

ARTIKEL PENELITIAN

Analisis Hubungan Nilai Indeks Zagreb dengan Titik Didih dan Kestabilan Senyawa Kerangka Dasar Calamenene

M. Ibnu Sabil¹, Miftahurrahman², I Gede Adhitya Wisnu Wardhana², Ni Komang Tri Dharmayani^{1,*}

¹Program Studi Kimia, Universitas Mataram, Mataram, Indonesia

²Program Studi Matematika, Universitas Mataram, Mataram, Indonesia

*Penulis korespondensi: tri.dharmayani@unram.ac.id

Diterima: 13 Januari 2025; Direvisi: 10 September 2025; Disetujui: 22 September 2025; Dipublikasi: 1 November 2025.

Abstrak: Senyawa baru dysoxyphenol hasil isolasi dari *Dysoxylum densiflorum* yang memiliki kerangka dasar calamenene. Struktur senyawa dysoxyphenol termasuk ke dalam golongan sesquiterpene. Penelitian ini membahas terkait dengan hubungan perhitungan nilai Indeks Zagreb dengan sifat fisik dan kestabilan dua senyawa yaitu calamenene dan dysoxyphenol. Indeks Zagreb yang terdiri dari indeks pertama dan kedua, untuk mengukur stabilitas struktural graf melalui jumlah kuadrat derajat simpulnya. Tujuan analisis ini adalah untuk mencari nilai Indeks Zagreb dari senyawa calamenene dan dysoxyphenol digunakan sebagai parameter pengukuran titik didih serta kestabilan senyawa berdasarkan nilai indeks Zagreb yang dihasilkan. Analisis ini dilakukan dengan mengkaji struktur senyawa calamenene dan dysoxyphenol. Struktur yang didapat kemudian dianalisis grafnya. Hasil penelitian ini menunjukkan nilai Indeks Zagreb pertama dan kedua calamenene 262 dan 340 lebih kecil dibandingkan nilai Indeks Zagreb pertama dan kedua dysoxyphenol 264 dan 350, hal ini menandakan bahwa titik didih dari calamenene lebih rendah dibandingkan dysoxyphenol dan calamenene lebih stabil dibandingkan dysoxyphenol. Berdasarkan hal ini, Indeks Zagreb pertama dan kedua dapat dijadikan sebagai parameter perbandingan untuk mengetahui perbedaan sifat fisik dari dua atau lebih senyawa yang berbeda.

Kata Kunci: Calamenene, Dysoxyphenol, Indeks Zagreb, Sesquiterpene

Abstract: A new compound, dysoxyphenol, isolated from *Dysoxylum densiflorum*, has a calamenene-based framework. The structure of dysoxyphenol is classified as a sesquiterpene. This study discusses the relationship between Zagreb Index values and the physical properties and stability of two compounds: calamenene and dysoxyphenol. The Zagreb Index, consisting of the first and second indices, is used to measure the structural stability of a graph through the sum of squared vertex degrees. The objective of this analysis is to determine the Zagreb Index values for calamenene and dysoxyphenol, to measure the boiling points and stability of the compounds. This study analyses the structures of calamenene and dysoxyphenol. The obtained structures were then analyzed graphically. The results of this study show that the first and second Zagreb Index values for calamenene are 262 and 340, which are smaller compared to the first and second Zagreb Index values for dysoxyphenol, which are 264 and 350, respectively. This indicates that calamenene has a lower boiling point than dysoxyphenol and is more stable than dysoxyphenol. Accordingly, the first

and second Zagreb indices can serve as comparative parameters to characterize the differences in the physical properties of two or more distinct compounds.

Keywords: Calamenene, Dysoxyphenol, Zagreb Index, Sesquiterpene

1. Pendahuluan

Calamenene adalah jenis terpenoid yang telah diidentifikasi dalam studi senyawa yang berasal dari African Basidiomycete *Heimiomyces* sp. [1]. Kerangka dasar calamenene juga dapat ditemukan dari hasil isolasi *Dysoxylum densiflorum*. *Dysoxylum densiflorum* adalah spesies tanaman yang termasuk dalam keluarga Meliaceae, yang umumnya ditemukan di daerah tropis [2]. Senyawa yang diisolasi dari *Dysoxylum densiflorum* termasuk ke dalam golongan senyawa sesquiterpene. Sesquiterpene adalah golongan terpena yang terdiri dari tiga unit isoprena, yang menghasilkan rumus molekul $C_{15}H_{24}$ [3].

