

Aplikasi *Synthon Graph* Dalam Penggambaran Reaksi Koligasi Sederhana

Abda Shaffan Diva 13517021

Program Studi Teknik Informatika

Sekolah Teknik Elektro dan Informatika

Institut Teknologi Bandung, Jl. Ganesha 10 Bandung 40132, Indonesia

13517021@std.stei.itb.ac.id

Abstraksi—Penggunaan teori graf pada bidang sains sangatlah beragam, salah satunya pada bidang kimia. Masalah pada bidang kimia yang dapat digambarkan dengan graf adalah reaksi kimia. Banyak manfaat yang diperoleh dengan mengilustrasikan sebuah reaksi kimia menggunakan graf *synthon*. Pada makalah ini akan istilah-istilah yang berhubungan dengan graf *synthon*, jenis-jenisnya dan proses pembuatannya untuk menggambarkan reaksi koligasi sederhana. Selain itu pada artikel ini juga dijelaskan fungsi-fungsi dan kelebihan penggambaran reaksi kimia sederhana menggunakan graf dibandingkan dengan metode penulisan biasa.

Keywords— Teori graf, reaksi kimia, *Synthon*, reaktan perantara.

I. PENDAHULUAN

Menurut definisi dari *Merriam-Webster*[1], reaksi kimia adalah perubahan yang menyebabkan satu atau lebih substansi atau zat berubah menjadi zat yang baru.

Di dunia ini terdapat banyak jenis zat kimia berbeda, yang ketika direaksikan satu sama lain akan menghasilkan zat yang berbeda pula. Pada sebuah reaksi kimia, bahan yang akan direaksikan disebut sebagai reagen atau reaktan, sedangkan zat yang dihasilkan dari reaksi kimia disebut produk.

Proses-proses reaksi kimia ini dapat menghasilkan efek yang dapat menguntungkan maupun merugikan manusia, dan perbedaan untung rugi tersebut bisa jadi hanya diakibatkan perbedaan satu unsur saja dalam suatu reaksi kimia, hal ini tentu menjadikan dokumentasi dan penggambaran yang baik pada setiap reaksi kimia menjadi penting sekali, agar efek dari sebuah reaksi dapat benar-benar dipelajari dengan baik untuk kebaikan manusia, dan jika efeknya merugikan kerugiannya dapat dihindari atau diminimalisasi.

Aplikasi teori graf pada matematika diskrit dapat digunakan untuk membuat metode penggambaran reaksi kimia

dengan menggunakan graf, dan salah satu jenis graf yang memiliki kelebihan dapat menggambarkan proses-proses dalam sebuah reaksi kimia dan dapat memperlihatkan proses-proses dan zat perantara yang muncul dan hilang pada reaksi kimia serta kemungkinan jalur reaksi lainnya adalah graf *synthon*.

II. TEORI DASAR

1. Teori Graf

Berdasarkan referensi[2], teori graf merupakan bagian dari ilmu matematika yang mempelajari bagaimana sebuah masalah bisa diabstraksi dengan memodelkan hubungan antar objek diskrit, dan untuk menyederhanakan penggambaran masalah, biasanya objek diskrit pada graf akan digambarkan sebagai sebuah lingkaran, noktah, atau titik yang disebut *simpul*, sedangkan hubungan antar objeknya akan digambarkan sebagai sebuah garis yang disebut *sisi*, model gambar dari abstraksi masalah inilah yang disebut dengan *graf*, sedangkan definisi formal dari graf adalah sebagai berikut :

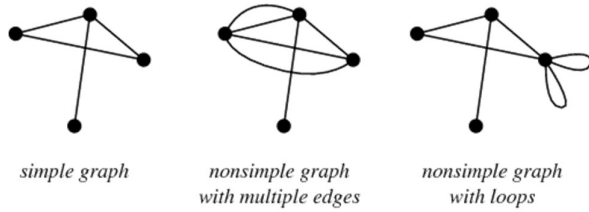
“Sebuah Graf didefinisikan sebagai pasangan himpunan (V,E) , dimana V merupakan himpunan simpul yang tidak kosong, sedangkan E merupakan himpunan sisi yang menghubungkan sebuah pasangan simpul ”

