

Aplikasi Graf dalam Struktur Molekul Kimia

Megariza¹⁾ – NIM: 13507076

1) Jurusan Teknik Informatika ITB, Bandung, email: megariza@students.itb.ac.id

Abstract – Makalah ini membahas tentang penggunaan graf dalam pemodelan struktur molekul kimia. Simpul graf melambangkan atom-atom yang terdapat dalam molekul, sedangkan sisi graf menggambarkan ikatan kimia antarmolekul tersebut. Graf yang dibahas pada makalah ini adalah graf berbobot dan graf berarah. Graf berbobot digunakan untuk merepresentasikan model struktur kimia yang memiliki ikatan kovalen, dengan kekuatan ikatan kimia rata-rata ataupun panjang ikatan rata-rata unsur-unsurnya sebagai bobot atau nilai dari graf tersebut. Graf berarah digunakan untuk memodelkan struktur molekul kimia yang mengandung ikatan ion. Graf berarah adalah graf yang setiap sisinya diberikan orientasi arah, digunakan untuk menggambarkan proses, peta, dan sebagainya. Pangkal dari sisi graf berarah merupakan ion positif, sedangkan ujungnya merupakan ion negatif dari molekul. Struktur kimia yang lebih kompleks dapat digambarkan dengan graf tak sederhana.

Kata Kunci: graf, graf berarah, graf berbobot, struktur molekul kimia, energi ikatan rata-rata, panjang ikatan rata-rata.

1. PENDAHULUAN

Graf merupakan salah satu hal yang dipelajari dan digali dalam ilmu struktur diskrit. Teori graf merupakan pokok bahasan yang memiliki banyak pengaplikasian. Walaupun telah ada sejak puluhan tahun yang lalu, graf masih merupakan topic yang menarik untuk dikaji lebih dalam, termasuk bagaimana saja graf dapat diaplikasikan. Graf digunakan untuk merepresentasikan objek-objek diskrit (dilambangkan dengan simpul graf) dan hubungan antara objek-objek tersebut (dilambangkan dengan sisi graf) [1].

Sama halnya dengan graf, ilmu kimia sudah berkembang sejak puluhan tahun yang lalu. Salah satu hal yang harus dipahami dalam pembelajaran kimia adalah tentang struktur molekul. Beberapa struktur molekul kimia merupakan hal yang sangat kompleks untuk dimodelkan.

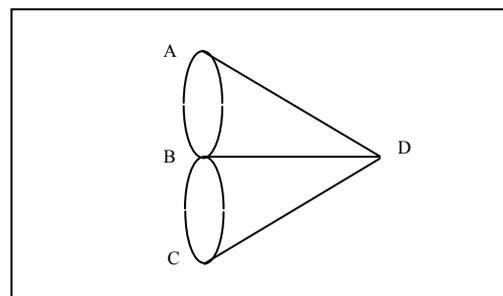
Di dalam makalah ini, ingin dimodelkan struktur molekul kimia dengan menggunakan graf berarah maupun graf berbobot. Sehingga salah satu bentuk aplikasi graf adalah untuk merepresentasikan model struktur kimia.

2. GRAF

Teori Graf adalah ilmu yang berkembang sangat pesat, bahkan dalam perkembangannya dapat disejajarkan dengan ilmu Aljabar yang lebih dahulu berkembang. Ilmu Aljabar (abstrak) yang merupakan bagian dari ilmu Matematika, pada dasarnya berkembang pesat karena dia berhubungan dengan himpunan, operasi, dan sifat struktur-struktur di dalamnya.

Keunikan Teori Graf adalah kesederhanaan pokok bahasan yang dipelajarinya, karena dapat disajikan sebagai titik (*verteks*) dan garis (*edge*). [2]

Graf telah dikenal sejak tahun 1736 M, dan diperkenalkan melalui permasalahan jembatan Königsberg. Di kota Königsberg (sebelah timur Prussia, Jerman sekarang), terdapat sungai Pregal yang mengalir mengitari pulau Kneiphof lalu bercabang menjadi dua buah anak sungai. Ada tujuh buah jembatan yang menghubungkan daratan yang dibelah oleh sungai tersebut. Masalah jembatan Königsberg adalah: apakah mungkin masing-masing ketujuh buah jembatan itu dapat dilalui tepat sekali, dan kembali ke tempat semula. L. Euler, matematikawan Prancis berhasil menemukan jawaban permasalahan itu dengan pembuktian yang sederhana. Ia memodelkan masalah ini ke dalam graf. Dengan wilayah daratan sebagai simpul (A, B, C, D) dan jembatan sebagai sisi graf.