Sesquiterpene dapat berasal dari berbagai sumber tanaman dan sering terlibat dalam mekanisme pertahanan tanaman dan interaksi dengan penyerbuk. Strukturnya dapat sangat bervariasi, yang menghasilkan berbagai macam sifat kimia dan aplikasi potensial [3]. Senyawa baru fenolik sesquiterpene yang diisolasi dari ekstrak *Dysoxylum densiflorum* yaitu dysoxyphenol [4].

Teori graf, salah satu bidang matematika yang semakin berpengaruh, telah menemukan berbagai aplikasi dalam berbagai bidang, khususnya matematika dan Kimia. Salah satu area penelitian yang sangat menarik adalah investigasi indeks Zagreb, sebuah deskriptor topologis yang telah mendapatkan perhatian signifikan dalam ranah teori graf kimia [5]. Indeks Zagreb, yang pertama kali diperkenalkan dalam konteks teori graf kimia, merupakan sebuah invarian numerik yang menyandikan informasi struktural dari suatu graf [6]. Invarian ini telah banyak dipelajari dan diterapkan pada berbagai struktur molekuler, memberikan wawasan tentang sifat fisikokimia mereka [5, 7].

Penelitian tentang indeks topologi dalam teori graf telah berkembang pesat seiring dengan meningkatnya aplikasi lintas disiplin, seperti kimia, teori jaringan, dan matematika terapan. Indeks Zagreb, yang terdiri dari indeks pertama dan kedua, telah lama digunakan untuk mengukur stabilitas struktural graf melalui jumlah kuadrat derajat simpulnya [8]. Indeks topologis, seperti indeks Zagreb, telah banyak diteliti dalam bidang kimia matematika karena kemampuannya menangkap informasi struktural molekul. Pengembangan polinomial grafis dan indeks terkaitnya telah menjadi fokus penelitian terkini, karena dapat memberikan wawasan berharga tentang topologi berbagai struktur kimia [9]. Konsep pemodelan struktur kimia sebagai graf, di mana atom berkorespondensi dengan simpul dan ikatan dengan sisi, telah menjadi landasan dari teori graf kimia [10].

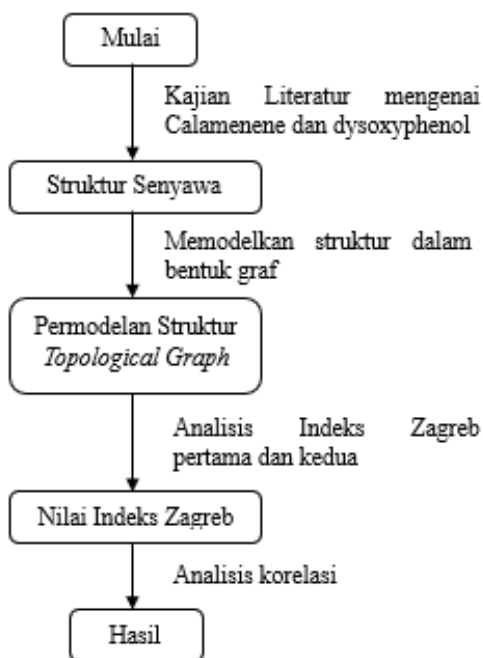
Penelitian ini bertujuan untuk memodelkan senyawa hasil isolasi *Dysoxylum densiflorum* dan calamenene kedalam bentuk graf, serta mencari nilai indeks zagreb pertama dan kedua dari senyawa tersebut yang digunakan sebagai parameter pengukuran titik didih serta kestabilan senyawa berdasarkan nilai indeks zagreb yang dihasilkan.

2. Metode

Adapun prosedur penelitian dalam menyelesaikan penelitian ini sebagai berikut:

- Studi literatur mengenai senyawa Calamenene dan dysoxyphenol serta Indeks Zagreb pada graf.
- Memodelkan struktur senyawa kimia yang didapat dengan bantuan ChemDraw dalam bentuk graf.
- Menganalisis dan mencari nilai Indeks Zagreb Pertama dan Kedua.