Setiap simpul dan sisi pada graf akan dinamai dengan nama yang setipe, contohnya himpunan simpul V berisi simpul v_1, v_2, v_3, v_4, v_5 , dan himpunan sisi E berisi simpul e_1, e_2, e_3 . Jika sisi e menghubungkan v_1 dan v_2 , maka e dapat juga dinyatakan sebagai $e = (v_1, v_2)$. Sebuah sisi juga dapat menghubungkan simpul yang sama (sisi gelang).

A. Jenis-Jenis Graf

Berdasarkan ada tidaknya sisi gelang dan/atau sisi ganda, graf dapat dibedakan menjadi :

1. **Graf sederhana** (*simple graph*), yaitu graf yang tidak mempunyai sisi ganda (lebih dari 1 sisi yang menghubungkan 2 simpul yang sama) ataupun sisi gelang.
2. **Graf tidak sederhana** (*nonsimple graph*), yaitu graf yang mengandung sisi ganda (*graf ganda*) dan/atau sisi gelang (*graf semu*).

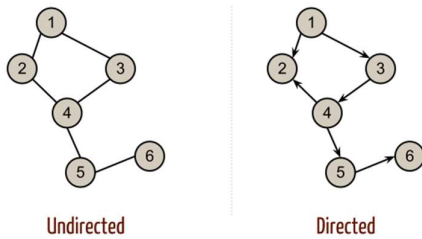


Gambar 1. Contoh graf sederhana dan graf tidak sederhana, diambil dari <http://mathworld.wolfram.com/SimpleGraph.html>, diakses 8 Desember 2018.

Berdasarkan jenis sisinya, graf dibedakan menjadi :

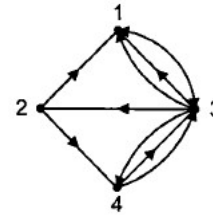
1. **Graf tak-berarah** (*undirected graph*), yaitu graf yang sisinya tidak mempunyai orientasi arah, sehingga untuk suatu sisi (u,v) sama dengan sisi (v,u) .
2. **Graf berarah** (*directed graph* atau disingkat *digraph*), yang graf yang memiliki sisi berarah.

Directed Graph



Gambar 2. Contoh graf berarah dan tidak berarah, diambil dari <https://dzone.com/articles/algorithm-week-graphs-and>, diakses 8 Desember 2018.

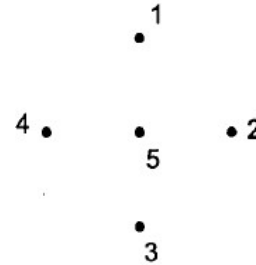
Sebuah graf dapat dikategorikan lebih dari satu jenis, seperti contohnya bisa saja sebuah graf merupakan graf berarah dan juga merupakan graf tidak sederhana, seperti contoh berikut :



Gambar 3. Contoh graf ganda berarah, diambil dari [2].

B. Istilah-istilah Pada Graf

1. **Bertetangga**, jika pada sebuah graf terdapat sisi e , dengan $e = (u,v)$, maka simpul u dan v bertetangga. Pada gambar 3 diatas, simpul 2 dan 4 bertetangga, sedangkan simpul 1 dan 4 tidak bertetangga.
2. **Bersisian**, untuk $e = (u,v)$, maka sisi e dikatakan bersisian dengan simpul u dan simpul v .
3. **Simpul terpecil**, sebuah simpul dikatakan terpecil jika tidak bertetanggan dengan simpul manapun dalam sebuah graf.
4. **Graf Kosong** (*empty graph*), sebuah graf dikatakan kosong bila himpunan sisinya merupakan sebuah himpunan kosong.

