

## Kajian Graf Isomorfik Dan Penerapannya Dalam Ilmu Kimia

M.G. Arma Yoga Pratama<sup>1,\*</sup>, Notiragayu<sup>1</sup>, Yuli Ambarwati<sup>2</sup>, Fitriani<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Jurusan Matematika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lampung  
Jl. Prof. Dr. Soemantri Brojonegoro No. 1 Bandar Lampung

<sup>2</sup>Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lampung  
Jl. Prof. Dr. Soemantri Brojonegoro No. 1 Bandar Lampung

\*Email korespondensi: [armavogapratama5@gmail.com](mailto:armavogapratama5@gmail.com)

---

### Abstrak

Dua graf  $G = (E, V)$  dan  $G' = (E', V')$ , jika suatu fungsi  $f: V \rightarrow V'$  merupakan fungsi satu-satu sedemikian sehingga  $(u, v)$  adalah sisi dari  $G$  jika dan hanya jika  $(f(u), f(v))$  adalah sisi dari  $G'$ , maka  $f$  disebut suatu isomorfisma dari  $G$  dan  $G'$ . Apabila terdapat suatu isomorfisma antara  $G$  dan  $G'$ , maka  $G$  dan  $G'$  disebut dua graf isomorfik. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk memperoleh hasil graf yang saling isomorfik dari senyawa alkana dengan rantai  $C$  yang dimulai dari  $C_7H_{16}$  sampai  $C_9H_{20}$ . Isomer merupakan senyawa yang memiliki rumus molekul sama tetapi berbeda strukturnya. Bentuk dari masing-masing senyawa akan disusun ulang menggunakan aplikasi perangkat lunak yaitu MATLAB R2018a untuk memperoleh korespondensi satu-satu. Setelah hasil pencarian dengan Matlab diperoleh hasil bahwa pada senyawa  $C_7H_{16}$  tidak terdapat senyawa yang saling isomorfik, sedangkan pada senyawa  $C_8H_{18}$  dan  $C_9H_{20}$  terdapat sepasang graf yang saling isomorfik dari  $C_8H_{18}$  yaitu 3-etil-2-metil Pentana dan 3-isopropil Pentana, kemudian pada senyawa  $C_9H_{20}$  terdapat dua pasang dari 4 buah graf yaitu 3-etil-2-metil Heksana dengan 3-isopropil Heksana dan 3-etil-2,3-dimetil Pentana dengan 3-isopropil-3-metil Pentana.

**Kata kunci:** graf isomorfik, isomer, alkana.

---

### Abstract

Two graphs  $G = (E, V)$  and  $G' = (E', V')$ , if a function  $f: V \rightarrow V'$  is a one-to-one function such that  $(u, v)$  is an edge of  $G$  if and only if  $(f(u), f(v))$  is an edge of  $G'$ , then  $f$  is called an isomorphism of  $G$  and  $G'$ . If there is an isomorphism between  $G$  and  $G'$ , then  $G$  and  $G'$  are called two isomorphic graphs. The purpose of this research is to obtain result mutually isomorphic graphs of alkane compounds with  $C$  chains starting from  $C_7H_{16}$  to  $C_9H_{20}$ . Isomer are compounds that have the same molecular formula but different structures. The shape of each compound will be rearranged using a software application, namely MATLAB R2018a to obtain a one-to-one correspondence. After searching result with Matlab obtained the results that the compound  $C_7H_{16}$  there are no mutually isomorphic compounds, while in the compounds  $C_8H_{18}$  and  $C_9H_{20}$  there is a pair of mutually isomorphic graphs of  $C_8H_{18}$ , those are 3-ethyl-2-methyl pentane and 3-isopropyl Pentane, then in the compound  $C_9H_{20}$  there are two pairs of 4 graphs, those are 3-ethyl-2-methyl Hexane with 3-isopropyl Hexane and 3-ethyl-2,3-dimethyl Pentane with 3-isopropyl-3-methyl pentane.