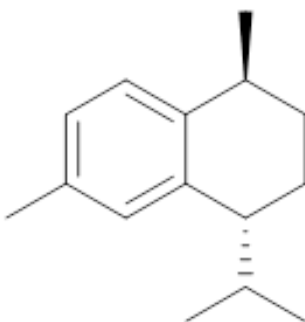
- Melihat hubungan Nilai indeks zagreb kedua senyawa dengan sifat kimia senyawa.



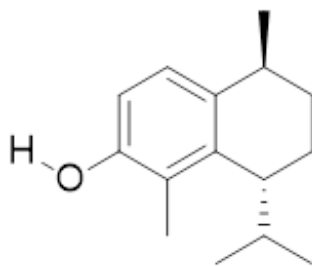
Gambar 2.1: Diagram alir penelitian

3. Hasil dan Pembahasan

Dysoxyphenol adalah senyawa hasil isolasi *Dysoxylum densiflorum* yang mana merupakan contoh senyawa dari sesquiterpene yang memiliki struktur dasar dari calamenene, di mana memiliki karbon metil (C-15) pada C-5 [4]. Kedua senyawa kerangka dasar calamenene ini dianalisis melalui Indeks Zagreb yang menunjukkan hubungan antara jumlah indeks dengan nilai titik didih dan kestabilan senyawa.



Gambar 3.2: Struktur Calamenene



Gambar 3.3: Struktur Dysoxyphenol

Indeks Zagreb terdiri dari Indeks Zagreb pertama dan kedua, didefinisikan secara berturut-turut sebagai jumlah kuadrat dari derajat setiap simpul pada suatu graf dan sebagai jumlah hasil kali setiap simpul yang terhubung langsung pada suatu graf. Keduanya dinotasikan sebagai berikut [11]:

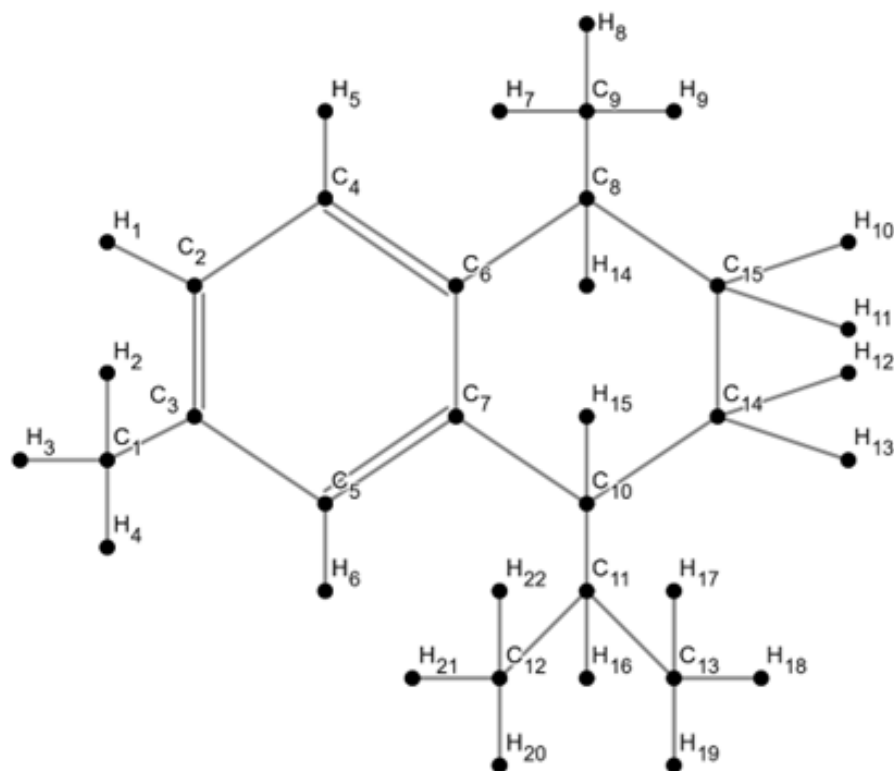
$$M_1(G) = \sum_{u \in V(G)} (\deg(u))^2 \quad (3.1)$$

$$M_2(G) = \sum_{u,v \in V(G)} \deg(u) \times \deg(v) \quad (3.2)$$

Selanjutnya, mencari nilai indeks zagreb dari senyawa tersebut.

3.1. Nilai Indeks Zagreb Struktur dasar Calamenene

Struktur dasar Calamenene di representasikan terlebih dahulu ke dalam bentuk graf, agar dapat dicari nilai Indeks Zagrebnya.