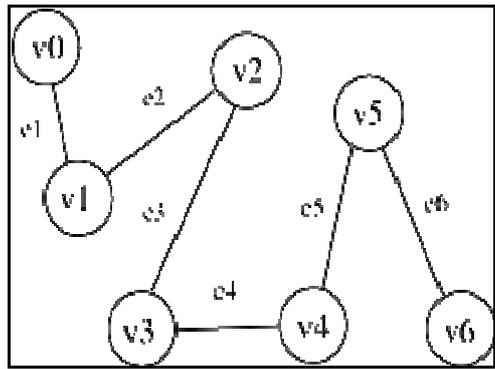
Gambar 1: Pemodelan jembatan Königsberg dengan graf

2.1. Definisi Graf

Secara matematis, graf didefinisikan sebagai berikut:

Definisi 1
 Graf G didefinisikan sebagai pasangan himpunan (V, E) , yang dalam hal ini:
 V = himpunan tidak kosong dari simpul-simpul = $\{v_1, v_2, v_3, \dots, v_n\}$
 Dan
 E = himpunan sisi yang menghubungkan sepasang simpul = $\{e_1, e_2, e_3, \dots, e_n\}$
 Atau dapat ditulis singkat dengan notasi $G = (V, E)$.

Definisi 1 menyatakan bahwa V tidak boleh kosong, sedangkan E boleh kosong. Jadi sebuah graf dimungkinkan tidak mempunyai sisi, tetapi harus memiliki simpul, minimal satu. Graf yang hanya memiliki satu buah simpul tanpa sisi disebut graf trivial [1].



Gambar 2: Contoh Graf

2.2. Jenis-jenis Graf

Berdasarkan ada atau tidaknya gelang atau sisi ganda pada suatu graf, maka secara umum graf dapat digolongkan menjadi dua jenis, yaitu:

1. Graf Sederhana
 Graf yang tidak mengandung gelang maupun sisi ganda dinamakan graf sederhana
2. Graf tak sederhana
 Graf yang mengandung sisi ganda atau gelang dinamakan graf tak sederhana. Graf tak sederhana sendiri terbagi menjadi dua macam, yaitu graf ganda dan graf semu. Graf ganda adalah graf yang mengandung sisi ganda, sedangkan graf semu adalah graf yang mengandung gelang.

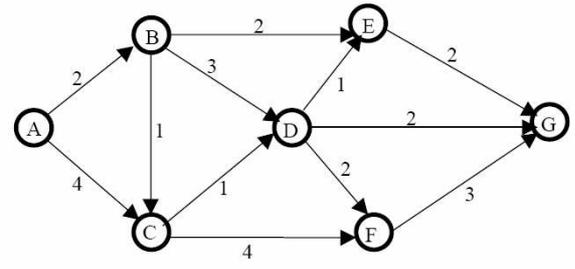
Berdasarkan jumlah simpul pada graf, maka secara umum graf dapat dikelompokkan menjadi dua macam:

1. Graf berhingga
 Graf berhingga adalah graf yang jumlah simpulnya, n , berhingga.
2. Graf tak berhingga
 Graf yang jumlah simpulnya, n , tidak berhingga

banyaknya disebut dengan graf tidak berhingga.

