PENENTUAN *SATURATION NUMBER* DARI GRAF BENZENOID

DARA RIFKA MAHZURA

*Program Studi Matematika,
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Andalas,
Kampus UNAND Limau Manis Padang, Indonesia,
email : dmahzura@gmail.com*

Abstrak. Dalam makalah ini dibahas aplikasi graf dalam bidang ilmu kimia khususnya senyawa karbon benzenoid. **Benzenoid** adalah suatu senyawa yang tersusun atas atom karbon dan atom hidrogen. Benzenoid adalah termasuk dalam senyawa hidrokarbon, namun dikarenakan bentuknya yang unik maka benzenoid dikelompokkan sebagai suatu senyawa tersendiri. Graf Benzenoid ini berbentuk segienam beraturan. Titik-titik pada graf Benzenoid melambangkan atom karbon dan sisi-sisi pada graf Benzenoid melambangkan ikatan antar atom pada senyawa benzenoid. *Saturation number* pada graf G adalah kardinalitas *matching* maksimal terkecil pada G . Pada makalah ini akan ditentukan *saturation number* pada beberapa graf Benzenoid.

Kata Kunci: Benzenoid, matching, matching maksimum, matching maksimal, perfect matching, saturation number, rantai Benzenoid

1. Pendahuluan

Teori *matching* adalah cabang dari teori graf yang berkaitan dengan kajian *matching* dalam aspek struktural dan aspek pencacahan. *Matching* adalah himpunan sisi pada suatu graf yang tidak saling berbagi titik. Perkembangan teori *matching* ini telah berpengaruh kuat dan menstimulir aplikasi kimia pada kajian model *topological* dari molekul-molekul yang mewakili senyawa konjuget. Adapun model *topological* yang dikaji adalah graf Benzenoid. Dalam skripsi ini akan dibahas struktur *matching* pada graf Benzenoid. Salah satunya adalah *saturation number* yang memberikan suatu informasi yaitu kemungkinan paling buruk kasus "penyumbatan" pada proses adsorpsi yang tidak efisien dalam senyawa benzenoid [5].

Suatu *matching* M pada graf G adalah himpunan sisi dari graf G sedemikian sehingga tidak ada dua sisi dari M yang saling berbagi titik. Kardinalitas M disebut sebagai banyaknya sisi dari *matching*. Suatu titik v disebut *M-saturated* jika ada sisi M terkait (*incidence*) dengan v . Sebaliknya titik u disebut *M-unsaturated* jika setiap sisi M tidak terkait dengan u . M adalah *perfect matching* jika setiap titik di G adalah *M-saturated*.

Matching dengan kardinalitas kecil tidak menarik untuk dibahas, karena masing-masing sisi adalah *matching* dengan kardinalitas satu, dan himpunan kosong adalah *matching* dengan kardinalitas 0. Oleh sebab itu, akan diselidiki kardinalitas *matching* sebesar mungkin.

Suatu *matching* M dikatakan *matching* maksimum jika tidak ada *matching* pada graf G dengan kardinalitas yang lebih besar. Kardinalitas dari sebarang *matching* maksimum pada graf G dilambangkan $\nu(G)$ dan disebut dengan banyaknya *matching* dari graf G . Karenanya, masing-masing titik dapat terkait dengan paling banyak satu sisi dari suatu *matching*. Ini berarti tidak ada graf dengan n titik mempunyai kardinalitas *matching* lebih dari $\lfloor n/2 \rfloor$. Jika setiap titik dari G terkait dengan sisi dari M , *matching* M tersebut disebut *perfect*. *Perfect matching* disebut juga dengan *matching* maksimum, namun sebaliknya tidak berlaku. Kajian dari *perfect matching* terdapat pada struktur Kekule pada senyawa benzenoid yang mempunyai sejarah panjang dalam literatur matematika dan kimia [5].

Suatu *matching* M adalah *matching* maksimal jika tidak dapat diperluas menjadi *matching* yang lebih besar pada G . Jelas bahwa masing-masing *matching* maksimum juga maksimal, tetapi untuk sebaliknya secara umum tidak benar.

Kardinalitas *matching* maksimal terkecil pada G disebut sebagai *saturation number* pada graf G . *Saturation number* pada graf G dilambangkan dengan $s(G)$. *Saturation number* pada suatu graf G adalah paling sedikit setengah dari kardinalitas *matching* maksimum dari G ($\nu(G)/2$), $s(G) \geq \nu(G)/2$ [5].