**Keywords:** isomorphic graph, isomer, alkane.

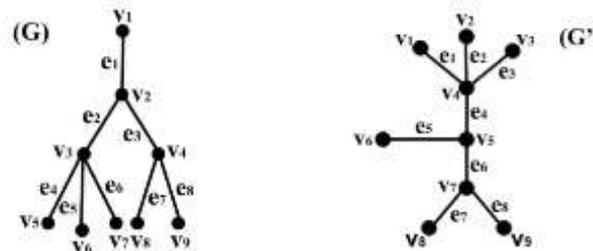
---

### 1. Pendahuluan

Suatu graf  $G=(V(G),E(G))$  terdiri dari 2 himpunan berhingga yaitu  $V(G)$  himpunan tak kosong dari titik-titik (vertex), biasanya dinotasikan dengan  $v$  dan  $E(G)$  adalah himpunan (mungkin kosong) dari sisi yang menghubungkan sepasang titik (edge), biasanya dinotasikan dengan  $e$ . Setiap elemen  $e$  dalam  $E(G)$  merupakan sebuah pasangan tak berurutan dari titik-titik di  $V(G)$  [1,2].

Semakin banyak permasalahan yang bisa diselesaikan menggunakan teori graf, hal tersebut membuat teori graf semakin berkembang pesat hingga saat ini. Salah satu kajian dalam teori graf adalah graf isomorfik. Diberikan dua graf dengan  $G = (V(G), E(G))$  dan  $G' = (V(G'), E(G'))$ . Graf  $G$  dikatakan isomorfik dengan graf  $G'$  jika dan hanya jika ada korespondensi satu-satu dari himpunan titik  $V(G)$  ke  $V(G')$  dan himpunan sisi

$E(G)$  ke  $E(G')$  sehingga derajat satu titik di  $G$  sama dengan derajat titik korespondensinya di  $G'$ [2]. Berikut ini merupakan contoh graf isomorfik pada Gambar 1.



**Gambar 1. Contoh Graf Isomorfik**

Untuk menunjukkan bahwa  $G$  isomorfik dengan  $G'$ , maka harus berusaha menentukan korespondensi satu-satu titik dan sisi kedua graf.

1. Dalam  $G$   $v_1$  bertetangga dengan  $v_2$ , sedangkan dalam  $G'$   $v_1$  bertetangga dengan  $v_4$
2. Dalam  $G$   $v_2$  bertetangga dengan  $v_1$ ,  $v_3$ , dan  $v_4$ , sedangkan dalam  $G'$   $v_2$  bertetangga dengan  $v_4$
3. Dalam  $G$   $v_3$  bertetangga dengan  $v_2$ ,  $v_5$ ,  $v_6$ , dan  $v_7$ , sedangkan dalam  $G'$   $v_3$  bertetangga dengan  $v_4$
4. Dalam  $G$   $v_4$  bertetangga dengan  $v_2$ ,  $v_8$ , dan  $v_9$ , sedangkan dalam  $G'$   $v_4$  bertetangga dengan  $v_1$ ,  $v_2$ ,  $v_3$ , dan  $v_5$

Fungsi  $g : V(G) \rightarrow V(G')$  didefinisikan dengan

1.  $g(v_1) = v'_6$
2.  $g(v_2) = v'_5$
3.  $g(v_3) = v'_4$
4.  $g(v_4) = v'_7$
5.  $g(v_5) = v'_1$
6.  $g(v_6) = v'_2$
7.  $g(v_7) = v'_3$
8.  $g(v_8) = v'_9$
9.  $g(v_9) = v'_8$

Dua graf dikatakan isomorfik apabila memenuhi beberapa syarat berikut:

1. Memiliki jumlah titik yang sama pada graf  $G$  dan  $G'$
2. Memiliki jumlah sisi yang sama pada graf  $G$  dan  $G'$
3. Jumlah titik dengan derajat tertentu dalam graf  $G$  dan  $G'$  sama

Apabila dua graf yang berbeda tidak memenuhi syarat tersebut, maka sudah pasti graf tersebut tidak isomorfik.