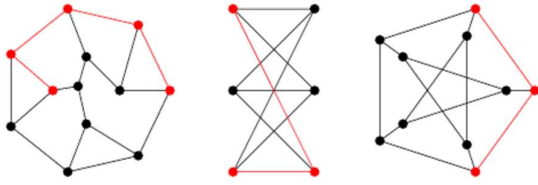


Gambar 4. Contoh graf kosong, diambil dari [2].

5. **Derajat** (*degree*), untuk graf tak-berarah, jumlah derajat sebuah simpul dalam graf adalah jumlah sisi yang bersisian dengan graf tersebut, sedangkan untuk graf berarah, terdapat 2 jenis derajat, yaitu derajat masuk atau $d_{in}(v)$, yang menyatakan jumlah sisi yang bersisian dan busurnya mengarah ke simpul v , dan $d_{out}(v)$, yang menyatakan jumlah sisi yang bersisian dan busurnya mengarah keluar dari simpul v . Jumlah total derajat pada graf berarah adalah d , yang memenuhi persamaan berikut

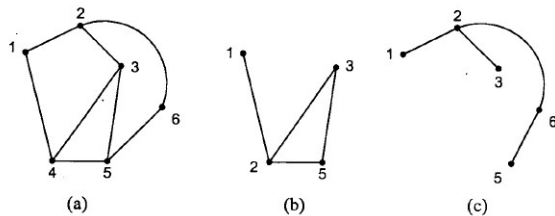
$$d(v) = d_{in}(v) + d_{out}(v)$$

6. **Lintasan** (*path*), adalah suatu jalur dari simpul v_0 ke simpul tujuan v_n , yang melewati sisi-sisi dengan jalur $e_1, v_1, e_2, v_2, \dots, v_{n-1}, e_{n-1}, v_n$ dengan $e_1 = (v_0, v_1), e_2 = (v_1, v_2), \dots, e_{n-1} = (v_{n-2}, v_{n-1}), e_n = (v_{n-1}, v_n)$, dengan panjang lintasan merupakan jumlah sisi yang dilewati pada lintasan tersebut.



Gambar 5. Contoh lintasan pada graf yang diwarnai merah, diambil dari <http://mathworld.wolfram.com/GraphGeodesic.html>, diakses 8 Desember 2018.

- Siklus (cycle)**, adalah lintasan yang bermula dan berakhir di simpul yang sama.
- Upagraf**, sebuah graf $G_1 = (v_1, e_1)$ merupakan upagraf dari graf $G = (v, e)$ jika v_1 merupakan himpunan bagian atau merupakan himpunan v dan e_1 juga merupakan himpunan bagian atau merupakan himpunan e .



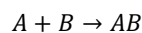
Gambar 6. Kedua graf yang disajikan pada (b) dan (c) merupakan upagraf dari graf (a), gambar diambil dari [2].

2. Jenis-jenis reaksi kimia

Berdasarkan jenis pengikatan antar zat pada saat bereaksi, reaksi kimia dapat dibagi sebagai berikut :

- Koligasi (colligation)**[3], reaksi kimia yang menggabungkan dua radikal bebas dan membentuk sebuah ikatan kovalen.

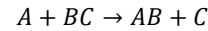
Reaksi koligasi dapat disamaratakan dengan persamaan :



Dengan A dan B merupakan dua buah zat yang membentuk sebuah ikatan kovalen dan membentuk zat baru AB .

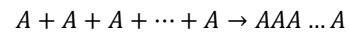
- Sikloadisi (cycloaddition)**[4], reaksi kimia saat dua atau lebih senyawa tak jenuh membentuk adisi siklik atau di mana senyawa siklik dibentuk dengan penambahan antara bagian tak jenuh dari molekul yang sama.

