation of *Vigna unguiculata* subsp. *sesquipedalis*—Cultivar *Sesquipedalis* (Yardlong Bean)—by *Brevibacillus* sp. B65 in Organoponic Conditions. *Current Microbiology*, 78(5), 1882–1891. <https://doi.org/10.1007/s00284-021-02453-5>
- Reed, J. D. (1995). Nutritional toxicology of tannins and related polyphenols in forage legumes. *Journal of animal science*, 73(5), 1516–1528.
- RIZA, F. K. (2019). *Pemanfaatan Biji Kecipir (Psophocarpus Tetragonolobus (L. DC) Sebagai Susu Nabati Dengan Adisi Ekstrak Pisang Ambon (Musa Paradisiaca Vaer Sapientum)*. UIN Raden Intan Lampung.
- Roberts, M. F. (2013). *Alkaloids: biochemistry, ecology, and medicinal applications*. Springer Science & Business Media.
- Ruiz-Perez, D., Guan, H., Madhivanan, P., Mathee, K., & Narasimhan, G. (2020). So you think you can PLS-DA? *BMC Bioinformatics*, 21(1), 2. <https://doi.org/10.1186/s12859-019-3310-7>
- Santos-Buelga, C., & Freitas, V. de. (2009). Influence of phenolics on wine organoleptic properties. In *Wine chemistry and biochemistry* (hal. 529–570).

Agil Aprianto, 2022

ANALISIS METABOLOMIK UNTARGETED PADA KACANG PANJANG HITAM, HIJAU, AZUKI, DAN KECIPIR MENGGUNAKAN INSTRUMENTASI UHPLC-ESI-QTOF

Universitas Pendidikan Indonesia | repository.upi.edu | perpustakaan.upi.edu

Springer.

- Semba, R. D., Ramsing, R., Rahman, N., Kraemer, K., & Bloem, M. W. (2021). Legumes as a sustainable source of protein in human diets. *Global Food Security*, 28, 100520.
- Shimadzu. (2020). *HRAM Mass Spectrometry: Understanding Mass Measurement Accuracy*. <https://www.an.shimadzu.com/hram-qtof-ms.html>
- Sim, C. O., Hamdan, M. R., Ismail, Z., & Ahmad, M. N. (2004). Assessment of herbal medicines by chemometrics–assisted interpretation of FTIR spectra. *J Analytica Chimica Acta*, 1, 14.
- Skoog, D. A., Holler, F. J., & Crouch, S. R. (2017). *Principles of instrumental analysis*. Cengage learning.
- Tamura, K., Stecher, G., & Kumar, S. (2021). MEGA11: molecular evolutionary genetics analysis version 11. *Molecular biology and evolution*, 38(7), 3022–3027.
- Thakur, A., Sharma, V., & Thakur, A. (2019). An overview of anti-nutritional factors in food. *International Journal of Chemical Studies*, 7(1), 2472–2479.
- Thompson, L. U. (1993). Potential health benefits and problems associated with antinutrients in foods. *Food Research International*, 26(2), 131–149.
- Tsamo, A. T., Mohammed, H., Mohammed, M., Papoh Ndibewu, P., & Dapare Dakora, F. (2020). Seed coat metabolite profiling of cowpea (*Vigna unguiculata* L. Walp.) accessions from Ghana using UPLC-PDA-QTOF-MS and chemometrics. *Natural Product Research*, 34(8), 1158–1162. <https://doi.org/10.1080/14786419.2018.1548463>
- Tsugawa, H. (2020). *MS-DIAL tutorial*. RIKEN Center for Sustainable Resource Science. <https://mtbinfo-team.github.io/mtbinfo.github.io/MS-DIAL/tutorial.html#section-10-4-4>
- Urbano, G., Lopez-Jurado, M., Aranda, P., Vidal-Valverde, C., Tenorio, E., & Porres, J. (2000). The role of phytic acid in legumes: antinutrient or beneficial function? *Journal of physiology and biochemistry*, 56(3), 283–294.
- Valdés, A., Álvarez-Rivera, G., Socas-Rodríguez, B., Herrero, M., Ibáñez, E., & Cifuentes, A. (2022). Foodomics: Analytical Opportunities and Challenges. *Analytical Chemistry*, 94(1), 366–381. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.1c04678>
- Wang, X., Höjer, B., Guo, S., Luo, S., Zhou, W., & Wang, Y. (2009). Stunting and “overweight” in the WHO Child Growth Standards -malnutrition among children in a poor area of China. *Public Health Nutrition*, 12(11), 1991–1998. <https://doi.org/10.1017/S1368980009990796>
- WHO. (2021). *The UNICEF/WHO/WB Joint Child Malnutrition Estimates (JME) group released new data for 2021*.
- Wiley & Sons. (2022). KnowItAll Spectroscopy Edition Software. In *Wiley Online Agil Aprianto, 2022*
- ANALISIS METABOLOMIK UNTARGETED PADA KACANG PANJANG HITAM, HIJAU, AZUKI, DAN KECIPIR MENGGUNAKAN INSTRUMENTASI UHPLC-ESI-QTOF
Universitas Pendidikan Indonesia | repository.upi.edu | perpustakaan.upi.edu

- Library*. <https://sciencesolutions.wiley.com/knowitall-spectroscopy-software/>
- Wold, S. (1995). Chemometrics; what do we mean with it, and what do we want from it? *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 30(1), 109–115. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0169-7439\(95\)00042-9](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0169-7439(95)00042-9)
- Yamane, H., Konno, K., Sabelis, M., Takabayashi, J., Sassa, T., & Oikawa, H. (2010). *Chemical defence and toxins of plants*.
- Yoshida, S., & Uemura, M. (1986). Lipid Composition of Plasma Membranes and Tonoplasts Isolated from Etiolated Seedlings of Mung Bean (*Vigna radiata* L.) 1 2. *Plant Physiology*, 82(3), 807–812. <https://doi.org/10.1104/pp.82.3.807>
- Zhang, Z., Murtagh, F., Van Poucke, S., Lin, S., & Lan, P. (2017). Hierarchical cluster analysis in clinical research with heterogeneous study population: highlighting its visualization with R. *Annals of Translational Medicine*, 5(4), 75. <https://doi.org/10.21037/atm.2017.02.05>
- Zhou, B., Xiao, J. F., Tuli, L., & Ransom, H. W. (2012). LC-MS-based metabolomics. *Mol. BioSyst.*, 8(2), 470–481. <https://doi.org/10.1039/C1MB05350G>