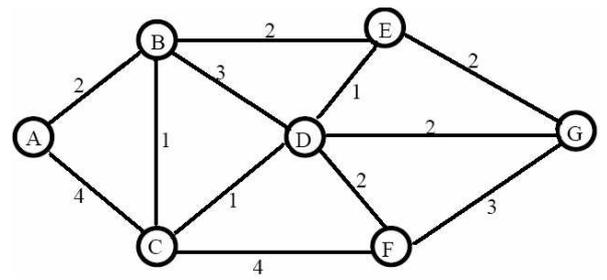
Menurut arah dan bobotnya, graf dibagi menjadi empat bagian, yaitu[3] :

1. Graf berarah dan berbobot
 Graf ini tiap busurnya mempunyai anak panah dan bobot. Gambar 3 menunjukkan graf berarah dan berbobot yang terdiri dari tujuh titik yaitu titik A,B,C,D,E,F,G. Titik menunjukkan arah ke titik B dan titik C, titik B menunjukkan arah ke titik D dan titik C, dan seterusnya. Bobot antar titik A dan titik B pun telah di ketahui.



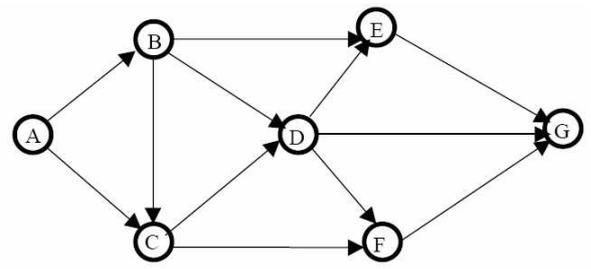
Gambar 3: Graf berarah dan berbobot

2. Graf tidak berarah dan berbobot
 Graf ini tiap busurnya tidak mempunyai anak panah tetapi mempunyai bobot. Gambar 4 menunjukkan graf tidak berarah dan berbobot. Graf terdiri dari tujuh titik yaitu titik A,B,C,D,E,F,G. Titik A tidak menunjukkan arah ke titik B atau C, namun bobot antara titik A dan titik B telah diketahui. Begitu juga dengan titik yang lain.



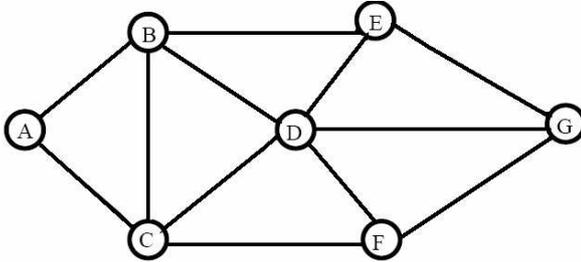
Gambar 4: Graf tidak berarah dan berbobot

3. Graf berarah dan tidak berbobot
 Graf ini tiap busurnya mempunyai anak panah yang tidak berbobot. Gambar 5 menunjukkan graf berarah dan tidak berbobot.



Gambar 5: Graf berarah dan tidak berbobot

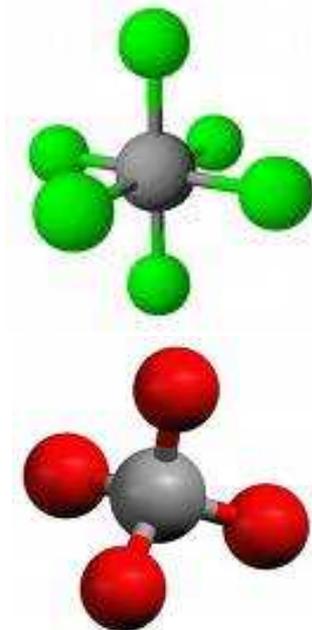
4. Graf tidak berarah dan tidak berbobot
 Pada graf ini, tiap busur tidak mempunyai anak panah dan tidak berbobot.



Gambar 6: Graf tidak berarah dan tidak berbobot

3. MOLEKUL KIMIA

Dalam dunia kimia dikenal adanya suatu bentuk zat yang bernama molekul. Molekul adalah suatu agregat (kumpulan) yang terdiri dari sedikitnya dua atom dalam susunan tertentu yang terikat bersama oleh gaya-gaya kimia (disebut juga ikatan kimia). Suatu molekul dapat mengandung atom-atom dari unsur yang sama atau atom-atom dari dua atau lebih unsur yang bergabung dalam perbandingan tertentu. Jadi, suatu molekul tidak harus berupa senyawa (yang terbentuk dari dua atau lebih unsur). Contoh molekul adalah H_2O , CO_2 , dan O_2 . [4]



Gambar 7: Contoh molekul kimia

3.1. Ikatan Kimia

Dua atom dapat berinteraksi dan membentuk molekul. Interaksi ini selalu disertai dengan pengeluaran energi. Gaya-gaya yang menahan atom-atom dalam molekul disebut dengan ikatan. Ikatan ini merupakan ikatan kimia. Dalam hal ini, akan terbentuk suatu zat baru dengan sifat-sifat yang khas.