- Penyisipan (insertion)**, reaksi kimia antara sebuah unsur dan sebuah senyawa yang menyebabkan elemen pada senyawa tersebut menjadi berikatan dengan unsur bebas yang sebelumnya tidak berikatan, dan melepaskan ikatan dari unsur yang sebelumnya berikatan, contoh pensamarataannya adalah sebagai berikut :

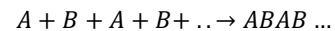


- Polimerisasi (polimerization)**[5], reaksi kimia yang membentuk senyawa dari banyak satu atau lebih unsur yang sama, contohnya sebagai berikut :

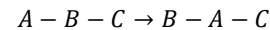
Polimer :



Ko-polimer :



- Isomerisasi (isomerization)**, reaksi kimia yang merubah suatu senyawa menjadi senyawa lain dengan merubah susunan ikatan antar unsurnya, dan unsur penyusunnya tidak berubah, contoh :



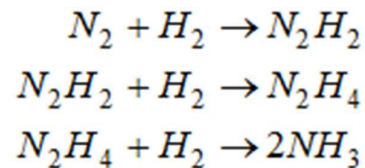
III. MODEL SYNTON GRAPH

1) Terminologi

Model *Synthon Graph* sebagai representasi digunakan oleh Balaban[9] sebagai salah satu cara untuk menggambarkan reaksi kimia dan perubahannya dari suatu reaktan ke produk. Misalkan terdapat reaksi kimia sebagai berikut[6] :



Skema reaksi pembentukan amonia dari hidrogen dan nitrogen tersebut tidak memperlihatkan bagaimana proses terbentuknya amonia di alam, yang sebenarnya terdiri dari beberapa reaksi perantara (*intermediate reaction*)[8], pada pembentukan amonia diatas reaksi perantaranya adalah sebagai berikut[7] :



Pada reaksi pembentukan ammonia diatas, terdapat 2 reaktan perantara yaitu N_2H_2 dan N_2H_4 , yang tidak terdapat pada awal reaksi maupun setelah reaksi selesai karena keseluruhan zat yang terbentuk dari reaksi perantara akan digunakan kembali pada reaksi perantara berikutnya seperti yang diilustrasikan diatas.

Pada *Synthon Graph*, penggambaran alur reaksi kimia dilakukan sebagai berikut :

- Simpul pada graf menggambarkan *synthon* dan senyawa yang terbentuk dari lebih dari 1 *synthon*. *Synthon* sendiri merupakan unsur atau senyawa kimia yang dapat terlibat dalam reaksi pembentukan.
- Pada graf *synthon*, semua permutasi pada senyawa dianggap sama.
Contoh : ABCD = ACDB = BCAD, dan seterusnya.
- Sisi pada graf menggambarkan reaksi pembentukan suatu senyawa dari suatu *synthon*, yang disusun dari *synthon* lain yang bertentangan pada graf yang sama.



Pada contoh graf *synthon* diatas, hubungan ketetanggaan antara simpul A, B, dan AB menyatakan bahwa senyawa AB dibentuk oleh unsur A dan unsur B, **bukan** menggambarkan molekul senyawa A_2B_2 .

Konsep *synthon* juga digunakan pada aplikasi teori graf pada bidang kimia yang lain[9], seperti contohnya penggambaran struktur molekul, atau penggambaran *reaction graph*, namun kedua konsep tersebut tidak akan dibahas disini, selain itu pada makalah ini hanya akan dibahas reaksi koligasi yang akan menghasilkan senyawa linier asiklik saja, yaitu senyawa yang bentuk molekulnya tidak membentuk sebuah lingkaran dan hubungan antar *synthon* pada molekul hanya membentuk garis lurus saja.

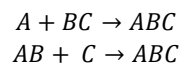
Graf *synthon* sendiri bentuknya dapat berupa graf berarah maupun graf tidak berarah, dan penentuan jenis graf apa yang akan digunakan tergantung dari tujuan pembuatan graf itu sendiri[10].