Dalam ilmu kimia, graf digunakan untuk memodelkan bentuk senyawa, suatu senyawa yang berbeda dapat mempunyai formula molekuler yang sama tetapi bisa berbeda dalam strukturnya. Suatu senyawa dapat memiliki rumus molekuler yang sama, tetapi berbeda dalam penyusunan dan strukturnya disebut sebagai isomer. Pada penelitian ini akan dikaji mengenai graf isomorfik dan penerapannya dalam ilmu kimia dengan senyawa  $C_7H_{16} - C_9H_{20}$  menggunakan aplikasi MATLAB R2018a.

## 2. Metode Penelitian

Analisis data yang digunakan pada penelitian ini menggunakan software MATLAB R2018a. Langkah-langkah dalam pengerjaan graf isomorfik pada senyawa isomer  $C_7H_{16} - C_9H_{20}$  adalah sebelum memulai pengerjaan dilakukan pengkajian graf isomorfik dari berbagai literatur. Setelah proses pengkajian, dilakukan proses Penerapan graf isomorfik dalam ilmu kimia yakni isomer, pembuatan dimulai dari perhitungan rumus molekuler  $C_7H_{16} - C_9H_{20}$  untuk mencari isomernya. Lalu, Penginputan manual sebanyak jumlah isomer dari rumus molekuler menggunakan software aplikasi MATLAB R2018a dan memasukkan input Node Pairs (s,t) untuk memunculkan titik dalam software aplikasi MATLAB R2018a. Lalu, masukkan syntax  $G=\text{graph}$  untuk membentuk graf dari input yang telah dimasukkan. Setelah proses panjang, untuk mencari derajat dan ketetangannya pada bentuk senyawa masukkan perintah Degree dan Adjacency untuk dapat melihat derajat dari masing-masing titik serta melihat matriks ketetanggaan dari sebuah graf. Untuk memunculkan graf yang telah dibuat, gunakan syntax  $\text{plot}(G)$ . Setelah itu, run untuk pengecekan apakah dari program yang kita masukkan benar atau salah. Pengecekan graf apakah isomorfik menggunakan perintah  $\text{isomorphism}$  dalam matlab diperlukan untuk melihat hasil running sesuai.

### 3. Hasil dan Pembahasan

#### 3.1 Kajian Graf Isomorfik

Untuk mengetahui dua graf  $G_1$  dan  $G_2$  saling isomorfik, maka kita perlu menata ulang titik pada kedua graf tersebut. Untuk menata ulang titik dari dua graf tersebut maka perlu pertimbangan yang menjadi syarat graf tersebut saling isomorfik. Graf isomorfik digunakan untuk membandingkan dua graf yang memiliki bentuk berbeda tetapi sama dalam strukturnya dengan mempertahankan ketetanggaannya.

Penerapan graf isomorfik bisa digunakan di banyak bidang ilmu terutama ilmu matematika tetapi graf isomorfik juga bisa digunakan dalam bidang ilmu kimia untuk memodelkan senyawa molekul dan membandingkan bentuk grafnya. Setiap senyawa yang memiliki bentuk yang berbeda mempunyai kegunaan tersendiri tetapi sama dalam strukturnya. Kegunaan senyawa  $C_7H_{16}$  untuk pelarut, bahan bakar mesin, dan bensin yang bersifat cair, sedangkan untuk  $C_8H_{18}$  dan  $C_9H_{20}$  juga bersifat cair dengan kegunaan sebagai minyak bakar, minyak diesel, bensin, dan minyak tanah (*gasoline*).

#### 3.2 Isomer Senyawa $C_7H_{16}$

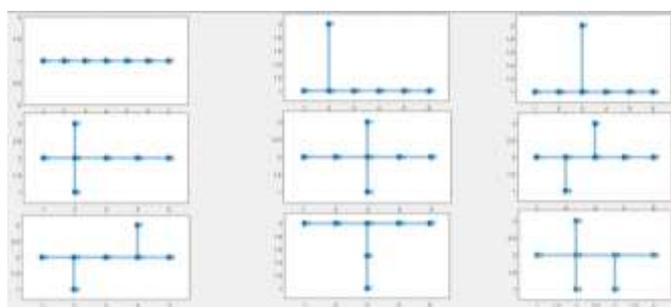
Setelah pencarian secara manual didapatkan bahwa isomer dari senyawa  $C_7H_{16}$  berjumlah 9 buah. Berikut merupakan ringkasan hasil *running script* dan plot gambar dari masing-masing senyawa yang disajikan pada Tabel 1.