Adapun tujuan dalam makalah ini adalah menentukan *saturation number* dari rantai Benzenoid dan mengkaji perilaku *saturation number* pada rantai Benzenoid dalam bidang ilmu kimia.

2. *Saturation Number* pada Graf Benzenoid

2.1. Rantai Benzenoid

Suatu sistem benzenoid adalah gabungan objek geometris yang diperoleh dari susunan heksagon reguler kongruen pada suatu bidang sehingga dua heksagon adalah terpisah atau mempunyai sisi bersama [9]. Suatu sistem benzenoid merupakan subhimpunan dengan 1-*connected interior* dari suatu ubin biasa pada bidang dengan bentuk segienam beraturan. Pada masing-masing sistem benzenoid, dapat membentuk suatu graf, dengan mengambil titik dari segienam sebagai titik, dan sisi dari segienam sebagai sisi graf. Dari definisi sederhana ini, bidang dan graf bipartid disebut sebagai graf Benzenoid [5].

Setiap permukaan dari suatu graf Benzenoid kecuali permukaan tak terhingga adalah heksagon. Titik yang terletak pada perbatasan permukaan non-heksagonal dari graf Benzenoid disebut *titik eksternal*, sedangkan untuk titik lain, jika ada, disebut sebagai *titik internal*. Suatu graf Benzenoid tanpa mempunyai titik internal disebut sebagai *Catacondensed Benzenoid*. Sedangkan jika suatu graf Benzenoid mempunyai titik internal disebut *Pericondensed Benzenoid*. Jika tidak ada heksagon pada *Catacondensed Benzenoid* yang berbatasan dengan tiga heksagon lainnya, ini disebut sebagai suatu *rantai* (*chain*). Pada masing-masing rantai Benzenoid, terdapat tepat dua heksagon yang berbatasan dengan heksagon satu sama lainnya, kedua heksagon itu disebut sebagai *terminal*, sedangkan heksagon lain disebut sebagai *interior*. Jumlah heksagon dari suatu rantai Benzenoid disebut *panjang* [5].

Suatu heksagon interior disebut *straight* jika dua sisinya saling berbagi dengan heksagon lain secara paralel, dan sebaliknya. Jika suatu heksagon yang sisi-sisi

berbaginya tidak paralel, maka heksagon tersebut dikatakan *kinky*. Jika seluruh $h-2$ heksagon interior dari suatu rantai Benzenoid dengan h heksagon maka dikatakan dengan *straight*, maka rantai ini dikatakan dengan *polyacene*, ditulis A_h . Jika setiap heksagon adalah *kinky*, maka rantai tersebut dikatakan *polyphenancene*, ditulis Z_h . Oleh karena itu, jumlah *perfect matching* pada Z_h sama dengan bilangan Fibonacci ke $h+2$, yaitu $F_{(h+2)}$, *polyphenancene* juga disebut sebagai *fibonacenes* [5].

Perhatikan beberapa contoh graf Benzenoid pada Gambar 1. Keempat gambar tersebut merupakan suatu sistem benzenoid karena masing-masingnya adalah gabungan objek geometris yang diperoleh dari susunan heksagon reguler kongruen pada suatu bidang yang mempunyai sisi bersama. Gambar 1 pada bagian (A) mempunyai titik yang terletak pada perbatasan permukaan non-heksagonal yaitu titik eksternal dan titik yang terletak pada perbatasan permukaan heksagonal yaitu titik internal, sehingga disebut sebagai *Pericondensed Benzenoid*.

Gambar 1 pada bagian (B), (C) dan (D) hanya mempunyai titik eksternal, sehingga disebut sebagai *Catacondensed Benzenoid*. Selanjutnya Gambar 1 pada bagian (C) dan (D) disebut rantai karena tidak ada heksagon yang berbatasan dengan tiga heksagon lainnya. Heksagon *straight* terdapat pada Gambar 1 bagian (C) karena ada heksagon interior yang memiliki sisi berbagi saling paralel. Sedangkan heksagon *kinky* terdapat pada gambar (D) yang sisi-sisi berbagi graf Benzenoid tidak paralel. Jelas bahwa rantai *polyacene* ditunjukkan pada Gambar 1 bagian (C), disimbolkan sebagai A_5 yaitu rantai *polyacene* dengan 5 heksagon. Sebaliknya rantai *polyphenancene* ditunjukkan pada Gambar 1 bagian (D), disimbolkan sebagai Z_6 yaitu rantai *polyphenancene* dengan 6 heksagon.