2) Penggambaran Alur Reaksi Kimia Pada Reaksi Pembentukan

Proses reaksi kimia berbeda yang melibatkan beberapa jenis dan jumlah unsur yang sama jadi menghasilkan suatu senyawa yang sama, jika kemungkinan perbedaannya adalah sebagai berikut :

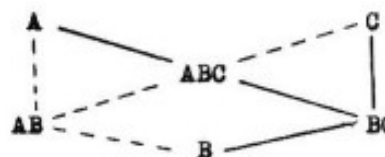
- a) Perbedaan Urutan Reaksi
- b) Perbedaan susunan senyawa penyusun

Berikut merupakan ilustrasi perbedaan reaksi kimia yang dimaksud :



Kedua reaksi diatas merupakan reaksi kimia yang berbeda karena melibatkan reaktan yang berbeda, namun pada akhirnya menghasilkan senyawa yang sama, yaitu senyawa ABC.

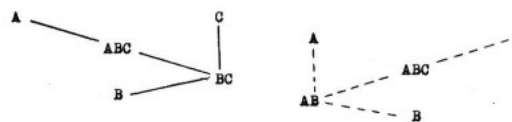
Berikut merupakan contoh graf dari pembentukan senyawa ABC :



Gambar 7. Contoh *synthon graph* dari pembentukan senyawa ABC [10].

Pada contoh graf diatas, dapat dilihat bahwa graf memiliki 2 jenis sisi yang berbeda, yaitu sisi yang *solid*, dan sisi dengan garis putus-putus. Kedua sisi tersebut merepresentasikan hal yang sama, yaitu pembentukan senyawa dari simpul yang bertetangga, yang membedakannya adalah reaksi itu sendiri. Identifikasi reaksi menggunakan sisi yang berbeda dan bukan menggunakan simpul yang berbeda karena ada kemungkinan 2 atau lebih reaksi yang berbeda menggunakan unsur atau senyawa yang sama dalam prosesnya.

Jika kita perhatikan baik-baik, dapat dilihat bahwa reaksi-reaksi pembentuk senyawa ABC merupakan upagraf dari *synthon graph* tersebut.



Gambar 8. 2 upagraf dari *synthon graph* pada gambar 8, diambil dari [10] dengan perubahan.

Dari kedua upagraf diatas, dapat disimpulkan pada graf terdapat 2 jenis reaksi pembentukan dengan senyawa perantara AB dan BC yang menghasilkan senyawa ABC.

synthon ,maka **A** bernilai 3.

3) Simbol pada Graf *Synthon*

Pada umumnya setiap graf *synthon* yang merepresentasikan pembentukan atau penguraian suatu senyawa memiliki simbol yang terdiri dari 3 bagian dengan pola **AxB**, dengan keterangan sebagai berikut :

a) **A** merupakan jumlah *synthon* yang ada pada senyawa produk , setiap *synthon* dihitung 1 terlepas dari jenisnya. Senyawa ABC dan senyawa AAA sama-sama memiliki 3

b) **x** merupakan huruf kecil yang menandakan tipe sikloadisi pada senyawa tersebut (akan dijelaskan lebih lanjut).

c) **B** merupakan angka yang menunjukkan jumlah senyawa atau unsur pada reaksi terakhir yang menghasilkan senyawa produk, tetapi hanya menghitung senyawa dengan kombinasi *synthon* yang berbeda saja (akan dijelaskan lebih lanjut).