Atom-atom dapat saling terikat dengan cara:

1. Perpindahan elektron dari suatu atom ke atom yang lain

Misalnya, atom natrium melepaskan elektron, lalu natrium menjadi ion positif. Atom klor menerima elektron dan menjadi ion negatif. Kedua ion ini yang muatannya berlawanan saling tarik-menarik secara elektrostatis dalam kisi ion. Ikatan macam ini disebut ikatan ion.

Ikatan ion adalah gaya tarik-menarik antara dua ion yang berlawanan muatan yang terbentuk melalui perpindahan elektron. Ikatan ion juga disebut ikatan elektrovalen.

2. Pemakaian bersama elektron oleh dua atom

Dalam hal ini, kulit elektron terluar kedua atom bertindihan dan terbentuk pasangan-pasangan ikatan, yang digunakan bersama oleh kedua atom. Ikatan ini dinamakan ikatan kovalen.

Ikatan kovalen adalah gaya tarik menarik antara dua atom sebagai akibat pemakaian bersama pasangan elektron.

Selain ikatan kovalen dan ikatan ion, dikenal pula ikatan logam, ikatan hidrogen, dan gaya Van der Waals.

Pada ikatan logam, atom-atom yang terkait dengan cara pemakaian bersama elektron oleh semua atom dalam kisi. Ikatan logam adalah gaya tarik-menarik antara dua ion logam yang positif dan elektron-elektron terlokalisasi di antara ion-ion tersebut.

Pada ikatan hidrogen, atom hidrogen menjembatani dua atom yang keelektronegatifannya besar.

Gaya tarik-menarik antara partikel-partikel tak bermuatan yang kulit elektronnya penuh disebut dengan gaya Van der Waals.

3.2. Ikatan Ion

Ikatan ion muncul sebagai akibat dari gaya tarik-menarik antara ion yang bermuatan negatif, yang dihasilkan karena perpindahan elektron. Pada pembentukan natrium klorida, misalnya, Na melepaskan elektron valensinya dan berubah menjadi ion Na^+ . Elektron ini diterima oleh atom Cl yang berubah menjadi ion Cl^- . Interaksi antara ion-ion ini kemudian menghasilkan pasangan ion $Na^+ Cl^-$ yang mempunyai energi potensial yang lebih rendah.

3.3. Ikatan Kovalen

Pada senyawa-senyawa seperti H_2 , HCl , O_2 , dan sebagainya, tidak terjadi perpindahan elektron dari atom yang satu ke atom yang lain. Ada kalanya dua atom dapat menggunakan bersama lebih dari sepasang elektron, dan membentuk ikatan ganda (rangkap dua ataupun rangkap tiga).

3.4. Keelektronegatifan

Keelektronegatifan suatu unsur adalah kemampuan relative atomnya untuk menarik elektron ke dekatnya dalam suatu ikatan kimia.

3.5. Energi Ikatan

Salah satu cara untuk menyusun keelektronegatifan adalah dengan menggunakan energi ikatan. Energi ikatan adalah energi yang diperlukan untuk memutuskan satu mol ikatan atom-atom menjadi atom netral, atau sebaliknya, energi yang dilepaskan jika terbentuk satu mol ikatan.