Gambar 3.4: Representasi graf dari struktur Senyawa Calamenene

selanjutnya dihitung nilai Indeks Zagreb pertama dan keduanya.

Indeks Zagreb Pertama

$$\begin{aligned} M_1(G) &= \sum_{u \in V(G)} (\deg(u))^2 \\ &= \sum_{H \in V(G)} (\deg(H))^2 + \sum_{C \in V(G)} (\deg(C))^2 + \sum_{O \in V(G)} (\deg(O))^2 \end{aligned}$$

Pada gambar graf di atas, diketahui bahwa jumlah unsur H ialah 22, dan jumlah unsur C adalah 15. Sehingga persamaan di atas dapat ditulis menjadi:

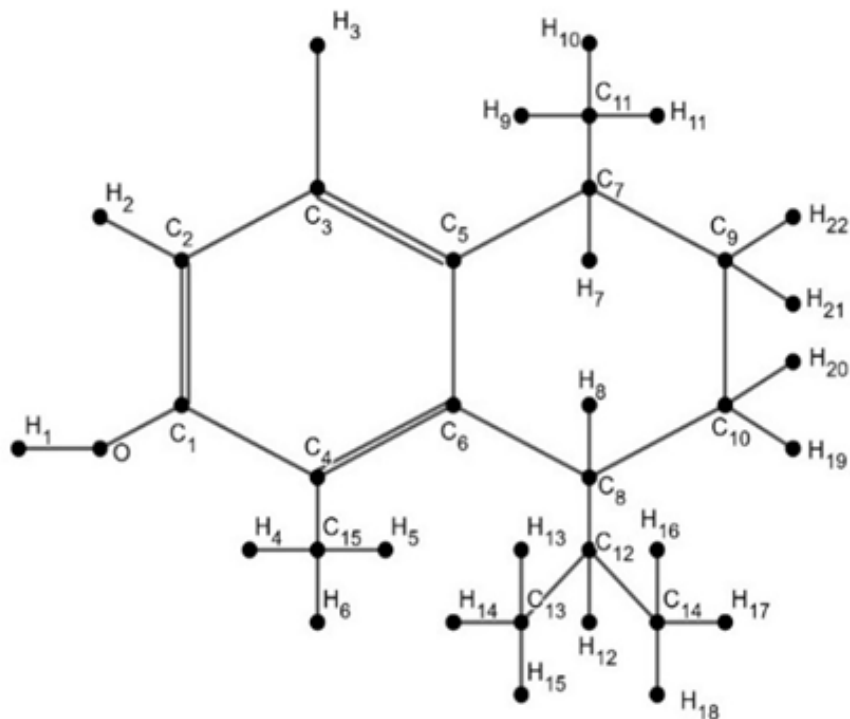
$$\begin{aligned} M_1(G) &= 22 \times (\deg(H))^2 + 15 \times (\deg(C))^2 \\ &= 22 \times (1^2) + 15 \times (4^2) \\ &= 22 + 240 \\ &= 262 \end{aligned}$$

Indeks Zagreb Kedua

$$\begin{aligned} M_2(G) &= \sum_{u,v \in E(G)} \deg(u) \times \deg(v) \\ &= \sum_{H,C \in E(G)} \deg(H) \times \deg(C) + \sum_{C,C \in E(G)} \deg(C) \times \deg(C) \\ &= 21[\deg(H) \times \deg(C)] + 16[\deg(C) \times \deg(C)] \\ &= 21[1 \times 4] + 16[4 \times 4] \\ &= 84 + 256 \\ &= 340 \end{aligned}$$

3.2. Nilai Indeks Zagreb Senyawa *dysoxyphenol*

Struktur senyawa *dysoxyphenol* direpresentasikan kedalam bentuk graf seperti berikut ini



Gambar 3.5: Representasi graf dari struktur Senyawa dysoxyphenol

Molekul diatas terdiri dari tiga unsur berbeda, Yaitu unsur H, C, dan O. Ketiga unsur tersebut elektron terluar yang dapat berikatan berbeda beda, yaitu elektron yang berikatan pada H ialah 1, pada C ialah 4, dan pada O ialah 2. Dalam konteks teori graf kimia, jumlah eletron yang berikatan dianggap simpul pada graf, dan ikatan yang menghubungkan dua unsur dianggap sisi. Untuk sisi ganda, pada perhitungan Indeks Zagrebnya hanya dihitung satu kali.