Pseudoconstitutional graph			T a r g e t m o l e c u l e	
No. of vertices	Repre-sentation	Code	To-tal no.	R e p r e s e n t a t i o n
2		(2a)	2	AA (2a1) ; AB (2a2)
3		(3a)	4	AAA (3a1) ; ABA (3a2) ; AAB (3a3) ; ABC (3a4)
		(3b)	3	$\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ A-A \end{matrix}$ (3b1) ; $\begin{matrix} B \\ \diagdown \diagup \\ A-A \end{matrix}$ (3b2) ; $\begin{matrix} C \\ \diagdown \diagup \\ A-B \end{matrix}$ (3b3)
4		(4a)	11	AAAA (4a1) ; AAAB (4a2) ; AABA (4a3) ; AABB (4a4) ; ABAB (4a5) ; ABBA (4a6) ; ABBC (4a7) ; ABCA (4a8) ; ABAC (4a9) ; AABC (4a10) ; ABCD (4a11)
		(4b)	7	$\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ A-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ A-B \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ B-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ B-B \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ A-C \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ B-C \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ B-D \end{matrix}$ (4b1) (4b2) (4b3) (4b4) (4b5) (4b6) (4b7)
		(4c)	11	$\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ A-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ A-B \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ B-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ A-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ B-B \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ A-B \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ B-C \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ A-C \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ B-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} B \\ \diagdown \diagup \\ A-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ C-D \end{matrix}$ (4c1) (4c2) (4c3) (4c4) (4c5) (4c6) (4c7) (4c8) (4c9) (4c10) (4c11)
		(4d)	7	$\begin{matrix} A-A \\ \\ A-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A-A \\ \\ B-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A-A \\ \\ B-B \end{matrix}$; $\begin{matrix} A-B \\ \\ B-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A-A \\ \\ C-B \end{matrix}$; $\begin{matrix} A-B \\ \\ C-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A-B \\ \\ C-D \end{matrix}$ (4d1) (4d2) (4d3) (4d4) (4d5) (4d6) (4d7)
		(4e)	9	$\begin{matrix} A-A \\ \\ A-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A-A \\ \\ B-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A-A \\ \\ B-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A-A \\ \\ B-B \end{matrix}$; $\begin{matrix} A-B \\ \\ B-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A-A \\ \\ B-C \end{matrix}$; $\begin{matrix} A-B \\ \\ C-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A-B \\ \\ C-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A-B \\ \\ C-D \end{matrix}$ (4e1) (4e2) (4e3) (4e4) (4e5) (4e6) (4e7) (4e8) (4e9)
		(4f)	5	$\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ A-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ A-B \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ B-A \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ B-C \end{matrix}$; $\begin{matrix} A \\ \diagdown \diagup \\ B-D \end{matrix}$ (4f1) (4f2) (4f3) (4f4) (4f5)

Gambar 9. Beberapa contoh kode dari skema reaksi pembentukan yang direpresentasikan oleh graf *synthon*, diambil dari [10].

4) Beberapa Contoh Graf *Synthon*

Pada bagian ini akan beberapa contoh senyawa yang reaksi pembentukannya dapat digambarkan menggunakan graf *synthon*, dengan **F** merupakan simbol dari molekul target (molekul yang ingin proses pembentukannya digambarkan pada graf) :

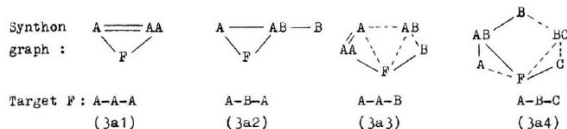
a) Molekul dengan 2 buah *synthon*



Gambar 10. 2 jenis molekul **F** dengan *synthon* **A-A** (2a1) dan **A-B** (2a2), keduanya dapat digambarkan dengan model graf ganda, diambil dari [10].

b) Molekul dengan 3 buah *synthon*

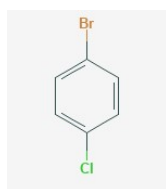
Terdapat 2 jenis kode pada graf 3 *synthon*, yaitu *a* dan *b*, perbedaan kedua jenis tersebut terletak pada reaksi yang diperlukan untuk menghasilkan molekul target.



Gambar 11. Contoh molekul 3 *synthon* dengan indeks huruf *a* [10].

Pada contoh-contoh skema reaksi pembentukan diatas, terlihat bahwa reaksi terakhir yang akan membentuk target tidak melibatkan reaksi sikloadisi, melainkan hanya melibatkan reaksi koligasi. Pada gambar ketiga, skema reaksi pembentukan *A-A-B* dengan kode 3a3 disebabkan meskipun terdapat 4 simpul yang bertetangga dengan simpul *F*, namun dua dari simpul tersebut yaitu *A* dan *AA*, sebenarnya terdiri dari *synthon* yang sama yaitu *synthon* unsur *A*. Oleh karena itu keduanya dihitung sebagai sebuah kesatuan.