Diketahui energi ikatan H_2 adalah 436 kJ per mol ikatan atau $7,16 \times 10^{-22}$ kJ per ikatan. Maka diperlukan 436 kJ untuk memutuskan satu mol ikatan H-H, dan dilepaskan energi sebesar 436 kJ jika terbentuk satu mol ikatan H-H. Oleh karena pada pembentukan ikatan, masing-masing atom hidrogen menyumbang satu elektron, maka dapat dianggap bahwa setiap atom menyumbang setengah dari energi ikatannya, yaitu $3,58 \times 10^{-22}$ kJ. Suatu molekul terdiri dari beberapa atom yang berhubungan satu dengan yang lain dalam bentuk ikatan. Ikatan-ikatan tersebut bervariasi kekuatannya dan semakin kuat ikatan tersebut semakin besar energi yang dibutuhkan untuk memutuskan ikatan tersebut.

Berikut ini terdapat beberapa contoh energi ikatan rata-rata dari berbagai unsur:

Tabel 1: Beberapa energi ikatan rata-rata

Ikatan	Energi (kJ/mol)
C – C	348
C = C	610
C \equiv C	840
N \equiv N	945
F – F	158
Br – Br	193
I – I	151
H – F	562
H – Cl	431
H – Br	366
H – I	299
K – K	50

Energi ikatan merupakan ukuran kekuatan suatu ikatan kimia. Semakin besar energi ikatan, maka semakin kuat ikatan tersebut, sehingga semakin sulit untuk dipisahkan.

3.6. Panjang Ikatan

Dalam molekul, atom-atom selalu bergetar, sehingga jarak antara dua atom tidak tetap. Untuk hal ini, ditetapkan jarak rata-rata antara inti dua atom terikat, dan selanjutnya disebut dengan panjang ikatan atau jarak ikatan.

Panjang ikatan dapat ditentukan dengan cara difraksi sinar-X atau spektroskopi molekul[5].

Tabel 2: Panjang Ikatan dan Energi Ikatan beberapa macam Ikatan

Ikatan	Panjang Ikatan (nm)	Energi (kJ/mol)
C – C	0,154	348
C = C	0,134	610
C \equiv C	0,120	840
N \equiv N	0,110	945
F – F	0,142	158
Br – Br	0,228	193
I – I	0,267	151
H – F	0,092	562
H – Cl	0,127	431
H – Br	0,141	366
H – I	0,161	299
Cl – Cl	0,199	242

4. HASIL DAN PEMBAHASAN

Dalam makalah ini, sebuah struktur molekul kimia akan direpresentasikan dengan sebuah graf. Dalam hal ini, ikatan kimia yang akan dimodelkan adalah ikatan kovalen, dan ikatan ion.

4.1. Ikatan Kovalen

Ikatan kovalen dapat direpresentasikan dengan graf berbobot.

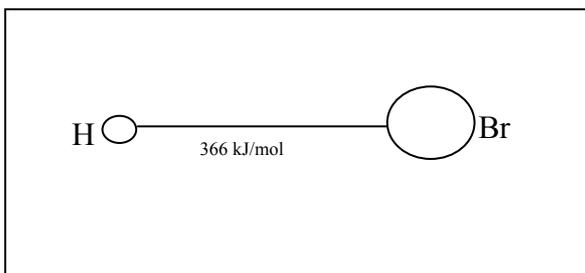
Simpul pada graf berbobot tersebut adalah atom-atom kimia yang saling berkaitan. Sedangkan sisi-sisinya menggambarkan ikatan kimia.

Bobot pada sisi graf dapat melambangkan energi ikatan molekul kimia, maupun panjang ikatan kimia.

Sebagai contoh molekul HBr. Simpul-simpul graf adalah unsur-unsur H dan Br. Sehingga graf yang akan dibentuk memiliki dua simpul. Sedangkan sisi-sisi pada graf adalah ikatan H – Br. Sehingga graf tersebut memiliki satu sisi.