Gambar 1. Beberapa contoh graf Benzenoid

2.2. Penentuan Saturation Number pada Graf Benzenoid

Proposisi-proposisi berikut memberikan informasi *saturation number* pada rantai Benzenoid.

Proposisi 2.1. [5] Misalkan B_h adalah suatu rantai Benzenoid dengan h heksagon, maka $s(B_h) \geq h + 1$.

Bukti. Jelas bahwa rantai dari B_h mempunyai titik sebanyak $4h + 2$. Karena B_h mempunyai *perfect matching*, jumlah *matching* ini adalah $2h + 1$. Oleh karena itu $s(G) \geq (2h + 1)/2$ dan karena $s(G)$ bilangan bulat, maka $s(G) \geq h + 1$. $\square$

Proposisi 2.2. [5] $s(B_h) + 1 \leq s(B_{h+1}) \leq s(B_h) + 2$.

Bukti. Misalkan $s(B_{h+1}) \leq s(B_h)$ dan M adalah *matching* maksimal pada B_{h+1} dengan kardinalitas $s(B_{h+1})$. Misal diberikan label heksagon B_{h+1} adalah $H_1, H_2, \dots, H_{h+1}$, maka H_{h+1} memuat paling sedikit satu sisi di M sedemikian sehingga tidak ada titik-titik ujungnya yang saling terkait dengan sisi di H_h . Misal sisi $e = uv$. $M - e$ *matching* maksimal pada $B_{h+1} \setminus \{e\} = B_{h+1} \setminus \{uv\}$. Jika setiap sisi $M - e$ juga sisi di B_h , maka diperoleh *matching* maksimal di B_h dengan kardinalitas kurang dari $s(B_h)$ adalah kontradiksi. Oleh karena itu, harus ada suatu sisi e' di $M - e$ dengan satu titik ujung (sebut u') pada B_h dan titik lain (sebut v') pada $B_{h+1} \setminus B_h$. Hapus e' . Jika sisanya adalah *matching* maksimal di B_h , maka terdapat kontradiksi. Jika menghapus e' , tersisa pasangan titik *unsaturated* bertetangga $\{u', w'\}$ di B_h dengan *unsaturating* u' . Selanjutnya perluas $M - e - e'$ dengan $u'w'$. *Matching* maksimal di B_h dengan kardinalitasnya kurang dari $s(B_h)$, lagi-lagi merupakan kontradiksi. Oleh karena itu $s(B_{h+1}) > s(B_h)$, sehingga paling sedikit $s(B_{h+1}) \geq s(B_h) + 1$. $\square$

Proposisi 2.3. [5] $s(B_h) = h + 1$ jika dan hanya jika $B_h = A_h$.

Bukti. ($\Leftarrow$) Setiap sisi titik A_h membentuk *matching* maksimal dengan $s(A_h) \leq h + 1$. Dengan menggunakan Proposisi 2.1, karena $s(A_h) \geq h + 1$, maka diperoleh $s(A_h) = h + 1$.

($\Rightarrow$) Misalkan $s(B_h) = h + 1$. Terdapat $4h + 2$ titik pada B_h dan $2h + 2$ titik adalah *saturated* dengan kardinalitas *matching* maksimal M adalah $h + 1$. Sehingga menyisakan $2h$ titik terkait dengan $4h$ sisi yang tidak dalam M . Karena tidak ada titik berderajat satu, masing-masing titik *unsaturated* harus terkait dengan tepat dua sisi bukan M . Selanjutnya tidak ada heksagon yang tidak membuat tiga titik *unsaturated*. Oleh karena itu tiap heksagon memuat dua titik *unsaturated* berderajat 2 yang tidak bertetangga. Hal ini hanya dimungkinkan untuk A_h . $\square$

Proposisi 2.4. [5] $s(B_{h,1}) = h + 2$.