Indeks Zagreb Pertama

$$\begin{aligned}
 M_1(G) &= \sum_{u \in V(G)} (\deg(u))^2 \\
 &= \sum_{H \in V(G)} (\deg(H))^2 + \sum_{C \in V(G)} (\deg(C))^2 + \sum_{O \in V(G)} (\deg(O))^2
 \end{aligned}$$

Pada gambar graf di atas diketahui bahwa jumlah unsur H ialah 22, jumlah unsur C adalah 15, dan jumlah unsur O adalah 1. Sehingga persamaan di atas dapat ditulis menjadi:

$$\begin{aligned}
 M_1(G) &= 22 \times (\deg(H))^2 + 15 \times (\deg(C))^2 + (\deg(O))^2 \\
 &= 22 \times (1^2) + 15 \times (4^2) + (2^2) \\
 &= 22 + 240 + 2 \\
 &= 264
 \end{aligned}$$

Dari perhitungan di atas, didapat bahwa nilai indeks zagreb dari senyawa dysoxyphenol ialah 264.

Indeks Zagreb Kedua

$$\begin{aligned}
 M_2(G) &= \sum_{u,v \in E(G)} \deg(u) \times \deg(v) \\
 &= \sum_{H,O \in E(G)} \deg(H) \times \deg(O) + \sum_{H,C \in E(G)} \deg(H) \times \deg(C) + \sum_{C,O \in E(G)} \deg(C) \times \deg(O) \\
 &\quad + \sum_{C,C \in E(G)} \deg(C) \times \deg(C) \\
 &= \deg(H) \times \deg(O) + 21[\deg(H) \times \deg(C)] + \deg(C) \times \deg(O) + 16[\deg(C) \times \deg(C)] \\
 &= 1 \times 2 + 21[1 \times 4] + 4 \times 2 + 16[4 \times 4] \\
 &= 2 + 84 + 8 + 256 \\
 &= 350
 \end{aligned}$$

Hasil yang didapatkan dari perhitungan Indeks Zagreb pada Tabel 3.1 menunjukkan bahwa kedua senyawa calamenene dan dysoxyphenol menandakan adanya hubungan sifat fisik senyawa yaitu nilai titik didihnya, semakin besar nilai Indeks Zagreb yang dihasilkan nilai titik didih dari suatu senyawa tersebut akan cenderung semakin tinggi, karena semakin panjang rantai dan semakin bercabang suatu struktur senyawa, dalam kata lain semakin besar struktur senyawanya nilai titik didihnya akan semakin tinggi [12].

Tabel 3.1: Nilai Indeks Zagreb Senyawa Calamenene dan Dysoxyphenol

Senyawa	Nilai Indeks Zagreb Pertama	Nilai Indeks Zagreb Kedua
Calamenene	262	340
dysoxyphenol	264	350

Perbedaan nilai Indeks tersebut juga menyatakan kestabilan suatu senyawa, dimana senyawa calamenene memiliki nilai indeks yang lebih rendah, menandakan bahwa senyawa calamenene lebih stabil dibandingkan dysoxyphenol, semakin rendah nilai Indeksnya maka energi senyawa tersebut juga akan semakin rendah yang menandakan bahwa senyawa tersebut stabil. Energi senyawa ini dihitung melalui aplikasi Avogadro.

Tabel 3.2: Energi Senyawa Calamenene dan Dysoxyphenol

Senyawa	Energi (Kj/mol)
Calamenene	237.803
Dysoxyphenol	316.556

4. Kesimpulan

Nilai indeks yang didapatkan pada senyawa calamenene dan dysoxyphenol menunjukkan bahwa hubungan antara sifat fisik serta kestabilan senyawa dapat diukur menggunakan Indeks Zagreb. Nilai Indeks Zagreb yang semakin tinggi menunjukkan tingkat titik didih yang semakin besar, sedangkan pada kestabilannya, semakin besar nilai Indeks Zagreb maka energi suatu senyawa tersebut semakin rendah yang menandakan bahwa senyawa tersebut lebih stabil. Nilai Indeks Zagreb calamenene lebih kecil dibandingkan dysoxyphenol, hal ini menyatakan titik didih calamenene lebih rendah dibandingkan dysoxyphenol, sebaliknya calamenene lebih stabil dibandingkan dysoxyphenol dilihat dari data yang di dapatkan pada Tabel 3.1 dan Tabel 3.2.