Apabila bobot dari sisi-sisi tersebut diinginkan berupa energi ikatan, maka bobot dari sisi tersebut adalah: H – Br bernilai 366 kJ/mol

Pemodelan tersebut dapat dilihat pada gambar berikut ini:

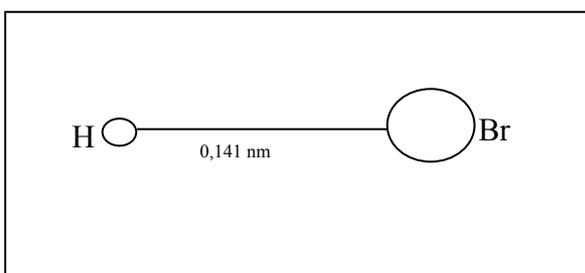


Gambar 8: Struktur molekul HBr dilambangkan dengan graf berbobot

Sedangkan apabila bobot dari sisi-sisi tersebut diinginkan berupa panjang ikatan, maka bobot dari sisi tersebut adalah:

H – Br bernilai 0,141 nm

Pemodelan tersebut dapat dilihat pada gambar berikut ini:



Gambar 9: Struktur molekul HBr dilambangkan dengan graf berbobot

Pemodelan struktur molekul kimia yang lebih kompleks dapat dilakukan menggunakan graf tak sederhana.

4.2. Ikatan Ion

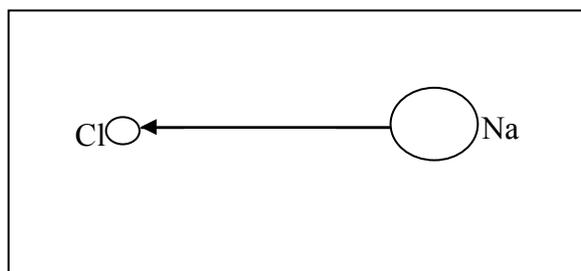
Ikatan ion pada molekul kimia dapat direpresentasikan dengan graf berarah.

Simpul pada graf berarah tersebut adalah atom-atom kimia yang saling berkaitan. Sedangkan sisi-sisinya menggambarkan ikatan kimia.

Lalu, arah pada graf menggambar arah perpindahan elektron, dengan pangkal sisi berarah menggambarkan atom yang memberi elektron (yang kemudian menjadi ion positif). Sedangkan ujung akhir dari sisi berarah adalah atom yang menerima elektron (yang kemudian menjadi ion negatif).

Kita ambil contoh molekul NaCl (garam). Pada pembentukan natrium klorida, Na melepaskan elektron valensinya dan berubah menjadi ion Na^+ . Elektron ini diterima oleh atom Cl yang berubah menjadi ion Cl^- . Sehingga pangkal dari sisi berarah adalah simpul Na, sedangkan simpul Cl sebagai akhir dari graf berarah. Pemodelan tersebut dapat dilihat

pada gambar berikut:



Gambar 10: Struktur molekul NaCl dilambangkan dengan graf berarah

5. KESIMPULAN

Kesimpulan yang dapat diambil dari penjelasan di atas adalah:

1. Graf berbobot dapat merepresentasikan struktur molekul ikatan kovalen. Pada graf ini, simpul merupakan atom, sedangkan sisinya merupakan ikatan kimia kovalen. Bobot pada sisi graf menyatakan energi ikatan rata-rata atau panjang ikatan rata-rata dari ikatan kimia.
2. Graf berarah dapat menggambarkan model struktur molekul ikatan ion. Pada graf berarah, atom-atom kimia dalam molekul tersebut dimodelkan sebagai simpul. Lalu, sisi berarah menyatakan ikatan kimia, dengan pangkal sisi berarah merupakan ion positif dari molekul, dan ujungnya merupakan ion negatif.

DAFTAR REFERENSI

- [1] Ir Rinaldi Munir, M.T., *Diktat Kuliah IF2091, Struktur Diskrit*, Program Studi Teknik Informatika ITB, 2008, hal. VIII-1 – VIII-44.
- [2] R. Gunawan Santosa, "Aplikasi Teorema Polya Pada Enumerasi Graf Sederhana", *INTEGRAL*, Vol. 8 No. 1, April 2003, Yogyakarta, Indonesia.
- [3] Teori Graf, ienx.files.wordpress.com
Tanggal akses: 3 Januari 2009
Waktu akses: 17.57
- [4] Raymond Chang, *Kimia Dasar, Konsep-konsep Inti, Edisi Ketiga, Jilid 2*, Penerbit Erlangga, 2004.
- [5] Drs. Hiskia Achmad, *Struktur Atom, Struktur Molekul, & Sistem Periodik*, PT. Citra Aditya Bakti, 2001.