**Tabel 1. Degree dan adjacency senyawa  $C_7H_{16}$**

No	Senyawa	Degree		Adjacency			
1	Heptana	1	2	(2,1)	1	(5,4)	1
		2	2	(1,2)	1	(4,5)	1
		2	1	(3,2)	1	(6,5)	1
		2		(2,3)	1	(5,6)	1
				(4,3)	1	(7,6)	1
				(3,4)	1	(6,7)	1
2	2-metil Heksana	1	2	(2,1)	1	(3,4)	1
		3	1	(1,2)	1	(5,4)	1
		2	1	(3,2)	1	(4,5)	1
		2		(7,2)	1	(6,5)	1
				(2,3)	1	(5,6)	1
				(4,3)	1	(2,7)	1
3	3-metil Heksana	1	2	(2,1)	1	(3,4)	1
		2	1	(1,2)	1	(5,4)	1
		3	1	(3,2)	1	(4,5)	1
		2		(2,3)	1	(6,5)	1
				(4,3)	1	(5,6)	1
				(7,3)	1	(3,7)	1
4	2,2-dimetil Pentana	1	1	(2,1)	1	(4,3)	1
		4	1	(1,2)	1	(3,4)	1
		2	1	(3,2)	1	(5,4)	1
		2		(6,2)	1	(4,5)	1
				(7,2)	1	(2,6)	1
				(2,3)	1	(2,7)	1
5	3,3-dimetil Pentana	1	1	(2,1)	1	(7,3)	1
		2	1	(1,2)	1	(3,4)	1
		4	1	(3,2)	1	(5,4)	1
		2		(2,3)	1	(4,5)	1
				(4,3)	1	(3,6)	1
				(6,3)	1	(3,7)	1
6	2,3-dimetil Pentana	1	1	(2,1)	1	(7,3)	1
		3	1	(1,2)	1	(3,4)	1
		3	1	(3,2)	1	(5,4)	1
		2		(6,2)	1	(4,5)	1
				(2,3)	1	(2,6)	1
				(4,3)	1	(3,7)	1
7	2,4-dimetil Pentana	1	1	(2,1)	1	(3,4)	1
		3	1	(1,2)	1	(5,4)	1
		2	1	(3,2)	1	(7,4)	1

		3		(6,2)	1	(4,5)	1
				(2,3)	1	(2,6)	1
				(4,3)	1	(4,7)	1
8	3-etil Pentana	1	1	(2,1)	1	(3,4)	1
		2	2	(1,2)	1	(5,4)	1
		3	1	(3,2)	1	(4,5)	1
		2		(2,3)	1	(3,6)	1
				(4,3)	1	(7,6)	1
				(6,3)	1	(6,7)	1
9	2,2,3-trimetil Butana	1	1	(2,1)	1	(4,3)	1
		4	1	(1,2)	1	(7,3)	1
		3	1	(3,2)	1	(3,4)	1
		1		(5,2)	1	(2,5)	1
				(6,2)	1	(2,6)	1
				(2,3)	1	(3,7)	1

Berikut merupakan hasil *running* plot gambar yang isomorfik dari senyawa  $C_7H_{16}$  yang disatukan dalam satu bingkai dalam Gambar 2.



**Gambar 2.** Hasil plot gambar senyawa dari senyawa  $C_7H_{16}$

Keterangan:

1. Pada baris pertama dari kiri merupakan plot gambar senyawa Heptana, 2-metil Heksana, dan 3-metil Heksana
2. Pada baris kedua dari kiri merupakan plot gambar senyawa 2,2-dimetil Pentana, 3,3-dimetil Pentana, dan 2,3-dimetil Pentana
3. Pada baris terakhir dari kiri merupakan plot gambar senyawa 2,4-dimetil Pentana, 3-etil Pentana, dan 2,2,3-trimetil Butana

Untuk senyawa selanjutnya yaitu  $C_8H_{18}$  -  $C_9H_{20}$  proses *running* tidak jauh berbeda dengan senyawa  $C_7H_{16}$ . Untuk  $C_8H_{18}$  berdasarkan pencarian manual menghasilkan 17 isomer, sedangkan  $C_9H_{20}$  menghasilkan 37 isomer.