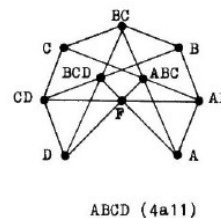
Salah satu contoh reaksi kimia yang dapat digambarkan menggunakan skema graf *synthon* dengan kode 3a4 adalah reaksi pembentukan *P-klorobromobenzena* (*Para-klorobromobenzena*, C_6H_4BrCl) [10], jika pada graf tersebut dimisalkan *A* adalah senyawa *bromin*, *B* adalah senyawa *benzema* dan *C* adalah senyawa *klorin*, maka pada reaksi pembentukan *P-klorobromobenzena* dapat terbentuk salah satu dari 2 senyawa perantara yang mungkin yaitu *AB* (*bromobenzema*), atau *BC* (*klorobenzema*).



Gambar 12. Struktur 2 dimensi dari senyawa *Para-klorobromobenzema*, diambil dari <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/4-bromochlorobenzene#section=Top>, diakses 9 Desember 2018.

Pada beberapa kasus, untuk menghasilkan molekul target, harus melalui proses sikloadisi. Graf 3 *synthon* dengan indeks *b* melibatkan proses sikloadisi dan menghasilkan graf *synthon* yang lebih rumit dari sebelumnya dan tidak akan dijabarkan pada makalah ini.

Seperti yang dapat dilihat di tabel pada gambar 10, Graf *synthon* dapat menggambarkan reaksi kimia dengan lebih banyak unsur, dan akan menghasilkan graf yang lebih rumit dan tidak dapat dibahas seluruhnya pada makalah ini.

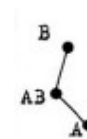


Gambar 13. Graf molekul dengan 4 buah *synthon* [10].

5) Pembuatan graf *Synthon* Untuk Senyawa Linier Asiklik

Suatu graf *synthon* untuk senyawa linier asiklik dapat dibentuk dari graf *synthon* senyawa penyusunnya. Misalkan terdapat suatu senyawa linier asiklik *ABCD*, maka kita dapat membentuknya secara bertahap dari senyawa *AB*, lalu *ABC*, dan terus sampai membentuk graf *synthon* dari molekul *ABCD*, dibawah ini akan digambarkan bagaimana proses pembuatan graf dari molekul *ABCD* yang ada pada gambar 14 [10]:

a) Pembentukan senyawa *AB* dari *synthon* *A* dan *B*

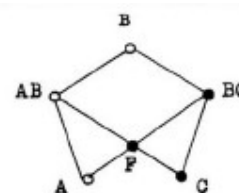


Gambar 14. Graf *synthon* molekul *AB*.

Molekul target :	Jumlah simpul	Synthon	Derajat
<i>AB</i>	2	1	1
Synthon			
Molekul target	1	2	2

Total simpul : 3

b) Pembentukan senyawa *ABC* dengan penambahan simpul dan sisi pada graf *synthon* *AB*.

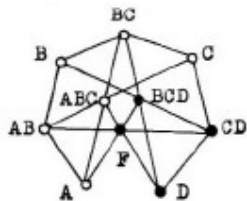


Gambar 15. Graf *synthon* molekul *ABC*.

Molekul target : ABC	Jumlah simpul	Synthon	Derajat
Synthon	3	1	2
Perantara 2	2	2	3
Molekul target	1	3	4

Total simpul : 6

- c) Pembentukan senyawa *ABCD* dengan penambahan simpul dan sisi pada graf *synthon ABC*.



Gambar 16. Graf *synthon* molekul *ABCD*

Molekul target : ABCD	Jumlah simpul	Synthon	Derajat
Synthon	4	1	3
Perantara 2	3	2	4
Perantara 3	2	3	5
Molekul target	1	4	6

Total simpul : 10

Penjelasan tabel pembentukan molekul *ABCD* :

Yang dimaksud dengan perantara *n* adalah senyawa perantara yang tidak ada pada produk hasil reaksi dan terdiri dari *n* *synthon*.