Referensi

- [1] T. Cheng, C. Chepkirui, C. Decock, J. C. Matasyoh, and M. Stadler, "Heimiomyces a-c and calamenens from the african basidiomycete heimiomyces sp.," *Journal of Natural Products*, vol. 83, no. 8, pp. 2501–2507, 2020. [View online](#).
- [2] A. Sundowo, L. D. Antika, L. Meilawati, A. Randy, N. Artanti, and M. Hanafi, "Phytochemical contents and antioxidant activity of dysoxylum densiflorum extract and fractions," in *E3S Web of Conferences*, vol. 503, p. 07006, EDP Sciences, 2024. [View online](#).
- [3] F. F. Sofian, A. Subarnas, M. Hakoza, S. Uesugi, T. Koseki, and Y. Shiono, "Tridysoxyphenols a and b, two new trimeric sesquiterpene phenols from dysoxylum parasiticum leaves," *Phytochemistry Letters*, vol. 50, pp. 134–140, 2022. [View online](#).
- [4] N. K. T. Dharmayani, T. Yoshimura, E. Hermawati, L. D. Juliawaty, and Y. M. Syah, "Antibacterial and antifungal two phenolic sesquiterpenes from dysoxylum densiflorum," *Zeitschrift für Naturforschung C*, vol. 75, no. 1-2, pp. 1–5, 2020. [View online](#).
- [5] O. Ivanciuc, T. Ivanciuc, and M. Diudea, "Molecular graph matrices and derived structural descriptors," *SAR and QSAR in Environmental Research*, vol. 7, no. 1-4, pp. 63–87, 1997. [View online](#).
- [6] K. C. Das and I. Gutman, "Some properties of the second zagreb index," *MATCH Commun. Math. Comput. Chem*, vol. 52, no. 1, pp. 3–1, 2004. [View online](#).
- [7] M. R. Gayatri, R. Fadhillah, S. T. Lestari, L. F. Pratiwi, A. Abdurahim, and I. G. A. W. Wardhana, "Topology index of the coprime graph for dihedral group of prime power order," *Jurnal Diferensial*, vol. 5, no. 2, pp. 126–134, 2023. [View online](#).
- [8] E. Y. Asmarani, S. T. Lestari, D. Purnamasari, A. G. Syarifudin, S. Salwa, and I. G. A. W. Wardhana, "The first zagreb index, the wiener index, and the gutman index of the power of dihedral group," *CAUCHY: Jurnal Matematika Murni dan Aplikasi*, vol. 7, no. 4, pp. 513–520, 2023. [View online](#).
- [9] S. H. P. Ningrum, A. M. Siboro, S. T. Lestari, I. G. A. W. Wardhana, and Z. Y. Awanis, "Abstraksi chemical topological graph (ctg) melalui indeks topologis graf aljabar," *Prosiding SAINTTEK*, vol. 6, pp. 92–100, 2024. [View online](#).
- [10] D. P. Malik, M. N. Husni, M. Miftahurrahman, I. G. A. W. Wardhana, G. Semil, *et al.*, "The chemical topological graph associated with the nilpotent graph of a modulo ring of prime power order," *Journal of Fundamental Mathematics and Applications (JFMA)*, vol. 7, no. 1, pp. 1–9, 2024. [View online](#).
- [11] I. Gutman, B. Furtula, Ž. Kovijanić Vukićević, and G. Popivoda, "On zagreb indices and coindices," *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 2015. [View online](#).
- [12] U. T. Santoso, "Analisis hubungan kuantitatif struktur-titik didih normal senyawa haloetana," *Jurnal Berkala Ilmiah Sains dan Terapan Kimia*, vol. 10, no. 2, pp. 81–90, 2016. [View online](#).

Format Sitasi IEEE:

M. I. Sabil dkk. "Analisis Hubungan Nilai Indeks Zagreb dengan Titik Didih dan Kestabilan Senyawa Kerangka Dasar Calamenene", *Jurnal Diferensial*, vol. 7(2), pp. 164-171, 2025.

This work is licensed under a [Creative Commons "Attribution-ShareAlike 4.0 International"](#) license.