### 3.3 Membandingkan Graf Senyawa Isomer Menggunakan Perintah *Isomorphism* Pada Isomer $C_7H_{16}$

Langkah selanjutnya setelah proses penentuan graf dari masing-masing isomer dari yaitu  $C_7H_{16}$  -  $C_9H_{20}$  adalah pengecekan graf menggunakan perintah *isomorphism*. Berdasarkan hasil *running* dan *re-order* titik dapat disimpulkan bahwa isomer pada senyawa  $C_7H_{16}$  tidak saling isomorfik karena menunjukkan

$$p = \begin{bmatrix} \end{bmatrix}$$

Berdasarkan hasil *running* pada senyawa  $C_8H_{18}$  didapat hasil bahwa hanya terdapat 2 senyawa yang saling isomorfik yaitu senyawa 3-etil-2-metil Pentana dan 3-isopropil Pentana.

p =

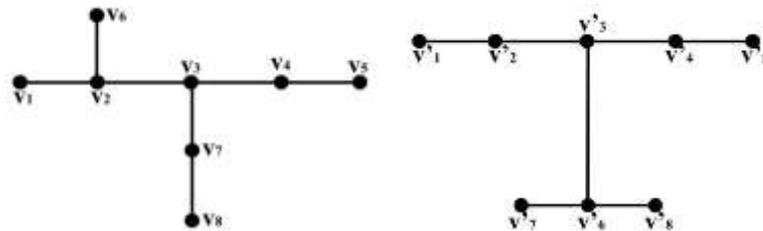
- 7
- 6
- 3
- 2
- 1
- 8

4  
5

Setelah dilakukan proses *reorder* ( $G_{2,p}$ ), permutasi vektor pada titik akan muncul setelah dilakukan proses *running*. Untuk menunjukkan bahwa kedua senyawa tersebut saling isomorfik, maka tentukan korespondensi antara kedua graf tersebut. Fungsi  $g : V(G) \rightarrow V(G')$  didefinisikan dengan

- $g(v_1) = v'_7$
- $g(v_2) = v'_6$
- $g(v_3) = v'_3$
- $g(v_4) = v'_2$
- $g(v_5) = v'_1$
- $g(v_6) = v'_8$
- $g(v_7) = v'_4$
- $g(v_8) = v'_5$

Berikut merupakan gambar dari sepasang senyawa yang saling isomorfik pada senyawa  $C_8H_{18}$  yang disajikan dalam Gambar 3.



**Gambar 3. Graf 3-etil-2-metil Pentana dengan 3-isopropil Pentana yang saling isomorfik**

Berdasarkan hasil *running* pada senyawa  $C_9H_{20}$  didapat 2 pasang dari 4 isomer yang saling isomorfik yaitu 3-etil-2-metil Heksana dengan 3-isopropil Heksana dan 3-etil-2,3-dimetil Pentana dengan 3-isopropil-3-metil Pentana.

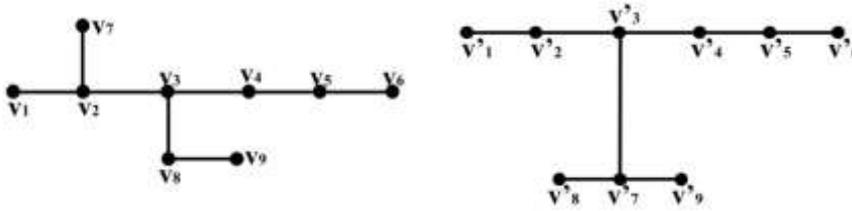
Untuk 3-etil-2-metil Heksana dengan 3-isopropil Heksana permutasi vektor yang muncul setelah proses *reorder* sebagai berikut:

p =  
8  
7  
3  
4  
5  
6  
9  
2  
1

Untuk menunjukkan keduanya saling isomorfik maka tentukan korespondensi antara kedua graf tersebut. Fungsi  $g : V(G) \rightarrow V(G')$  didefinisikan dengan

- $g(v_1) = v'_8$
- $g(v_2) = v'_7$
- $g(v_3) = v'_3$
- $g(v_4) = v'_4$
- $g(v_5) = v'_5$
- $g(v_6) = v'_6$
- $g(v_7) = v'_9$
- $g(v_8) = v'_2$
- $g(v_9) = v'_1$

Berikut merupakan gambar dari 3-etil-2-metil Heksana dengan 3-isopropil Heksana yang disajikan dalam Gambar 4.