Contoh : Pada graf *synthon* molekul *ABCD* molekul perantara *BCD* merupakan perantara 3, yang mempunyai 3 *synthon* yaitu *A*, *B*, dan *C*, serta berderajat 5. Graf *synthon ABCD* memiliki 2 simpul molekul perantara 3 yaitu *ABC* dan *BCD*, dan 3 molekul perantara 2 yaitu *AB*, *BC*, dan *CD*.

Simpul pada graf diberi warna hitam untuk menandakan bahwa simpul tersebut ditambahkan kemudian, sedangkan simpul berwarna putih merupakan simpul yang semula ada pada graf *synthon* sebelumnya.

Dari jumlah simpulnya juga terlihat bahwa pada senyawa linier asiklik, jumlah simpulnya memenuhi persamaan

$$\text{Simpul} = \frac{n(n+1)}{2}$$

, dengan *n* merupakan jumlah *synthon* yang menyusun molekul targetnya.

IV. KESIMPULAN

Graf *Synthon* merupakan salah satu bukti dari luasnya aplikasi dari teori graf yang merupakan bagian dari ilmu matematika diskrit, dan merupakan salah satu dari banyak cara[9] merepresentasikan baik struktur maupun reaksi kimia menggunakan graf, pada makalah ini terbukti dapat menggambarkan semua proses reaksi yang mungkin dan alur prosesnya serta senyawa yang terlibat didalamnya. Sayangnya keterbatasan ilmu dan waktu membuat penulis makalah tidak dapat menjelaskan lebih lanjut aplikasinya pada jenis-jenis reaksi kimia lain yang lebih rumit, dan mungkin dapat dibuat di lain kesempatan.

VII. UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis makalah mengucapkan terima kasih kepada Tuhan Yang Maha Esa, semua bapak dan ibu dosen pengampu mata kuliah IF2120 Matematika Diskrit, dan pihak-pihak yang baik secara langsung maupun tidak langsung turut membantu selesainya pembuatan makalah ini.

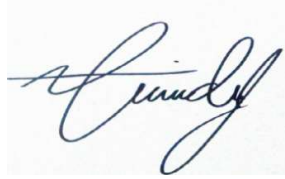
REFERENSI

- https://www.merriam-webster.com/dictionary/chemical%20reaction?utm_campaign=sd&utm_medium=serp&utm_source=jsonld, diakses 8 Desember 2018.
- R., Munir. (2010). *Matematika Diskrit* (3rd ed.). Bandung: INFORMATIKA Bandung.
- <http://www.oxfordreference.com/view/10.1093/oi/authority.20110803095624422>, diakses 8 Desember 2018.
- <http://www.oxfordreference.com/view/10.1093/oi/authority.20110803095655888>, diakses 8 Desember 2018.
- <http://goldbook.iupac.org/html/P/P04740.html>, diakses 8 Desember 2018
- <https://www.chem.tamu.edu/rgroup/marceita/chem362/HW/2017%20Student%20Posters/Nitrogenase:%20Nitrogen%20Fixation%20vs%20Haber-Bosch%20Process.pdf>, diakses 9 Desember 2018.
- <http://spaceflight.esa.int/impress/text/education/Catalysis/Commercial.html>, diakses 9 Desember 2018.
- <http://goldbook.iupac.org/html/I/I03096.html>, diakses 9 Desember 2018.
- Balaban, Alexandru T. "Applications of Graph Theory in Chemistry." *Journal of Chemical Information and Modeling* 25, no. 3 (1985): 334-43. doi:10.1021/ci00047a033.
- Balaban, A. T. (1980). Chemical graphs. XXXVIII. *Synthon graphs. MATCH, Communications in Mathematical and Computational Chemistry*, 8, 159-92.

PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa makalah yang saya tulis ini adalah tulisan saya sendiri, bukan saduran, atau terjemahan dari makalah orang lain, dan bukan plagiasi.

Bandung, 9 Desember 2018

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Abda Shaffan Diva', written in a cursive style.

Abda Shaffan Diva

13517021