Bukti. Rantai Benzenoid $B_{h,1}$ mempunyai $k + m$ heksagon. *Matching* M memuat $k + m - 1$ sisi yang saling berbagi, satu sisi paralel dengan sisi yang saling berbagi pada masing-masing heksagon terminal, dan satu sisi yang terhubung dengan dua titik berderajat 2 pada heksagon *kinky*. Jumlah sisi-sisi tersebut jelas maksimal. Oleh karena itu $s(B_{h,1}) \leq k + m + 2$. Dengan menggunakan Proposisi 2.2, $s(B_{h,1})$ harus melebihi $s(A_h) = k + m + 1$, yaitu $s(B_{h,1}) \geq k + m + 2 = h + 2$. Jadi, $s(B_{h,1}) = k + m + 2 = h + 2$. $\square$

Proposisi 2.5. [5] Misal $B_{h,k}$ adalah Rantai Benzenoid dengan panjang h dengan k heksagon *kinky* sedemikian sehingga tidak ada dua heksagon *kinky* yang bertetangga. Maka $s(B_{h,k}) = h + k + 1$.

Bukti. Proposisi 2.4 adalah peluasan kasus dari Proposisi 2.3. Karena $s(B_{h,1}) = h + 2$, dan $B_{h,1}$ memuat satu heksagon *kinky*, maka $s(B_{h,1})$ dapat ditulis dalam bentuk lain yaitu $s(B_{h,1}) = (h + 1) + 1$. Akibatnya $B_{h,k}$ yang memuat k heksagon *kinky* sedemikian sehingga tidak ada dua heksagon yang bertetangga mempunyai $s(B_{h,k}) = h + k + 1$. $\square$

Proposisi 2.6. [5] Misal Z_h adalah fibbonacene dengan panjang h . Maka $s(Z_h) = \lfloor \frac{4h}{3} \rfloor + 1$.

Bukti. Berdasarkan Proposisi 2.2, tidak ada *matching* maksimal yang kardinalitasnya 4 pada Z_3 . Oleh karena itu untuk sebarang tiga heksagon *kinky* yang berurutan dalam suatu rantai mempunyai paling sedikit 4 *saturation number*-nya. Disisi lain, dua heksagon *kinky* yang berurutan dapat selalu ditambahkan ke B_h pada satu sisi di masing-masing heksagon *kinky*. Ini menunjukkan bahwa tiga heksagon *kinky* yang berurutan tidak mengharuskan lebih dari 4 sisi yang baru. Formula eksak mengikuti pencocokan bentuk umum *saturation number* pada *fibbonacene* pendek. $\square$

3. Kesimpulan

Pada makalah ini telah ditentukan *saturation number* pada rantai Benzenoid serta telah dikaji perilaku *saturation number* pada beberapa bentuk rantai Benzenoid.

4. Ucapan Terima kasih

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Bapak Prof. Dr. Syafrizal Sy, Ibu Dr. Lyra Yulianti, Bapak Dr. Mahdhivan Syafwan, Bapak Dr. Admi Nazra, Bapak Narwen, M.Si, yang telah memberikan masukan dan saran sehingga makalah ini dapat diselesaikan dengan baik.

Daftar Pustaka

- [1] Alexandru T. Balaban. 1985. Applications of Graph Theory in Chemistry. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*. **25**: 334 – 343.
- [2] Benko, Gill, Cristoph Flamm, dan Peter F Stadler. 2003. A Graph-Based Toy Model of Chemistry. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*. 43:1085-1093.
- [3] Bondy, J. A. dan U. S. R. Murty. 1976. *Graph Theory with Applications*. Macmillan, London.
- [4] Diestel, Reinhard. 2005. *Graph Theory*. Electric Edition. Springer-Verlag Heidelberg, New York.
- [5] Doslic, Tomislav dan Irane Zubac. 2015. Saturation Number of Benzenoid Graph. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*. **73**: 491 – 500.

- [6] Hartsfield, Nora dan Gerhard Ringel. 1990. *Pearls in Graph Theory: A Comprehensive Introduction*. Academic Press Limited, London.
- [7] Meifiani, Nely Indra. Aplikasi *Cayley Tree* dalam Menentukan Banyak Isomer Senyawa Alkana. Skripsi S-1. Tidak diterbitkan.
- [8] N.L. Biggs, R.J. Lloyd dan R.J. Wilson. 1986. *Graph Theory 1736-1936*. Clarendon Press, Oxford.
- [9] S. J. Cyvin dan I. Gutman. 1988. *Kekulé Structures in Benzenoid Hydrocarbons*. Springer, Berlin.