Gambar 4. Graf 3-etil-2-metil Heksana dengan 3-isopropil Heksana yang saling isomorfik

Untuk 3-etil-2,3-dimetil Pentana dengan 3-isopropil-3-metil Pentana permutasi vektor yang muncul setelah proses *re-order* sebagai berikut:

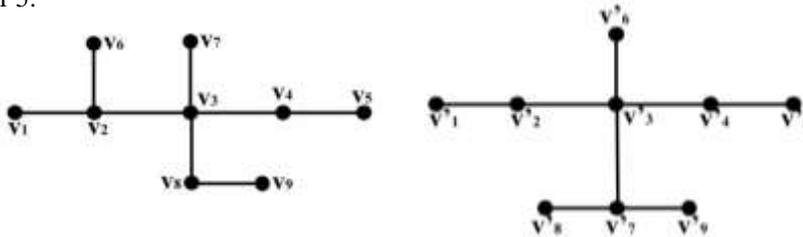
$p =$   
 8  
 7  
 3  
 2  
 1  
 9  
 6  
 4  
 5

Untuk menunjukkan keduanya saling isomorfik maka tentukan korespondensi antara kedua graf tersebut.

Fungsi  $g : V(G) \rightarrow V(G')$  didefinisikan dengan

- $g(v_1) = v'_8$
- $g(v_2) = v'_7$
- $g(v_3) = v'_3$
- $g(v_4) = v'_2$
- $g(v_5) = v'_1$
- $g(v_6) = v'_9$
- $g(v_7) = v'_6$
- $g(v_8) = v'_4$
- $g(v_9) = v'_5$

Berikut merupakan gambar dari 3-etil-2,3-dimetil Pentana dengan 3-isopropil-3-metil Pentana yang disajikan dalam Gambar 5.



Gambar 5. Graf 3-etil-2,3-dimetil Pentana dengan 3-isopropil-3-metil Pentana yang saling isomorfik

#### 4. Kesimpulan

Berdasarkan hasil *running* menggunakan aplikasi MATLAB R2018a pada senyawa  $C_7H_{16}$ -  $C_9H_{20}$  mendapatkan hasil untuk senyawa pada  $C_7H_{16}$  dengan jumlah isomer 9 tidak ada isomer yang saling isomorfik, untuk senyawa pada  $C_8H_{18}$  dengan jumlah isomer 17 terdapat 2 buah isomer yang saling isomorfik yaitu 3-etil-2-metil Pentana dan 3-isopropil Pentana, dan untuk senyawa pada  $C_9H_{20}$  dengan jumlah isomer 37 terdapat 2 buah pasang dari 4 buah isomer yang saling isomorfik yaitu 3-etil-2-metil Heksana dengan 3-isopropil Heksana dan 3-etil-2,3-dimetil Pentana dengan 3-isopropil-3-metil Pentana. Isomer saling isomorfik hanya jika alkana mempunyai rantai yang panjang, diketahui hanya mulai terdapat isomer yang saling isomorfik pada senyawa dengan *carbon* berjumlah 8 dan *hidrogen* berjumlah 18 atau  $C_8H_{18}$ , sedangkan pada senyawa  $C_7H_{16}$  tidak ada yang saling isomorfik.

**Daftar Pustaka:**

- [1] Budayasa, I.K. 2007. *Teori Graf dan Aplikasinya*. Unesa University Press, Surabaya.
- [2] Farida Daniel dan Prida N. L. Taneo. 2019. *Teori Graf*. CV Budi Utama, Daerah Istimewa Yogyakarta.
- [3] Siang, J.J. 2002. *Matematika Diskrit dan Aplikasinya pada Ilmu Komputer*. ANDI, Yogyakarta.